

# Schlussbericht zum Verbundprojekt OptiPro

## Teilvorhaben der RWTH Aachen

<b>Vorhabenbezeichnung:</b> <i>OptiPro</i> - Optimierte Zellfinalisierung durch innovative Anlagentechnik und parametergestützter Auswertung der Prozess- und Qualitätsparameter im virtuellen Produktionssystem	
<b>Zuwendungsempfänger:</b> RWTH Aachen University	<b>Förderkennzeichen:</b> 03XP0364A
<b>Projektleitung:</b> Prof. Dr.-Ing. Achim Kampker (PEM, Projektkoordination)	<b>Projektlaufzeit/ Berichtszeitraum:</b> 01.03.2021 – 31.12.2024

## Teil II – Eingehende Darstellung

GEFÖRDERT VOM



Bundesministerium  
für Bildung  
und Forschung

*Das diesem Bericht zugrundeliegende Vorhaben wurde mit Mitteln des Bundesministeriums für Bildung und Forschung unter dem Förderkennzeichen [03XP0364A] gefördert. Die Verantwortung für den Inhalt dieser Veröffentlichung liegt bei den Autoren.*

## II. Eingehende Darstellung

### 1. Ausführliche Darstellung der im Rahmen des Vorhabens durchgeführten Arbeiten mit Vergleich zur ursprünglichen Vorhabenbeschreibung.

Das Forschungsprojekt OptiPro wurde vom 01. März 2021 bis zum 31. Dezember 2024 im Rahmen des Kompetenzclusters InZePro unter Beteiligung der RWTH Aachen durchgeführt. Innerhalb des definierten Zeitraums war die RWTH Aachen in folgenden Arbeitspaketen und Unterarbeitspaketen beteiligt:

#### **AP1 – Analyse der Einflussparameter und Diagnosemethoden**

- UAP 1.1: Analyse eingesetzter Qualitätsparameter zur Überwachung produktionsbedingter Varianz
- UAP 1.2: Benchmarking der bereits integrierten Messverfahren
- UAP 1.3: Identifikation relevanter Prozessparameter entlang der Finalisierung

#### **AP2 – Aufbau und Untersuchung der Messverfahren**

- UAP 2.1: Integration zusätzlicher Messverfahren
- UAP 2.2: Entwicklung erweiterter Anlagen und Warenträger
- UAP 2.3: Verifizierung der Anlagen und Durchführung einer Referenzkampagne
- UAP 2.4: Digitale Vernetzung der Maschinen und Anlagen

#### **AP3 – Automatisierte Algorithmik zur Messdatenauswertung**

- UAP 3.1: Ermittlung von Prozess- und Qualitätsparametern der Zwischenprodukte
- UAP 3.2: Verknüpfung von Mess-, Qualitäts- und Steuerungsparametern
- UAP 3.3: Automatisierung der Datenauswertung
- UAP 3.4: Abgleich der Modelle mit EOL-Parametern

#### **AP4 – Erstellung des virtuellen Produktionssystems**

- UAP 4.1: Konzeptionierung des virtuellen Produktionssystems
- UAP 4.2: Verknüpfung von realem und virtuellem Produktionssystem
- UAP 4.3: Training des Optimierungstools
- UAP 4.4: Integrationstest

#### **AP5 – Validierung der Ergebnisse und Wirtschaftlichkeitsbetrachtung**

- UAP 5.1: Testläufe der Zellfinalisierung
- UAP 5.2: Elektrische Validierung mit Lebensdauertests
- UAP 5.3: Elektrochemische Validierung mittels Labormethoden
- UAP 5.4: Wirtschaftlichkeitsbetrachtung

Die Arbeiten konzentrierten sich auf die durchgängige Digitalisierung und Vernetzung der Prozessschritte der Zellfinalisierung, den Einsatz innovativer Messtechnik und automatisierter Datenanalyseverfahren sowie die Entwicklung eines virtuellen Produktionssystems zur Optimierung von Prozesszeit, Qualität und Ressourceneinsatz.

## AP1: Analyse der Einflussparameter und Diagnosemethoden

### UAP 1.1: Analyse eingesetzter Qualitätsparameter zur Überwachung produktionsbedingter Varianz

Zu Beginn des Projekts wurde der Stand von Wissenschaft und Technik zu den Prozessschritten der Zellfinalisierung systematisch analysiert. Betrachtet wurden insbesondere relevante Qualitätsparameter, deren Toleranzen, Durchlaufzeiten und typische Ausschussquoten. Die Erkenntnisse wurden in einer umfassenden Übersicht in Form einer Exceltabelle zu Produktionsparametern in den Pilotanlagen der Projektpartner und aus der Großserie zusammengeführt. Neben Literaturdaten wurden Ergebnisse aus Expertengesprächen mit Anlagenbauern, Zellherstellern und OEMs einbezogen. Die Tabelle enthält zusätzlich definierte Toleranzbereiche, um die Sensitivität der Parameter gegenüber Qualitätsabweichungen zu bewerten. Das Ergebnisdokument wurde in einem projektinternen Workshop diskutiert, klassifiziert und diente im weiteren Projektverlauf als zentrale Referenz für Ursache-Wirkungs-Analysen in den nachfolgenden Arbeitspaketen. Im Nachfolgenden findet sich ein beispielhafter Auszug aus der Tabelle.

Parameter	Einheit	Q-Rel 1 - 5	Qualitätsparameter	Auswirkungen / Kausalität	Forschungsanlage iw@TUM			Forschungsanlage PEM@RWTH			Großserienproduktion Industrie		
					Typisch. Wert	Toleranz	Quelle	Typisch. Wert	Toleranz	Quelle	Typisch. Wert	Toleranz	Quellen
Umgebungsdruck / Arbeitsdruck / Vakuumdruck	mbar	2	x	Arbeitsdruck gering, um hygroskopischen Elektrolyten zu schützen und die entstehende Gasmengen in den porösen Medien zu reduzieren	20-25	10	iw@TUM	100-400	50	PEM RWTH	10-100	10	[1,2,3] + Experten Workshop
...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...

Abbildung 1: Auszug Parametertabelle

### UAP 1.2: Benchmarking der bereits integrierten Messverfahren

Es wurden bestehende Messverfahren in den Anlagen der Zellfinalisierung erfasst, bewertet und hinsichtlich ihrer Optimierungspotenziale untersucht. Seitens des FTM lag der Fokus auf der Verkürzung des End-of-Line-Tests. Verschiedene Ansätze wurden geprüft, darunter optimierte Selbstentladebestimmungen, die Integration von elektrochemischer Impedanzspektroskopie (EIS) in den Prüfablauf, die Verkürzung von Relaxationszeiten sowie die Entwicklung einer neuartigen „multi-cell“-Testmethodik. Während einige Optionen aus fachlichen Gründen nicht weiterverfolgt wurden, konnte ein EOL-Test mit EIS etabliert und die „multi-cell“-Testung als vielversprechender Ansatz implementiert werden. Seitens des PEM wurden die eingesetzten Messverfahren entlang der Finalisierungsschritte aufgenommen und hinsichtlich des Mehrwerts und der Herausforderungen bewertet. Diese umfassten unter anderem Befülldauer, Druckmessung und Wägung beim Elektrolytfüllen, Spannungs-, Strom- und Temperaturmessung beim Formieren, Druckmessung beim Entgasen sowie optische und elektrische Prüfungen am EOL-Test. Ziel war es, bestehende Verfahren zu digitalisieren, zusätzliche Messverfahren zu entwickeln und so eine bessere Bewertung von Produktqualität und Prozessabläufen zu ermöglichen. Die Digitalisierung erlaubt zudem eine Echtzeit-Datenerfassung und -auswertung, wodurch manuelle Arbeitsschritte entfallen und Zeit- sowie Ressourceneinsparungen möglich sind.

### UAP 1.3: Identifikation der relevanten Prozessparameter entlang der Zellfinalisierung

Basierend auf Literatur- und Anlagendaten wurden zentrale Prozessparameter entlang der Zellfinalisierung ermittelt. Als besonders kritisch wurde die Benetzungsdauer identifiziert, da sie stark von Zellformat und Materialeigenschaften abhängt und bisher auf Erfahrungswerten basiert. Für die Inline-Erfassung des Benetzungsgrads wurde der Einsatz der EIS betrachtet, um die Prozesszeit gezielt zu reduzieren. Neben der Benetzung wurde auch die Bildung der

Passivierungsschicht (SEI) während der Formierung analysiert, da diese den Zellwiderstand und damit die Leistungsfähigkeit maßgeblich beeinflusst. Das Messverfahren EIS soll dabei in mehreren Prozessschritten an sogenannten „Quality Gates“ eingesetzt werden, um eine kosten- und zeiteffiziente Nutzung zu gewährleisten, wie im Folgenden dargestellt.

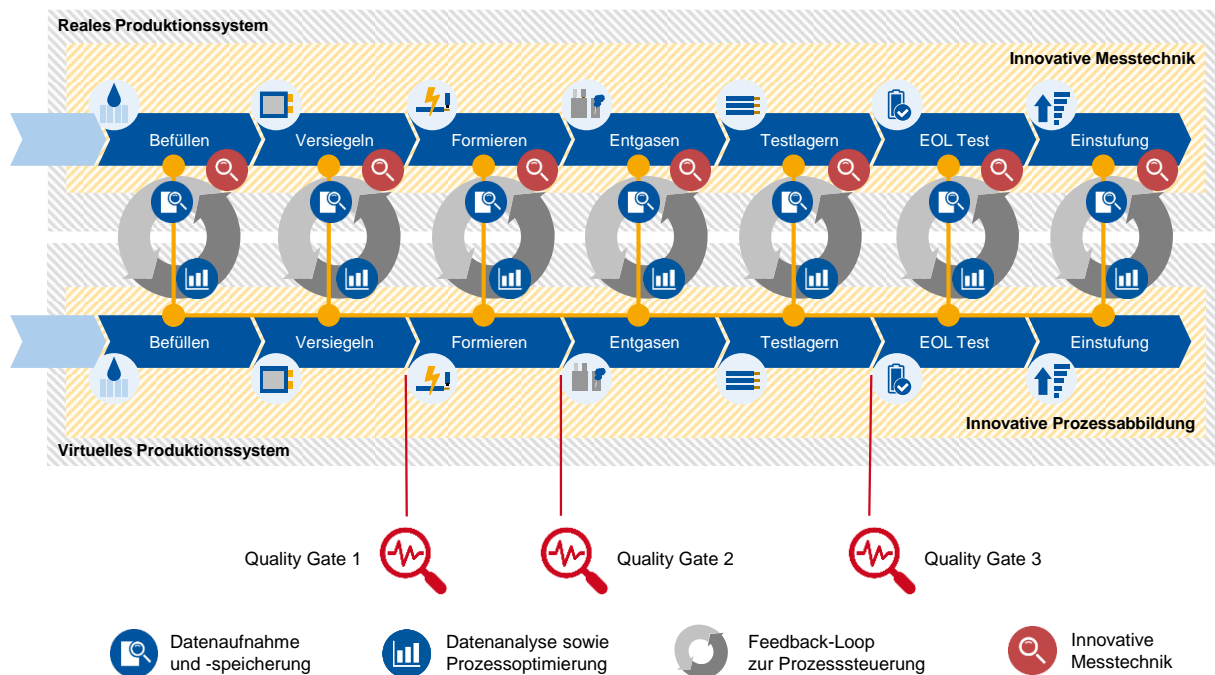


Abbildung 2: Planung der Quality Gates im Produktionsprozess

## AP 2: Aufbau und Untersuchung der Messverfahren

### UAP2.1: Integration zusätzlicher Messverfahren

Im Projekt wurde die elektrochemische Impedanzspektroskopie (EIS) als zusätzliches Messverfahren ausgewählt und in die Elektrolytbefüllanlage des PEM der RWTH Aachen integriert. Die Anlage führt neben der Befüllung auch Entgasung, Endversiegelung und Dichtigkeitsprüfung durch, sodass EIS-Messungen in allen diesen Teilprozessen möglich sind.

Zur Umsetzung wurden vier Multi-Sinus-fähige EIS-Geräte der Firma Safion beschafft. Diese Technologie überlagert die Anregungsfrequenzen anstatt sie nacheinander einzuspeisen. Dadurch verkürzen sich die Messzeiten erheblich, was für den Serieneinsatz kurze Taktzeiten ermöglicht. Ein Gerät wurde in das Technikkompartiment des Mini-Environment der Elektrolytbefüllung integriert, ein weiteres im Bereich der Formierung. Die übrigen Geräte werden flexibel für Messungen nach der Formierung, im Aging oder im EoL-Test genutzt.

Die Integration in die Befüllanlage war aufgrund begrenzten Bauraums und schwieriger Zugänglichkeit aufwendig. Um eine werkzeuglose und zuverlässige Kontaktierung zu gewährleisten, wurden Kontaktblöcke mit innenliegenden Blattfedern installiert, die die Zelle beidseitig kontaktieren. Dies ermöglicht eine echte Vierpolmessung direkt an der Zelle. Die Kontaktierung wurde über verdrehte Kabel aus der Einhausung der Befüllanlage

herausgeführt und über Bananenstecker mit der EIS-Elektronik verbunden. Details des Aufbaus sind nachfolgend dargestellt.



Abbildung 3: Einbau und Anbindung der Kontaktblöcke (links) und Durchführung der Verkabelung nach außen (rechts)

Zur Überprüfung der Messgenauigkeit wurden Vergleichsmessungen durchgeführt, bei denen identische Zellen unter gleichen Bedingungen sowohl direkt am Safion-Gerät als auch über die integrierte Kontaktierung gemessen wurden. Mehrfachmessungen ergaben keine signifikanten Unterschiede zwischen den Signalwegen, womit die Aussagekraft der integrierten EIS-Messung bestätigt wurde.

Zusätzlich wurde ein Zelltester der Firma Ametek angeschafft, der EIS-Messungen während der Formierung auf allen Kanälen parallel ermöglicht. Zusammen mit einem ebenfalls im Projekt beschafften Klimaschrank wurde er in den Anlagenpark des PEM integriert. Die vorgesehene Abluftinstallation sorgt dafür, dass im Fall einer defekten Zelle entstehende Gase über eine Filteranlage ins Freie abgeleitet werden.

Damit konnten die hardware- und softwareseitige Integration der Online-EIS-Messtechnik, die Inbetriebnahme des Batterietesters und Klimaschranks sowie die Digitalisierung der vorhandenen Anlagen erfolgreich abgeschlossen werden.

### **UAP2.2: Entwicklung erweiterter Anlagen und Warenträger**

Am PEM wurde ein leicht abweichender Warenträger entwickelt, der es ermöglicht mehrere Batteriezellen übereinander, jeweils zwischen zwei Platten mit Einlegern, mit Druck zu beaufschlagen. Je nach Konfiguration des Warenträgers können so mehrere Batteriezellen des PEM-Formats übereinander getestet werden. Dies erlaubt ein kompakteres Stapeln der Batteriezellen, sodass in den Klimakammern eine höhere Anzahl Batteriezellen gleichzeitig kontaktiert werden können. Dieser Warenträger ermöglicht es zusätzlich durch die Verwendung von 3D-gedruckten Bauteilen als Einleger, ein günstiges Verändern des Batteriezellformats. Der Warenträger funktionierte in der Referenzkampagne wie geplant, womit das Ziel dieses UAPs erreicht wurde.

Dieser wurde darüber hinaus so weiterentwickelt, dass zusätzliche Komponenten zur Messung der Gasentwicklung während der Formierung installiert werden können. Kernstück ist ein zweiteiliger, 3D-gedruckter Luftpolster-Einsatz, der an den Gastasche der Zelle angelegt wird. Ein flexibler Teil (TPU oder Silikon) liegt an der Zelle an, ein starrer Teil (PLA oder PP) dient als Halter. Das Luftpolster ist luftdicht verschlossen und mit einem Drucksensor ausgestattet, der Volumenänderungen erfasst, die durch die Ausdehnung der Gastasche der Batteriezelle entstehen.



Abbildung 4: Zellhalterung zur Druckbeaufschlagung des PEM

Die Konstruktion erlaubt eine schnelle Anpassung an verschiedene Zellformate und Gasmengen, indem das Innenvolumen, die Wandstärke und die Steifigkeit des flexiblen Teils angepasst werden. Ziel ist es, eine inline-fähige, nicht-invasive Messung in der Serienfertigung zu ermöglichen, um den Formierungsprozess besser planen und optimieren zu können.

### **UAP2.3: Verifizierung der Anlagen + Referenzkampagne**

Die Referenzkampagne am PEM der RWTH Aachen verfolgte zwei zentrale Ziele: Zum einen die Validierung bestehender und neu installierter Anlagentechnik, zum anderen die Überprüfung der Datenqualität und Plausibilität der erfassten Messwerte. Alle relevanten Produktions- und Messdaten konnten vollständig erfasst werden und entsprachen den erwarteten Referenzwerten. Sämtliche Anlagen arbeiteten dabei stabil und wie vorgesehen.

Die Fertigung der mehrlagigen Pouch-Zellen erfolgte auf Basis der im InZePro-Cluster abgestimmten Spezifikationen, die mit den an der TUM verwendeten Parametern übereinstimmen.

**Schneiden:** Die Anoden (182 × 119 mm) und Kathoden (178 × 115 mm) wurden mit einer Stanzmaschine und entsprechenden Werkzeugaufsätzen zugeschnitten.

**Z-Faltung:** Die Zellstapel wurden aus 15 doppelseitigen Anoden- und 14 doppelseitigen Kathodenlagen aufgebaut. Als Separator kam Celgard 2500 zum Einsatz.

**Kontaktieren und Verpacken:** Die Zelltabs wurden mittels Ultraschallschweißen (Schunk C20-B-L) mit definierter Leistungskurve kontaktiert. Anschließend wurden die Stapel in vorgefertigte Pouch-Folien eingesetzt, die zuvor tiefgezogen und an drei Seiten versiegelt wurden, um ein dichtes Zellgehäuse zu bilden.

**Befüllen:** Der verwendete Elektrolyt LP572 (1 M LiPF<sub>6</sub> in EC:EMC 3:7 mit 2 % VC) entsprach dem Material der TUM. Die Befüllung erfolgte unter Argon-Atmosphäre in einer Glovebox, nach Vakuumierung auf 0,15 mbar und Dosierung von 23,5 ml Elektrolyt bei 70 mbar. Im Anschluss wurde die Pouch-Zelle versiegelt. Während der Benetzung wurden fortlaufend OCV- und EIS-Messungen (Frequenzbereich 10 kHz bis 1 Hz, Amplitude 10 mV) mit einem Safion-Messsystem durchgeführt. Diese Messungen ermöglichten eine zeitaufgelöste Quantifizierung des Benetzungsprozesses.

**Formierung:** Die Zellen wurden mit dem im Projekt beschafften Zelltester (Ametek SI-9300R) in den speziell entwickelten Zellhaltern innerhalb einer Klimakammer (ClimeEvent, 25 °C) formiert. Das Formierprotokoll entsprach den Vorgaben des InZePro-Clusters.

Ein Teil der produzierten Zellen entsprach nicht den definierten Qualitätsanforderungen für Referenzdaten. Drei Zellen im engen Toleranzbereich wurden für detaillierte elektrochemische Analysen und Zyklisierung an das ISEA übergeben. An diesen Zellen wurden EIS-Messungen durchgeführt und die zyklische Belastung begonnen. Die Auswertungen lassen auf eine gute Datenqualität schließen.

*Tabelle 1: Daten der in der Referenzkampagne verwendeten Kathoden- und Anodenmaterialien*

Elektrode	Kathode	Anode
Aktivmaterial (Verhältnis) Massenanteil / wt%	NCM (6/2/2) 93.5	Graphit 96
Leitruß Massenanteil / wt%	CB 3.5	CB 2
Binder Massenanteil / wt%	PVDF 3	CMC & SBR 2
Ableiterfolie Dicke / µm	Al 15	Cu 14
Flächenkapazität / (mAh/cm <sup>2</sup> )	3.0	3.5
Beladung / (mg/cm <sup>2</sup> )	20.3	10.4
Porosität / %	33	31
Beschichtungsdicke / µm	66	70

#### **UAP 2.4: Digitale Vernetzung der Maschinen und Anlagen**

In UAP 2.4 soll nach dem Aufbau und der Verifikation der Anlagen und Messeinrichtungen in den UAPs 2.1 bis 2.3, eine digitale Vernetzung dieser Anlagen erfolgen. Diese Vernetzung soll den Datenaustausch ermöglichen zwischen den Anlagen und als eine zentrale Datensammlungseinheit dienen. Die Vernetzung umfasst sowohl die Teilanlagen in Aachen (PEM) als auch die in München (iwb). Ziel ist es, die Sensordaten mit Steuerungsparametern zu verknüpfen und in einer zentralen Datenbank abzuspeichern.

Das IQS erarbeitete im ersten Schritt gemeinsam mit den Partnern notwendige Anforderungen auf der Vernetzungsebene hinsichtlich verfügbarer Datenschnittstellen und -formaten. Um die Anlagen in ein digitalisiertes System zu überführen, wurde im nächsten Schritt ein Konzept für das Datenmanagement entwickelt, das die zuvor identifizierten diversen Schnittstellen der Maschinen abdeckt. Zentrale Herausforderung lag darin die Vielzahl verschiedener Geräte einzubinden mit unterschiedlichen, teilweise proprietären Schnittstellen.

Angesichts der Vielfalt an Geräten mit heterogenen Schnittstellen war es notwendig, ein flexibles Vernetzungskonzept zu erarbeiten. Dafür wurde ein modularer Aufbau gewählt, der zentrale Elemente (Server als Datensammlungs- und Verwaltungseinheit) mit dezentralen Komponenten (Adapterschnittstellen) verbindet. Ein Server mit REST-Schnittstelle dient in diesem Konzept als Hauptknoten, über den Daten verwaltet, gesammelt und an unterschiedliche Datenquellen beziehungsweise -senken weitergegeben werden können. Gemeinsam mit den Kollegen aus DataBatt wurde das technische Konzepte dahingehend erweitert, um zukünftig als Zellproduktions-Datenstandard zu fungieren.

Ein PowerEdge Server wurde für das zentrale Datenmanagement beschafft, in Betrieb genommen und sukzessive seit 2022 mit GPU-Karten erweitert. Diese ermöglichen nicht nur die performante Verarbeitung umfangreicher Messdaten, sondern auch die Entwicklung und Erprobung von Machine-Learning-Modellen direkt auf dem zentralen Datenspeicher.

Darüber hinaus wurden noch Adapterschnittstellen entwickelt, die dabei dienen sollen, eine mögliche nachgelagerte Integration neuer Anlagenbestandteile zu ermöglichen. Zur

Digitalisierung der Maschinen und Anlagen des iwB und PEM wurde das hier entwickelte Vernetzungskonzept verifiziert. Dies umfasste vorerst Windows-basierte lokale Datenspeicher und anschließend auch zentrale Datenspeicher der Institutsinfrastrukturen. Über einen speziell entwickelten Synchronisierungsklient werden sämtliche relevanten Messdaten an den zentralen Datenspeicher übertragen.

Mit der Entwicklung und Implementierung der flexiblen Dateninfrastruktur konnte eine skalier- und erweiterbare Basis für die Vernetzung von verschiedenen Anlagen und Geräte geschaffen werden. Das umgesetzte Konzept deckt dabei verschiedene Schnittstellen und Datenformate ab.

### AP 3: Automatisierte Algorithmik zur Messdatenauswertung

#### UAP 3.1: Ermittlung von Prozess- und Qualitätsparametern Zwischenprodukte

Zur Ermittlung der Prozess- und Qualitätsparameter wurden zunächst weitere Batteriezellen am PEM der RWTH Aachen produziert. Diese entsprechen den gleichen Spezifikationen wie die zuvor produzierten Batteriezellen. Die zugehörigen Daten sind nochmals in der Tabelle 2 dargestellt.

Da die Erfahrungen aus den zuvor produzierten Zellen gezeigt haben, dass bei den vor Ort assemblierten Batteriezellen erhöhte Qualitätsabweichungen vorliegen, wurden zusätzlich industriell assemblierte Pouch-Batteriezellen des Herstellers Li-Fun verwendet, die anschließend am PEM befüllt, versiegelt und formiert wurden. Die Daten dieser Batteriezellen sind in der nachfolgenden Tabelle 3 zum Vergleich dargestellt. Die etwas geringere Flächenbelastung sowie Beschichtungsdicke der Li-Fun Batteriezellen ermöglicht gleichzeitig höhere Ströme in Formierung und Zyklisierung. Diese Auslegung wurde gewählt, um das Verhalten während der Formation der Zellen im späteren Projektverlauf für unterschiedliche Zellauslegungen vergleichen zu können und so die Übertragbarkeit der Projektergebnisse zu analysieren.

Tabelle 2: Daten der in der Produktionskampagne verwendeten Kathoden- und Anodenmaterialien der selbst assemblierten Batteriezellen

Elektrode	Kathode	Anode
Aktivmaterial (Verhältnis) Massenanteil / wt%	NCM (6/2/2) 93.5	Graphit 96
Leitruß Massenanteil / wt%	CB 3.5	CB 2
Binder Massenanteil / wt%	PVDF 3	CMC & SBR 2
Ableiterfolie Dicke / µm	Al 15	Cu 14
Flächenkapazität / (mAh/cm <sup>2</sup> )	3.0	3.5
Beladung / (mg/cm <sup>2</sup> )	20.3	10.4
Porosität / %	33	31
Beschichtungsdicke / µm	66	70

Tabelle 3: Daten der in der Produktionskampagne verwendeten Kathoden- und Anodenmaterialien der industriellen Batteriezellen von Li-Fun

Elektrode	Kathode	Anode
Aktivmaterial (Verhältnis) Massenanteil / wt%	NCM (6/2/2) 96.4	Graphit 95.7
Leitruß Massenanteil / wt%	CB 2	CB 2.3

Binder Massenanteil / wt%	PVDF 1.6	CMC & SBR 2
Ableiterfolie Dicke / $\mu\text{m}$	Al 12	Cu 12
Flächenkapazität / (mAh/cm <sup>2</sup> )	2.4	2.9
Beladung / (mg/cm <sup>2</sup> )	14.48	8.52
Porosität / %	39	35
Beschichtungsdicke / $\mu\text{m}$	58	65

Durch die Verwendung zusätzlicher Batteriezellen konnte zudem die Übertragbarkeit der Ergebnisse sowie die Menge der Datenpunkte deutlich erhöht werden.

### UAP3.2: Verknüpfung von Mess-/Qualitäts- und Steuerungsparametern

Auch bei der Verknüpfung der Mess-/Qualitäts- und Steuerungsparameter wird eng mit den Projektpartnern der TU München zusammengearbeitet. Zur Vergleichbarkeit der Ergebnisse werden in diesem Teilbereich ebenfalls Support Vector Machines (SVMs) als überwachte ML-Algorithmen für die Klassifizierung verwendet, da sie mit einer vergleichsweise geringen Menge von Daten arbeiten können und nur in geringem Maße anfällig für Overfitting sind. Support Vector Regression (SVR) ist eine modifizierte Version des Support Vector Machine (SVM)-Algorithmus. Die Algorithmen werden am dezentralen Datenrechner implementiert, welcher mit den Messinstrumenten und der Anlagentechnik verknüpft ist. Der Stand und die Implementierung der Vorhersagealgorithmen sind in UAP 4.3 aufgezeigt.

Eine Auflistung der einzelnen Qualitätsparameter sowie deren Anbindung und Schnittstelle an den Produktionsanlagen des PEM ist in den nachfolgenden Tabellen zu finden. Diese wird ergänzt durch eine Beschreibung der Anbindungsarten. Darüber hinaus werden das EIS-Verfahren als maßgeblich installiertes Inline-Messverfahren sowie der EoL-Test zum besseren Verständnis der jeweiligen Parameter beschrieben. Anschließend wird die Einbindung der aufgezeichneten Daten in das virtuelle Produktionssystem beschrieben.

Tabelle 4: Anbindungsstatuts und Schnittstelle der Parameter an den jeweiligen Produktionsanlagen (Befüllung und Formierung)

			PEM				
Prozess	Messparameter	Sensor	Sensor-ID	Digital angebunden	Schnittstelle	Steuerung/Anlage	Synchronisation
<b>Befüllen</b>							
1	Taupunkt	Feuchtigkeitssensor	H01_P	ja	OPC-UA	Siemens-Steuerung, Mbraun	Echtzeit
2	Umgebungstemperatur	Temperatursensor	TM01_P	ja	OPC-UA	Siemens-Steuerung, Mbraun	Echtzeit
3	Druck Befüllkammer	Drucksensor	P01_P	ja	OPC-UA	Siemens-Steuerung, Mbraun	Echtzeit
4	Druck Elektrolytreservior	Drucksensor	-	nein	Wert nicht messbar	Wert nicht messbar	Wert nicht messbar
5	Dosiergeschwindigkeit	Durchflusssensor	-	nein	Wert nicht messbar	Wert nicht messbar	Wert nicht messbar
6	Elektrolyttemperatur	T-Sens. Elektrolyt	TM02_P	ja	OPC-UA	Siemens-St., Solith/Sowema	Echtzeit
7	Elektrolytmasse	Waage	W01_P	ja	OPC-UA	Kern	Echtzeit
8	Benetzungszeit	Zeitmessung	T01_P	ja	CSV	Safion	Batch

9	Benetzungs-grad**	Potentiostat	PT01_P	ja	CSV	Safion	Batch
10	Benetzungs-temperatur**	Temperatur-sensor	TM03_P	ja	CSV	Safion	Batch
11	EIS-Daten*	Potentiostat (EIS-Meter)	PT02_P	ja	CSV	Safion	Batch
<b>Formieren</b>							
12	Umgebungs-temperatur	Temperatur-sensor	TM02_P	ja	OPC-UA	Weisstechnik	Echtzeit
13	Formierdauer	Zeitmessung	T02_P	ja	CSV	Ametek/ Digatron	Batch/ Echtzeit
14	Lade-kapazität(en)*	Potentiostat	PT03_P	ja	CSV	Ametek/ Digatron	Batch/ Echtzeit
15	Entlade-kapazität(en)*	Potentiostat	PT03_P	ja	CSV	Ametek/ Digatron	Batch/ Echtzeit
16	Kapazitäts-verlust**	Potentiostat	PT03_P	ja	CSV	Ametek/ Digatron	Batch/ Echtzeit
17	EIS-Daten*	Potentiostat (EIS-Meter)	PT04_P	ja	CSV	Ametek/ Digatron	Batch/ Echtzeit

Zunächst sind die Messwerte für die Prozessschritte des Befüllens und der Formierung dargestellt. Die \*\*-Markierung der Werte gibt an, dass ein Wert nicht direkt gemessen, sondern aus mehreren Werten des Potentiostaten zusammengesetzt wird. Ein Potentiostat ist ein komplexes elektronisches Instrument, das die Spannungs- und Stromverläufe der angeschlossenen Batteriezelle messen kann. Auch für die EIS-Messungen kommt als Sensorik ein Potentiostat zum Einsatz. Da ein Potentiostat aus zahlreichen Bauteilen/Sensoren besteht, wird dieser in dieser Ausführung als ein Sensor definiert. In der nachfolgenden Tabelle werden die weiteren Prozessschritte dargestellt.

Tabelle 5: Anbindungsstatuts und Schnittstelle der Parameter an den jeweiligen Produktionsanlagen Entgasen, Aging, EoL, EIS)

		PEM					
Prozess	Mess-paramater	Sensor	Sensor-ID	Digital angebunden	Schnittstelle	Steuerung/Anlage	Synchronisation
<b>Entgasen</b>							
18	Taupunkt	Feuchtig-keitssensor	H01_P	ja	OPC-UA	Siemens-Steuerung, Mbraun	Echtzeit
19	Umgebungs-temperatur	Temperatur-sensor	TM01_P	ja	OPC-UA	Siemens-Steuerung, Mbraun	Echtzeit
20	Entgasungs-druck	Druck-sensor	P01_P	ja	OPC-UA	Siemens-Steuerung, Mbraun	Echtzeit
<b>Aging</b>							
22	Innen-widerstand	Potentiostat	PT03_P	ja	CSV	Ametek/ Digatron	Batch/ Echtzeit
23	Selbst-entladung**	Potentiostat	PT03_P	ja	CSV	Ametek/ Digatron	Batch/ Echtzeit
24	EIS-Daten*	Potentiostat (EIS-Meter)	PT04_P	ja	CSV	Ametek/ Digatron	Batch/ Echtzeit
<b>EoL</b>							
25	Innen-widerstand	Potentiostat	PT03_P	ja	CSV	Ametek/ Digatron	Batch/ Echtzeit
26	Kapazität**	Potentiostat	PT03_P	ja	CSV	Ametek/ Digatron	Batch/ Echtzeit
27	EIS-Daten*	Potentiostat (EIS-Meter)	PT04_P	ja	CSV	Ametek/ Digatron	Batch/ Echtzeit
<b>*EIS-Daten</b>							
28	Frequenz	Potentiostat (EIS-Meter)	PT02_P/ PT04_P	ja	CSV	Safion/ Ametek/ Digatron	Batch/ Echtzeit

29	Z_real	Potentiostat (EIS-Meter)	PT02_P/ PT04_P	ja	CSV	Safion/ Ametek/ Digatron	Batch/ Echtzeit
30	Z_img	Potentiostat (EIS-Meter)	PT02_P/ PT04_P	ja	CSV	Safion/ Ametek/ Digatron	Batch/ Echtzeit
31	Betrag	Potentiostat (EIS-Meter)	PT02_P/ PT04_P	ja	CSV	Safion/ Ametek/ Digatron	Batch/ Echtzeit
32	Phase	Potentiostat (EIS-Meter)	PT02_P/ PT04_P	ja	CSV	Safion/ Ametek/ Digatron	Batch/ Echtzeit

Es wurden insgesamt 26 Sensorpunkte ermittelt, die in jeweils 32 Datensätzen, die die produkt-, und prozessrelevanten Daten enthalten, gespeichert werden. Von diesen 26 Sensorpunkten konnten 22 digital angebunden werden, was einer Quote von 85 % entspricht.

Die digitale Anbindung erfolgt entweder über eine OPC-UA-Schnittstelle oder direkten Datentransfer von CSV-Dateien durch die Anlagen auf einen definierten Speicherort. Teilweise werden diese Daten direkt gestreamt (Echtzeit, Datensatz auf Speicher wird laufend aktualisiert) oder die Daten werden nach Abschluss des Versuchs gespeichert (Batch, erfolgt unmittelbar nach Abschluss des Versuchs). Die in den Produktionslinien abliegenden Daten werden automatisiert auf den Server des IMA mit dem virtuellen Produktionssystem übertragen. Im Folgenden werden ergänzend noch die EIS-Messverfahren sowie der EoL-Test beschrieben, um Details zur Datenaufnahme zu akzentuieren.

#### **Messverfahren Inline:**

Die elektrochemische Impedanzspektroskopie (EIS) - eine der bekanntesten nicht-invasiven Methoden - wird seit vielen Jahren zur Untersuchung der Impedanz und der damit verbundenen Eigenschaften von Lithium-Ionen-Batterien (LIB) und ihren Komponenten eingesetzt. Diese Technik kann in zwei verschiedenen Modi angewendet werden: potentiostatisch und galvanostatisch. Im potentiostatischen Modus werden Spannungsanregungen in einem bestimmten Frequenzbereich an die Batterie angelegt, und die Stromantwort der Batterie wird gemessen. Umgekehrt werden im galvanostatischen Modus Stromanregungen in einem bestimmten Frequenzbereich an die Batterie angelegt, und die Spannungsantwort der Batterie wird gemessen.

Es wurde festgestellt, dass einer der zeitaufwändigsten Prozesse innerhalb des Produktionsprozesses die Benetzung der Elektroden und Separatoren zwischen dem Füllen und Formieren ist. Die Benetzungsgrade der Zellkomponenten weisen einen Zusammenhang mit den Impedanzwerten der Batteriezellen auf. Daher wurde im Rahmen dieses Projektes beschlossen, den Benetzungsgrad von Zellkomponenten mit der EIS-Methode zu bestimmen. Damit soll zum einen die Übergangszeit von der Elektrolytbefüllung zum Umformprozess mit der EIS verkürzt werden. Zweitens werden die zur Erhöhung der Leistungs- und Energiedichte und zur Senkung der Kosten von LIB entwickelten Produktionstechniken untersucht. Die Elektrodenseparator-Laminierung, eine dieser Methoden, ist dafür bekannt, dass sie den Produktionsprozess der Batteriezellen durch Vereinfachung des Stapelprozesses beschleunigen kann. Als Ergebnis der durchgeführten EIS-Messungen wurde festgestellt, dass die Laminierung an beiden Elektroden-Separator-Grenzflächen das Wachstum des Oberflächenwiderstands während des Zyklustests reduziert. Schließlich wurde untersucht, welche Qualitätsmerkmale der hergestellten Batteriezellen durch EIS geklärt werden können. Die gemessene komplexe Impedanz kann die verschiedenen Prozesse von Batterien

bestimmen, da die Impedanz stark mit vielen Batterieparametern wie Temperatur, Ladezustand und Gesundheitszustand korreliert.

### Messverfahren End-of-Line:

Im End-of-Line (EoL) Test werden die produzierten Zellen auf ihre Eignung und Qualität hin überprüft, wobei Zellen mit signifikant abweichenden Charakteristiken zuverlässig erkannt werden müssen. Nachfolgend kann eine Einstufung in verschiedene Qualitätsklassen anhand der gemessenen Parameter erfolgen (sog. Grading).

Im Forschungsprojekt wurde sich unter anderem nach Rücksprache mit dem FormEL Projekt aus dem ProZell Cluster darauf geeinigt, sich für den Test der Referenzkampagne an der internationalen Norm IEC 62660-1 zu orientieren und diese um weitere forschungsrelevante Prüftechniken zu erweitern. Eine Vergleichbarkeit und zudem eine vergrößerte Datenschar für Analyseverfahren in den Clustern ist demnach zu erwarten.

Der Prüfplan umfasst gängige Techniken wie Kapazitätsbestimmungen via CC-Entladeverfahren und DC-Innenwiderstandsbestimmungen (DC-IR) in Lade- und Entladerichtung bei den drei Ladezuständen (engl. state of charge, SOC) 80%, 50% und 20%, allerdings auch Erweiterungen über den normativen Rahmen hinweg, wie etwa EIS-Frequenz-Sweeps bei genannten Ladezuständen und pseudo Open-Circuit-Voltage (pOCV) Techniken für ausgewählte Zellen im Produktions-Los.

In nachfolgender Tabelle ist der mit den Projektpartnern abgestimmte EoL-Prüfplan in Kurzfassung aufgezeigt, das Volldokument, welches als Prüfplan auf den durch die Projektmittel beschafften Batteriezyklisierern appliziert wird, steht auf Anfrage zur Verfügung. Die Messungen werden in den ebenfalls projektseitig beschafften Klimakammern bei einer konstant gehaltenen Temperatur von 25°C ±0,2°C durchgeführt.

Alle im EoL-Test gemessenen Zell-Charakteristika können einzeln und in gewichteter Kombination zur Validierung der Zellfinalisierung herangezogen werden. Insbesondere durch Erweiterung der Referenzkampagne durch nachfolgende Produktionskampagnen mit Parametervariationen können Korrelationen der Test-Parameter mit den Zell-Qualitätszielen erkannt und bestätigt werden. Als Qualitätsziele wird nicht nur die zellindividuelle Zyklendauer, hohe Kapazität und geringe Impedanz, sondern auch ausgeprägte und über die Alterung möglichst stete Zellhomogenität im Produktionslos herangezogen.

*Tabelle 6: Vereinfacht dargestellte Prüfprozedur EoL-Test OptiPro*

Index	Prüfungsschritt
1	Zellkonditionierung
2	3 Kapazitätszyklen (CC-CV-Laden, CC-Entladen, Kapazitätsbestimmung im dritten CC-Entladezyklus)
3	80% SOC: EIS (10kHz to 0,01Hz @10ppd), DC-IR (1C Laden/Entladen 18s, 40s relax)
4	50% SOC: EIS (10kHz to 0,01Hz @10ppd), DC-IR (1C Laden/Entladen 18s, 40s relax)
5	20% SOC: EIS (10kHz to 0,01Hz @10ppd), DC-IR (1C Laden/Entladen 18s, 40s relax)
6	pOCV (C/20) in Lade- und Entladerichtung
7	CC-CV Kapazitätsbestimmung in Entladerichtung

### UAP 3.3: Automatisierung der Datenauswertung

Das Ziel dieses Arbeitspakets ist die Automatisierung der Auswertung umfassender Messdaten aus End-of-Line- und Lebenszyklustests. Die gesammelten Daten müssen zu weniger komplexen, aber aussagekräftigen Parametern komprimiert werden, damit sie im Vorhersagemodell des virtuellen Produktionssystems verwendet werden können, das maschinelles Lernen nutzt, um die Zellqualität vorherzusagen.

Die Ergebnisse zeigen, dass eine automatisierte Datenanalyse für die Interpretation der aufgezeichneten Messdaten unerlässlich ist, da die Datenmenge die Möglichkeiten einer manuellen Analyse übersteigt. Alle Messdaten aus End-of-Line- und Lebenszyklustests am ISEA wurden in der Ahjo-Datenbank gespeichert. Die gespeicherten Daten im CSV-Format wurden über ein vom Partner IQS entwickeltes Synchronisationssystem auf den OptiPro-Server hochgeladen. Der Prozess des automatischen Hochladens von Messdaten aus End-of-Line- und Lebensdauererests am ISEA auf den Optipro-Server und der Gewinnung aussagekräftiger Parameter aus den Messergebnissen ist in der nachfolgenden Abbildung dargestellt. Die Rohdaten und wichtigsten Parametern wurden automatisch hochgeladen.



Abbildung 5: Automatische Synchronisierung der Messdaten

MATLAB-Skripte wurden entwickelt, um die Parameter zu extrahieren und die einzelnen Messmethoden aller getesteten Zellen für die gemessenen Daten im Zeitbereich aus Kapazitäts-, Puls- und OCV-Tests sowie die Daten im Frequenzbereich aus EIS-Messungen am ISEA visuell zu interpretieren. Die Impedanzdaten aus den EIS-Messungen wurden dem Linear-Kramers-Kronig-Test (Lin-KK) unterzogen, um ihre Gültigkeit zu überprüfen. Nach Überprüfung der Kompatibilität der Impedanzdaten mit dem Lin-KK wurden die Daten weiter untersucht. Die Impedanzdaten wurden mit dem entwickelten Code an ein Ersatzschaltbild gefittet. Die Daten im Zeitbereich wurden ebenfalls mit den Matlab-Skripten visualisiert und analysiert.

Die wichtigsten Parameter aus den Messdaten umfassen die Zellkapazität, Parameter des Ersatzschaltbilds wie Innenwiderstand und Ladungsübertragungswiderstand sowie die Zyklenstabilität. Diese charakteristischen Merkmale wurden anhand der verfügbaren Daten validiert und dienen als Grundlage für die Vorhersage der Qualität der Zellproduktion im virtuellen Produktionssystem.

### UAP 3.4: Abgleich der Modelle mit EOL-Parametern

Das Ziel dieses Arbeitspakets ist es, die Mess- und Prozessparameter entlang der gesamten Prozesskette mit den End-of-Line-Parametern (EOL) der Referenzkampagne zu korrelieren. Die Fähigkeit, zellspezifische EOL-Parameter vorherzusagen, ist eine entscheidende Grundlage für die gezielte Optimierung der Prozessparameter. Im Rahmen dieses Arbeitspakets wurden Referenzzellen des Partners PEM analysiert. Darüber hinaus stellte das

ISEA prozessspezifisches Fachwissen zur Verfügung, um eine gezielte Interpretation der Messergebnisse zu ermöglichen.

Aufgrund der geringen Stichprobengröße erwies sich ein umfassender Vergleich als schwierig. Dennoch wurden erste Analysen durchgeführt, bei denen die in der Referenzkampagne ermittelten EOL-Testergebnisse mit den in UAP3.3 auf Zellebene aggregierten Parametern verglichen wurden. Die EOL-Tests umfassten Kapazitätsmessungen, elektrochemische Impedanzspektroskopie (EIS), Impulstests (DC-IR) bei drei Ladezuständen (SOC: 80%, 50%, 20%) und quasi Leerlaufspannungstests (qOCV).

Trotz der begrenzten Datenlage konnten erste Korrelationen zwischen aggregierten Messparametern und den EOL-Ergebnissen identifiziert werden. Diese Ergebnisse wurden verwendet, um die in UAP3.3 entwickelten Algorithmen zur automatisierten Parameterbestimmung hinsichtlich ihrer Aussagekraft in Bezug auf die EOL-Parameter zu bewerten.

Die generierten EOL-Parameter wurden in das bestehende Datenmanagementsystem übertragen. Diese Analyse bildet die Grundlage für die Entwicklung korrelationsbasierter Prognosemodelle in nachfolgenden Arbeitspaketen (siehe Abbildung 3-2).

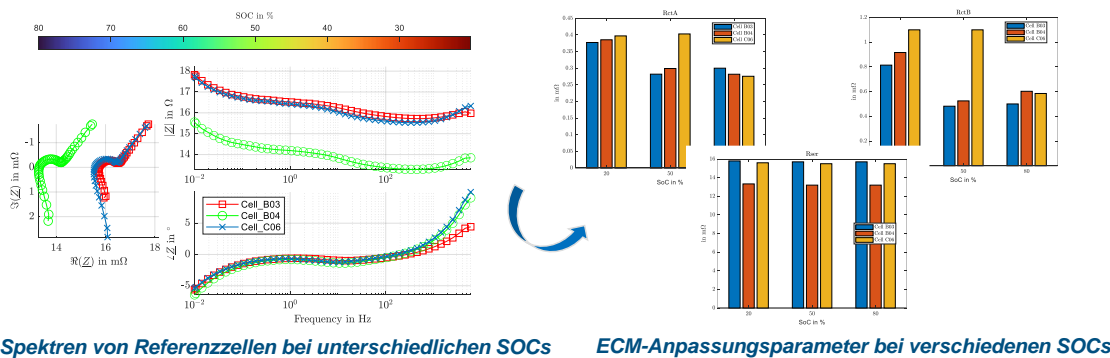


Abbildung 6: Analyse der EIS-Spektren und der aus ECM-Anpassungen abgeleiteten Parameter ( $R_{ser}$ ,  $R_{ctA}$ ,  $R_{ctB}$ ) von Referenzzellen in verschiedenen Ladezuständen

#### AP 4: Erstellung des virtuellen Produktionssystems

Arbeitspaket 4 befasst sich mit der Konzeptionierung und Implementierung eines virtuellen Produktionssystems, welches eine virtuelle Abbildung der Produktionsanlagen über die aufgenommenen Daten der zuvor integrierten Sensorik darstellt. Innerhalb des virtuellen Produktionssystems sollen Machine Learning Modelle eingebettet werden, um frühzeitig eine Qualitätsvorhersage über die gefertigten Batterien zu treffen und somit gezielt in Fertigungsprozesse einzugreifen.

##### UAP 4.1: Konzeptionierung des virtuellen Produktionssystems

Für die Konzeptionierung des virtuellen Produktionssystems wurden im ersten Schritt Workshops mit allen Projektpartnern durchgeführt, für die Ermittlung von Anforderungen an das virtuelle Produktionssystem. In diesen Workshops wurden physische Mockups entwickelt, welche die Funktionalitäten des virtuellen Produktionssystem papier-basiert abbilden. Das Ergebnis der Workshops kann Abbildung 7 entnommen werden.

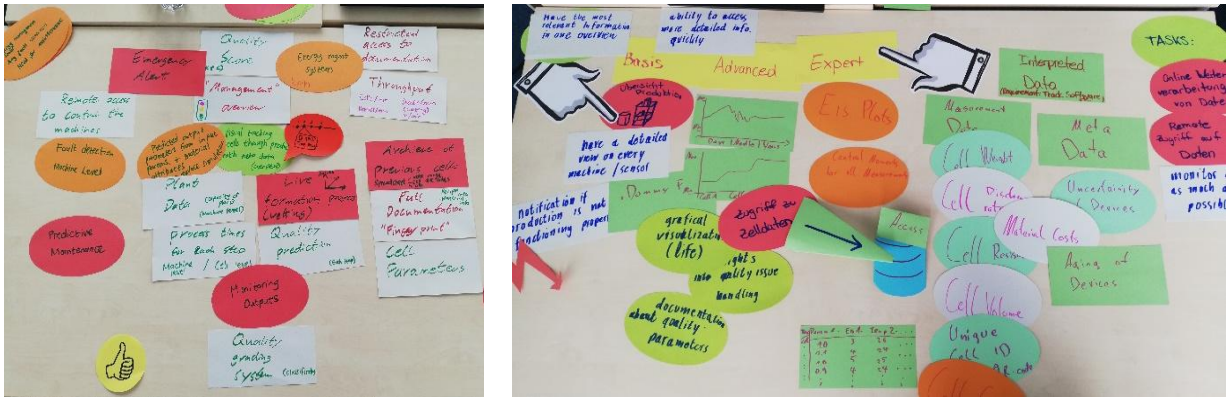


Abbildung 7: Physische Mockups des virtuellen Produktionssystems erstellt im Rahmen eines gemeinsamen Workshops

Aufbauend auf den Workshop Ergebnissen aus wurden Anforderungen für das virtuelle Produktionssystem abgeleitet und ein Konzept für das virtuelle Produktionssystem erstellt. Dieses besteht aus drei Elementen: einen zentralen Datenspeicher, ein Backend zur Verarbeitung der Daten, und ein Frontend das als Dashboard und grafische Nutzeroberfläche dient. Im Laufe des Projektes werden die drei Komponenten kontinuierlich nutzerspezifisch weiterentwickelt.

Der zentrale Datenspeicher wurde bereits im ersten Projektjahr mit der Anschaffung und der Inbetriebnahme eines Servers umgesetzt. Durch die Anbindung des zentralen Datenspeichers mit dem lokalen oder zentralen Server der Partnerinstitutionen, konnte eine indirekte Verbindung zu den Maschinen und Anlagen hergestellt werden (s. UAP 2.4). Der Datenspeicher besteht aus einem Object-Storage, in dem Messdaten im Rohformat abgelegt werden. Diese werden dann automatisiert in eine SQL-Datenbank eingelesen, welche die Grundlage für die Visualisierungen und Machine Learning Modelle des virtuellen Produktionssystems bildet.

Das Backend hat Zugriff auf Daten im zentralen Datenspeicher zugreifen und dient der Verarbeitung Aufbereitung der Daten inklusive Machine Learning Modelle für die Qualitätsvorhersage (s. UAP 4.3).

Das dritte Element stellt eine grafische Benutzeroberfläche in Form eines Dashboards dar. Dieses dient zur Darstellung der erhobenen Messdaten und ist aufgeteilt nach Produktionsschritten. Basierend auf den dargestellten Verläufen ermöglicht es Nutzenden des virtuellen Produktionssystems in den Prozess einzugreifen, bei Vorhersagen von qualitativ minderwertigen Batteriezellen. Das Dashboard durchlief im Laufe des Projektes verschiedene Iterationsschleifen in welchen Verbesserungen bezüglich: Layout, Usability, Visualisierungsmodul, Design und Qualitätsvorhersage durchgeführt worden sind. Diese ist in der nachfolgenden Abbildung dargestellt.

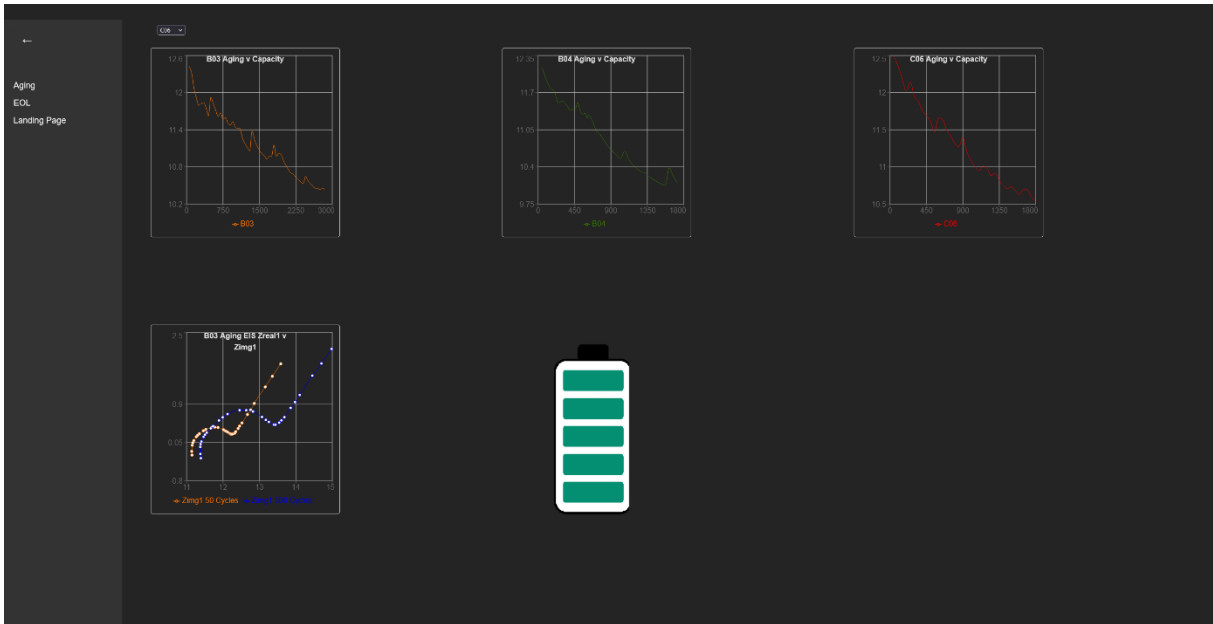


Abbildung 8: Dashboard als grafische Nutzeroberfläche des virtuellen Produktionssystems.

Für die Verarbeitung der Daten im Backend, wurde ein Datenmodell entwickelt, das die anfallenden Prozessdaten mit den Steuerungsparametern in Beziehung setzt (s. Abbildung 9). Dieses Datenmodell setzt sich zusammen aus den einzelnen Prozessschritte der Zellfertigung im Zusammenhang mit den zugehörigen verfügbaren Maschinen, Anlagen und Sensoren. Die Steuerungsparameter werden als Eingabedaten und die Sensordaten als Output Daten modelliert.

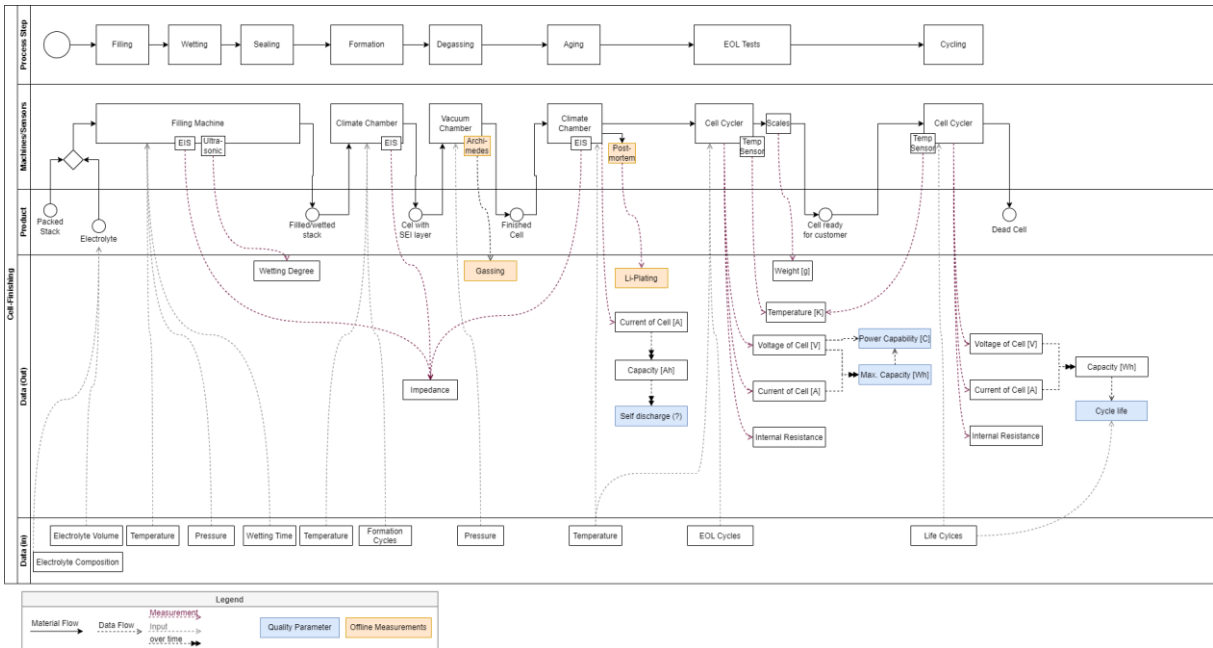


Abbildung 9: Darstellung des Datenmodells der Zellfinalisierung

Aufgrund der Skalierungsherausforderungen, die durch die reine Datenmenge entstanden sind, wurde die Dateninfrastruktur angepasst und ein Data Handler integriert. Dieser zieht die abgelegten Daten aus dem Server vom InZePro Projekt Databatt und legt diese in einer MySQL-Datenbank ab. Durch diesen eingeführten Zwischenschritt können einfacher Daten für die Visualisierung im Dashboard genutzt werden. Eine Aktualisierung der MySQL Datenbank erfolgt in regelmäßigen Abständen.

Für die Vorhersage der Qualität der Batteriezellen wurde eine Komponente für die Verwaltung der eingesetzten Machine Learning Modelle entwickelt. Der „Prediction Model Manager“ nutzt Daten aus der Datenbank und erzeugt eine Qualitätsvorhersage für die selektierte Batterie. Eine Übersicht über alle Komponenten der Dateninfrastruktur ist in Abbildung 4-3 dargestellt.

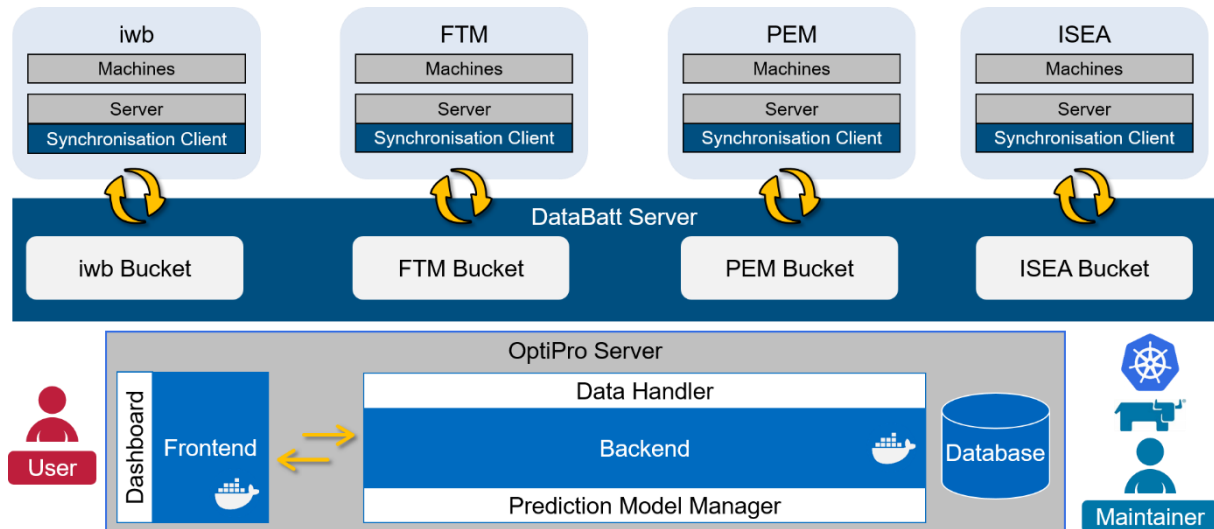


Abbildung 10: Dateninfrastruktur des virtuellen Produktionssystems. Datenquellen der realen Produktionssysteme von den einzelnen Instituten (von links nach rechts: iwb, FTM, PEM und ISEA) sind oben abgebildet. Diese synchronisieren ihre Daten mit dem Datenspeicher Service aus dem Projekt DataBatt über ihren zugehörigen Buckets. Über eine API werden die Daten aus den jeweiligen Buckets auf den OptiPro Server übertragen und in der Datenbank abgelegt und für die Visualisierung bereitgestellt. Die Infrastruktur wird orchestriert über Kubernetes und Docker Container.

#### UAP 4.2: Verknüpfung von realem und virtuellem Produktionssystem

Am PEM der RWTH Aachen wurde im Rahmen dieses Arbeitspakets die Verbindung zwischen den in der Zellfinalisierung eingesetzten Anlagen und Messsystemen und dem virtuellen Produktionssystem hergestellt. Grundlage bildete das zuvor in UAP 4.1 entwickelte Gesamtkonzept sowie das bereits vorhandene Hardware- und Software-Setup aus UAP 2.4 sowie die Anbindung aus UAP 3.2. Zunächst wurden geeignete Schnittstellen für den Datenaustausch identifiziert und auf ihre Einsatzfähigkeit geprüft. Aufgrund der vorhandenen OPC-UA-Schnittstelle an der Elektrolytbefüllanlage wurde diese als primäre Lösung gewählt. Ergänzend kam der Austausch über CSV-Formate zum Einsatz, um auch Daten aus weiteren Messsystemen zu integrieren. Anschließend erfolgte die physische Anbindung der Maschinen und Sensorik an einen leistungsfähigen Rechner, der als Gateway zum virtuellen System fungiert.

Im nächsten Schritt wurde die softwareseitige Integration umgesetzt. Hierbei wurde sichergestellt, dass sämtliche relevanten Prozess- und Messdaten in Echtzeit erfasst, verarbeitet und an das virtuelle Produktionssystem übertragen werden können. Die Anbindung ermöglicht nicht nur die kontinuierliche Prozessüberwachung, sondern auch die direkte Verknüpfung mit Analyse- und Visualisierungstools des virtuellen Systems. Ein zentrales Anwendungsbeispiel ist die Auswertung der EIS-Messungen während der Befüllung und Formierung. Diese Werte werden im virtuellen Produktionssystem visualisiert und erlauben eine laufende Bewertung des Benetzungsgrades. Auf dieser Basis können Prozessparameter wie Fülldruck oder -temperatur gezielt angepasst werden, um die Stabilität zu erhöhen und Schwankungen in der Zellqualität zu reduzieren. Diese Datenvisualisierung ist in der nachfolgenden Abbildung beispielhaft dargestellt.

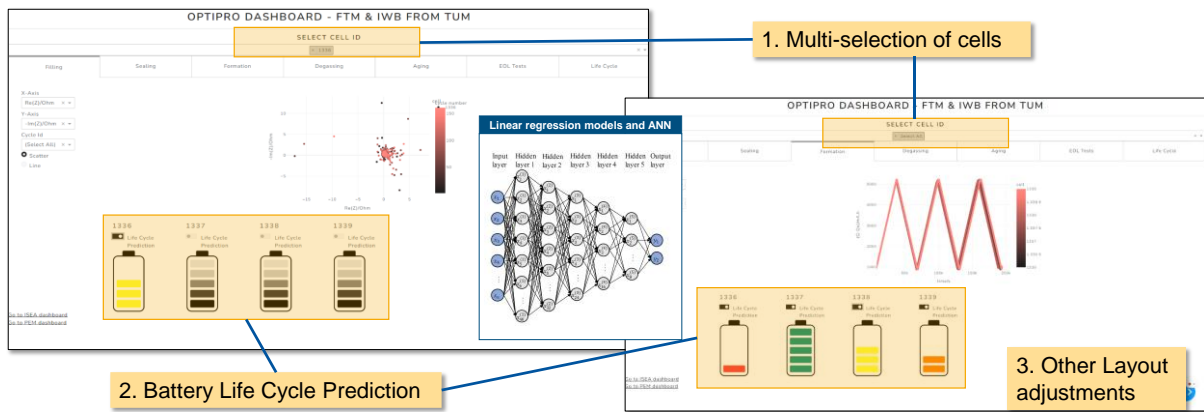


Abbildung 11: Datenvisualisierung und Funktionsweise der Datenanalyse als Ausblick zu AP 4.3

Durch die vollständige Integration von realem und virtuellem System ist eine durchgängige Datenkette entstanden, die sowohl in Aachen als auch standortübergreifend mit München genutzt werden kann. Dies bildet die Grundlage für weitere Arbeitspakete, insbesondere die Implementierung von Machine-Learning-Methoden zur Qualitätsprognose und Prozessoptimierung.

### UAP 4.3: Training von ML Modellen für eine effiziente Maschinensteuerung

In UAP 4.3 sollen mithilfe von Daten aus den Fertigungskampagnen Machine Learning Modelle entwickelt werden, die für eine Qualitätsvorhersage genutzt werden sollen. Diese Modelle sollen in das virtuelle Produktionssystem integriert und dadurch eine online Vorhersage ermöglichen. Durch frühzeitige Vorhersagen der Qualität lassen sich datengetriebenen Eingriffe in Fertigungskampagnen ausführen und somit aufwändige Qualitätsprüfungen nach der Fertigung vermeiden.

Zunächst wurden exemplarisch anhand von öffentlich zugänglichen Batterieproduktionsdaten Datenexplorationsschritte getestet und validiert. Die getesteten Algorithmen wurden im Anschluss auf die Realdaten vom iwb und FTM übertragen und angewendet. Nach einer Validierung der Explorationsmethoden mit den Partnern der jeweiligen Institute, wurden die zielführenden visuellen Explorationsmethoden in das Dashboard des virtuellen Produktionssystems integriert.

Durch die Datenexploration konnten Anomalien der Prozesskampagnen des iwb visuell in den EIS-Daten identifiziert werden. Die am iwb manuell gemessene Diskrepanz der Spannungsprofile zwischen den Formierungsvorgängen V7 und V10, lassen sich ebenfalls im Dashboard des virtuellen Produktionssystems wieder finden und wurden nach Absprache mit dem iwb für das nachfolgende Trainieren von Machine Learning Modelle ausgeschlossen.

Im Rahmen des virtuellen Produktionssystems wurde ein Regressionsmodell entwickelt, das den State of Health (SOH) einer Batteriezele für eine gegebene Anzahl an Entladezyklen vorhersagt. Das Modell verwendet Zeitreihendaten aus EIS-Messungen als Input und prognostiziert den SOH für zukünftige Entladezyklen. Dadurch kann auf Basis der EIS-Daten vorhergesagt werden, welche Batterien voraussichtlich besonders schnell oder langsam altern. Darüber hinaus kann anhand der Modellausgabe die aktuelle Kapazität einer Batterie abgeschätzt werden, ohne dass eine direkte Kapazitätsmessung erforderlich ist. Das Modell besteht aus einer Kombination von Convolutional Neural Networks (CNNs) und bidirektionalen Long Short-Term Memory-Netzwerken (BiLSTM) und ist in Abbildung 4-3 schematisch dargestellt.

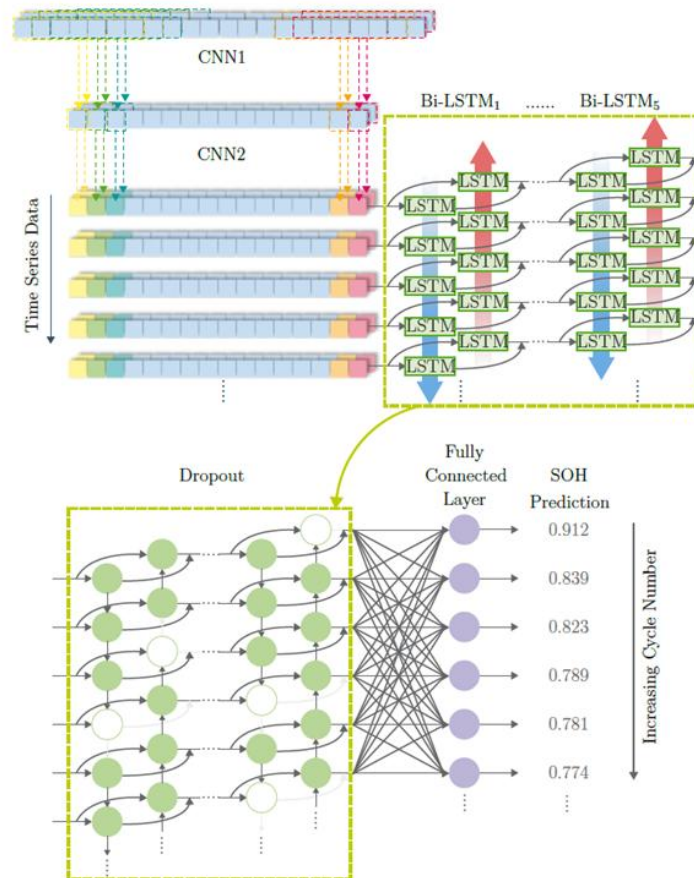


Abbildung 12: Modellarchitektur für die SOH-Vorhersage im virtuellen Produktionssystem.

Für das Training des Modells wurde ein kollaborativer Lernansatz (Collective Learning) verfolgt. Dabei teilen verschiedene Modelle, jeweils trainiert auf unterschiedlichen, aber verwandten Datensätzen, ihre Gradienteninformationen, um voneinander zu lernen. Dieser kollektive Ansatz ermöglicht es, auch bei eingeschränkter Datenverfügbarkeit robuste Modelle zu entwickeln, die besser auf unbekannte Daten generalisieren. Durch den Austausch von Gradienten zwischen Batterietypen mit unterschiedlichen Eigenschaften wird das Modell zudem in die Lage versetzt, Alterungsprozesse unter variierenden Betriebsbedingungen zuverlässig vorherzusagen.

Collective Learning zeichnet sich dadurch aus, dass mehrere Parteien (z. B. PEM und iwB) jeweils ein Modell für denselben Use-Case, die Vorhersage des SOH, trainieren und durch den Austausch von Gradienteninformationen gegenseitig ihre Vorhersagegenauigkeit verbessern können. Dabei verfügen PEM und iwB über Modelle, die auf ihren jeweiligen eigenen Datensätzen trainiert wurden. Dieses lokale Training erfolgt mittels Backpropagation, wobei der Fehler zwischen vorhergesagtem und tatsächlichem SOH (Label) rückwärts durch das Netzwerk propagiert wird. Die daraus resultierenden Gradienten können anschließend mit den Partnern geteilt werden, sodass diese ihre eigenen Modelle verbessern können ohne Zugriff auf die originalen Trainingsdaten zu haben. Beispielsweise kann PEM die im lokalen Training berechneten Gradienten dem TUM-Modell zur Verfügung stellen und umgekehrt. Auf diese Weise kann das PEM-Modell von den TUM-Daten profitieren und seine Vorhersagegüte verbessern, ohne jemals direkten Zugriff auf die TUM-Daten zu haben. Dasselbe gilt für das TUM-Modell im Hinblick auf die PEM-Daten. Diese Form des Lernens ist in der Industrie besonders relevant, da Unternehmen häufig Vorbehalte gegenüber der Weitergabe ihrer Daten haben und gesetzliche Datenschutzerfordernungen berücksichtigen müssen.

Gradienteninformationen erlauben es, Modelle zu verbessern, ohne dass Rückschlüsse auf die zugrundeliegenden, gelabelten Datensätze möglich sind. Konkret wurde der CIGAR-Algorithmus (Collective Learning via Gradient Sharing) von Hoang et al. implementiert. Die Effektivität des Ansatzes wurde mittels RMSE (Root Mean Square Error) und  $R^2$  (Bestimmtheitsmaß) bewertet. Zum Tracking des Trainingsprozesses und der Modellperformance kam das Tool Weights & Biases zum Einsatz. Die Ergebnisse zeigen, dass durch kollektives Lernen die Vorhersagequalität signifikant gesteigert werden konnte – insbesondere bei der Kombination von Datensätzen mit unterschiedlichen Zelltypen. Das virtuelle Produktionssystem stellt somit einen vielversprechenden Schritt in Richtung generalisierbarer, datengetriebener Qualitätsprognosen in der Batterieproduktion dar.

Der Meilenstein 3 „Virtuelle Abbildung und Verknüpfung der Prozesse“ wurde erfolgreich mit dem virtuellen Produktionssystem realisiert. Zentrales Element des Systems ist das über den Lebenszyklus hinweg mit Collective Learning trainierte SOH-Prediction-Modell. Dieses ermöglicht es, bereits in frühen Produktionsschritten, eine zuverlässige Vorhersage darüber zu treffen, ob eine Batteriezelle am Ende des Prozesses Ausschuss sein wird. Dadurch können potenziell fehlerhafte Zellen frühzeitig identifiziert und datenbasierte Eingriffe in den Produktionsprozess vorgenommen werden, was zur Effizienzsteigerung und Reduktion von Ausschuss führt.

#### **UAP 4.4: Integrationstest**

Im Integrationstest wurde die zuvor am PEM der RWTH Aachen umgesetzte Anbindung des realen Produktionssystems an das virtuelle Produktionssystem unter Praxisbedingungen validiert. Ziel war es, die entwickelten Optimierungsansätze aus UAP 4.3 in die reale Zellproduktion einzubringen und deren Wirkung auf Prozessstabilität und Produktqualität zu bewerten.

Hierzu wurden ausgewählte Pouch-Zellen mit definierten Formierprotokollen gefertigt und anschließend Langzeittests zur Lebensdauerermittlung durchgeführt. Die Prozess- und Messdaten aus den integrierten Sensoren – unter anderem EIS-Daten, Temperatur- und Druckmesswerte – wurden in Echtzeit an das virtuelle Produktionssystem übertragen, dort analysiert und zur Ableitung von Anpassungen genutzt.

Die Auswertung zeigte, dass eine belastbare Lebensdauervorhersage bereits mit einem Bruchteil der sonst notwendigen Zyklendaten möglich ist. Dadurch verkürzt sich der Prüfzeitraum für belastbare Aussagen von mehreren Monaten auf wenige Wochen. Die untersuchten Formierstrategien führten zu teils deutlichen Unterschieden in der Zyklenlebensdauer. Während eine Variante zu einem schnelleren Kapazitätsabfall nach mittlerer Zyklenzahl führte, zeigte eine andere Strategie eine erhöhte mittlere Lebensdauer bei vergleichbarer Streuung wie die Referenz. Beobachtete Abweichungen einzelner Zellen konnten auf Faktoren wie abweichende elektrische Kontaktierung oder spezifische Belastungsprofile zurückgeführt werden.

Die Integrationstests bestätigen damit die Funktionsfähigkeit der entwickelten Schnittstellen, die Eignung der Datenübertragung in Echtzeit und den Nutzen der Verknüpfung von virtueller Analyse mit realem Prozess. Auf dieser Basis können zukünftig Formierungs- und Prüfstrategien deutlich zielgerichteter angepasst werden, um Qualitätsschwankungen früh zu erkennen und die Produktionsprozesse effizient zu optimieren.

## AP 5: Erstellung des virtuellen Produktionssystems

### UAP 5.1: Testläufe der Zellfinalisierung

Durch die im Projekt aufgebauten Datenerfassungs- und Analysetools konnten die in UAP 5.1 durchgeführten Langzeittests beschleunigt ausgewertet werden. Die kontinuierliche Erfassung von Kapazität, DCIR, Coulomb-Effizienz und Impedanzspektren (EIS) ermöglichte eine zeitnahe Identifikation von Trends und Abweichungen bereits in den ersten Zyklen. In Verbindung mit den im virtuellen Produktionssystem implementierten Auswertelgorithmen konnten belastbare Vorhersagen zur Lebensdauer der Zellen getroffen werden, lange bevor die vollständige Zyklisierung abgeschlossen war. Dadurch war es möglich, verschiedene Formierungsstrategien deutlich schneller zu vergleichen und Optimierungspotenziale gezielt zu identifizieren.

Am PEM der RWTH Aachen wurden auf dieser Basis umfangreiche Langzeittests durchgeführt, um die entwickelten Formierungsstrategien unter realen Produktionsbedingungen zu validieren. Grundlage waren Pouch-Zellen, die nach einem Referenzprotokoll sowie zwei alternativen Schnellformierungsansätzen gefertigt wurden. Im Folgenden sind die Protokolle dargestellt und erläutert.

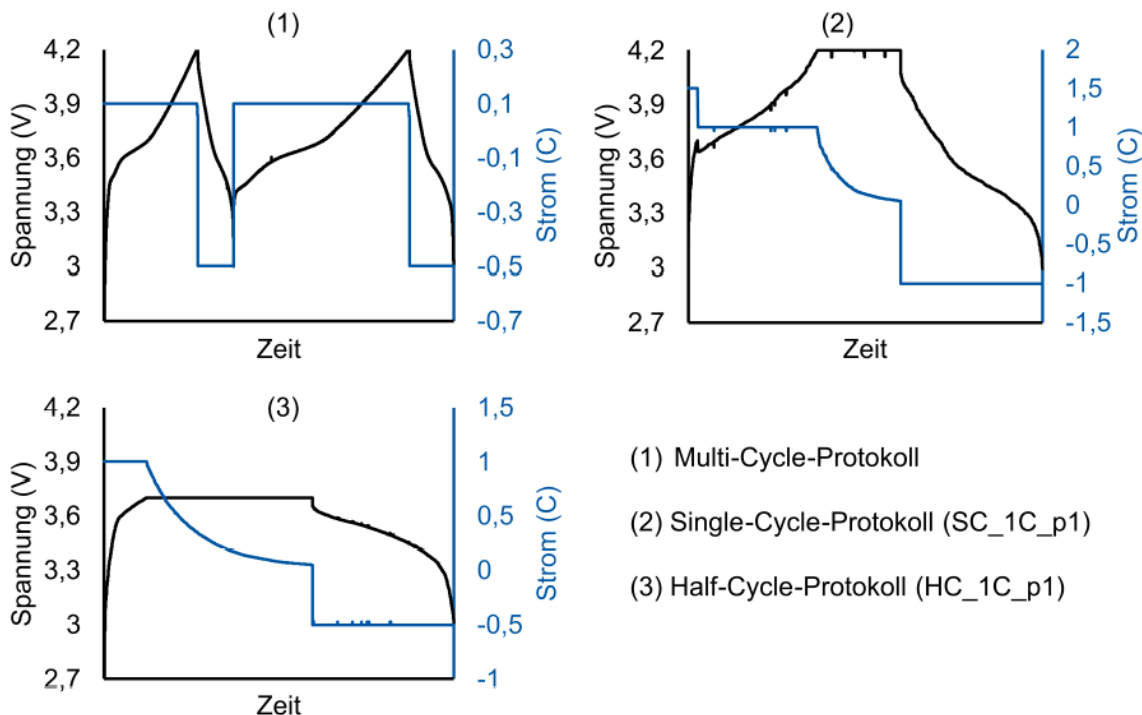


Abbildung 13: Vergleich der untersuchten Formierungsprotokolle

Das **Referenzprotokoll** bestand aus einem klassischen Multi-Cycle-Aufbau mit drei vollständigen Lade-Entladezyklen. Der erste Zyklus erfolgte im CC-Modus mit 0,1 C bis 4,2 V, gefolgt von einer CV-Phase bis 0,05 C. Anschließend wurde mit 0,5 C bis auf 3 V entladen. Dieser Ablauf wurde wiederholt, wobei die C-Raten im Verlauf angepasst wurden, um eine stabile SEI-Bildung zu ermöglichen.

Das **Single-Cycle-Protokoll** gliederte sich in zwei Spannungsbereiche. Zunächst wurde mit einer hohen C-Rate von 1,5 C bis 3,7 V geladen, gefolgt von einer stufenweisen Reduktion der C-Rate (0,1 / 0,5 / 1 C) bis 4,2 V. Danach schloss sich eine CV-Phase bis 0,05 C an, bevor mit 0,5 C bis auf 3 V entladen wurde. Ziel war eine schnelle Teilformierung im unteren Spannungsbereich und eine kontrollierte SEI-Ausbildung im oberen Bereich.

Das **Half-Cycle-Protokoll** beschränkte die Formierung bewusst auf den unteren Spannungsbereich. Hier erfolgte das Laden mit 0,1 / 0,5 / 1 C nur bis 3,7 V, gefolgt von einer CV-Phase bei 3,7 V und einer Entladung mit 0,5 C bis 3 V. Durch die reduzierte Spannungsbandbreite sollte die Formierung beschleunigt und gleichzeitig Lithium-Plating vermieden werden.

Die Auswertung zeigte, dass das Referenzprotokoll im Mittel 572 Zyklen bis zur End-of-Life-Kapazität von 80 % bei einer Standardabweichung von 46 Zyklen erreichte. Das Single-Cycle-Protokoll erzielte 515 Zyklen bei 28 Zyklen Standardabweichung, mit erhöhter Anfangskapazität, jedoch schnellerem Abfall nach rund 320 Zyklen. Das Half-Cycle-Protokoll erreichte im Mittel 608 Zyklen bei einer Standardabweichung von 43 Zyklen und zeigte über weite Teile der Lebensdauer einen stabilen Verlauf.

Untersuchungen zum Einfluss des Drucks während der Formierung zeigten, dass sich bei 0,1 C die benötigte Zeit unter höherem Druck ( $p_2$ ) im Vergleich zu niedrigerem Druck ( $p_1$ ) um rund 73 % reduzierte, während bei 1 C und 0,5 C nur etwa 10 % Zeitersparnis erreicht wurde. Bei Half-Cycle- und Single-Cycle-Protokollen beeinflusste der Druck die CC-Phase kaum, in der CV-Phase jedoch war eine deutliche Zeitreduktion erkennbar. Besonders bei einem 0,5 C-Protokoll lag die Differenz zwischen den Druckstufen bei fast einer halben Stunde (rund 50 %), bedingt durch einen Ausreißer mit stark verkürzter CV-Phase.

Über alle Protokolle hinweg ergab sich im Mittel eine Zeitersparnis von 5,8 %, was im Rahmen anderer Studien liegt. Deutliche Unterschiede zwischen den C-Raten zeigten sich vor allem in der CV-Phase: Bei 1 C war diese deutlich länger als bei 0,1 C, teils fast zehnmal so lang bei Half-Cycle-Protokollen. Ursache sind höhere Überspannungen, die bei hohen Strömen entstehen und in der CV-Phase abgebaut werden müssen, was das Erreichen des Abbruchkriteriums verzögert. Dadurch ähnelte der Zeitaufwand der 0,5 C-Protokolle dem der 1 C-Protokolle, während 0,5 C unter  $p_2$  bei Half-Cycle-Formierung rund zwei Drittel kürzer war als 1 C.

Innerhalb gleicher Protokollreihen traten teils große Unterschiede von bis zu 50 % zwischen den Druckstufen auf, deren Ursache nicht vollständig geklärt werden konnte. Um den Einfluss einzelner Ausreißer auf den Mittelwert zu verringern, wird empfohlen, künftig mehr Zellen pro Protokollreihe zu testen.

Auch war es möglich durch die Half-Cycle Protokolle die Formierzeit auf unter drei Stunden, in der Spitze bis zu 2,1 Stunden, zu reduzieren. Wobei sich bei Anwendung von CV-Phasen ein Grenznutzen bezüglich der Zeitreduktion ergibt, wenn höhere Ströme verwendet werden. Auch die Kombination mit der Pulsformierung aus dem Projekt InForm konnte hier keine weiteren Verbesserungen erzielen.

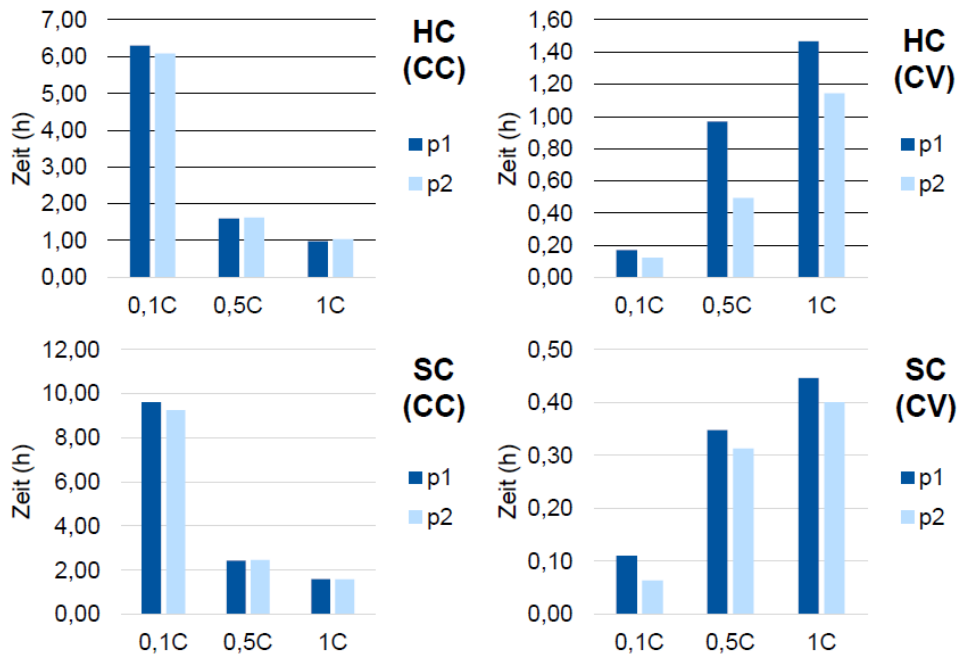


Abbildung 14: Gemittelte Formierzeiten der Single-Cycle (SC) und Half-Cycle Protokolle der CV- und CC-Phase

Die Ergebnisse belegen, dass die Kombination aus schneller Datenauswertung und gezielter Anpassung der Formierungsparameter es ermöglicht, Optimierungsansätze zügig zu bewerten und in die Produktionsstrategie zu übernehmen. Besonders das Half-Cycle-Protokoll zeigte, dass eine verkürzte Formierung bei gleichbleibender oder verbesserter Lebensdauer realisierbar ist. Abweichungen einzelner Zellen konnten auf Kontaktierungsprobleme oder Prozessschwankungen zurückgeführt werden. Zudem bestätigte sich, dass eine belastbare Lebensdauervorhersage bereits mit einem Bruchteil der üblichen Zyklendaten möglich ist, was die Grundlage für eine adaptive Prozesssteuerung in der industriellen Fertigung schafft.

Schlussendlich wurden die Projektergebnisse dieser Formierreihen auch mit denen des Projekt InForm in einer Korrelationsmatrix eingearbeitet, die in der nachfolgenden Abbildung dargestellt ist.

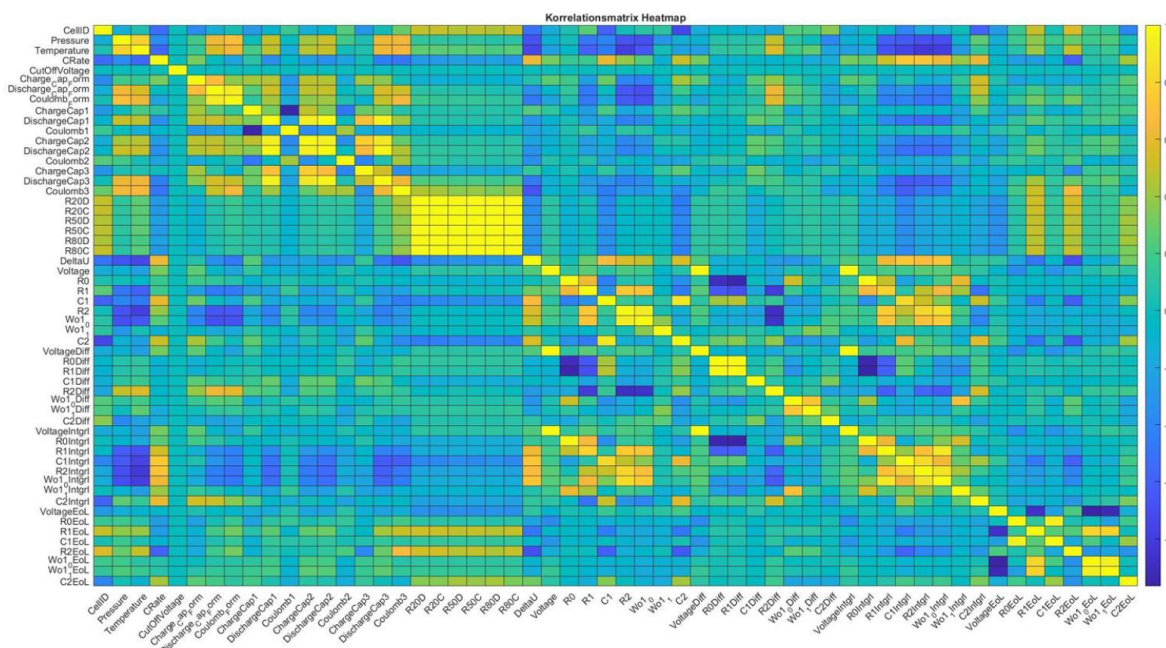


Abbildung 15: Korrelationsmatrix der Qualitätsparameter

Diese zeigt eine zusätzliche, zu den im Projekt angewendeten Algorithmen Auswertemöglichkeit, die ebenfalls in die Ergebnisse mit einfließt.

### UAP 5.2: Elektrische Validierung mit Lebensdauertests

Das Ziel dieses Arbeitspakets war es, zu untersuchen, ob neu entwickelte datenbasierte Methoden und Modelle eine vergleichbare Zuverlässigkeit wie klassische EOL-Tests bieten und gleichzeitig die Prozesszeit verkürzen können, insbesondere im Hinblick auf eine genauere Prognose des Zellzustands. Zu diesem Zweck wurden Zellen vom Partner PEM im ISEA-Testzentrum elektrisch charakterisiert und zyklischen Alterungstests unterzogen. Die elektrische Charakterisierung umfasste Kapazitätsmessungen, EIS, Impulstests und qOCV. Diese Daten wurden verwendet, um die in der Produktion festgelegten Parameter zu validieren und weitere Post-Mortem-Analysen vorzubereiten (UAP5.3). Die zyklische Alterung von Zellen aus PEM wurde abgeschlossen. Während der zyklischen Alterung wurden regelmäßig klassische Check-up-Tests durchgeführt und nach jeweils 50 Zyklen die Impedanz aufgezeichnet, um den Alterungsprozess zu verfolgen. Alle Zellen erreichten das Ende ihrer Lebensdauer mit einem SOH von ca. 80–81 %. Die Zellen wurden über einen Bereich von 1800 bis 2950 Zyklen bis zum Ende ihrer Lebensdauer gealtert. Ein Überblick über die elektrischen Validierungstests über die Lebensdauer, einschließlich Kapazitätsverlust, DC-IR und EIS bei unterschiedlichen Ladezuständen sowie die Unterschiede in den ICA-Kurven zwischen Beginn und Ende der Lebensdauer, ist in Abbildung 16 dargestellt.

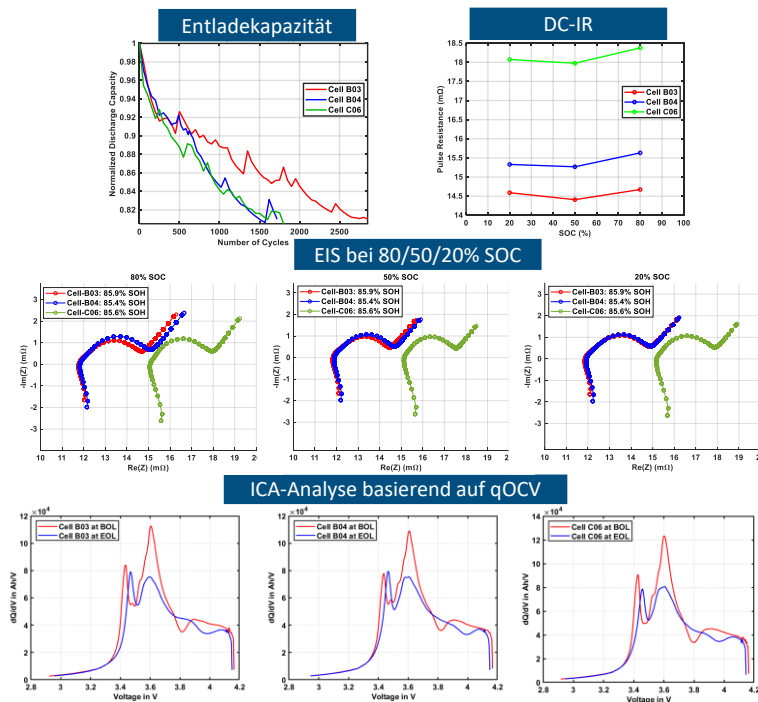


Abbildung 16: Alterungsverhalten von PEM-Zellen: Vergleich der Entladekapazität, DC-IR und EIS bei verschiedenen SOCs und ICA-Kurven zu Beginn und am Ende der Lebensdauer

Zusätzlich zu den PEM-Zellen wurden vier LiFun-Pouch-Zellen zyklischen Alterungstests unterzogen, um die entwickelten Modelle zu bewerten. Die Tests wurden bei unterschiedlichen C-Raten durchgeführt, folgten jedoch einem einheitlichen Messprotokoll. Während der Projektlaufzeit hatten diese Zellen das Ende ihrer Lebensdauer (SOH < 80%) noch nicht erreicht. Daher wurde ein veröffentlichter Datensatz von Zhang et al. [1] zusammen mit den Daten von Zellen verwendet, um ein datenbasiertes SOH-Schätzungsmodell zu entwickeln und zu validieren.

In Zusammenarbeit mit dem Partner IQS wurde ein datengestütztes Modell zur Prognose des SOH auf Basis von EIS- und Kapazitätsdaten entwickelt. Die entwickelte Architektur, wie in Abbildung 16 dargestellt, kombiniert Convolutional Neural Networks (CNN) zur Merkmalsextraktion mit bidirektionalem Long Short-Term Memory (BiLSTM) zur Modellierung von Abhängigkeiten. Zwei Modelle mit identischer Architektur wurden separat auf den beiden genannten Datensätzen trainiert.

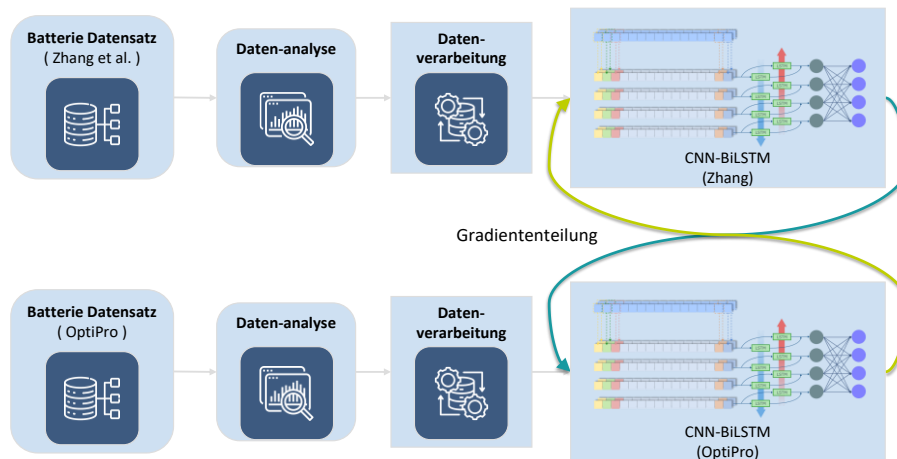


Abbildung 17: Schematische Darstellung der für die SOH-Prognose entwickelten Modellarchitektur

Um die Allgemeingültigkeit zu verbessern, wurde eine Strategie zur Gradientenfusion verwendet, bei der die Gradienteninformationen aus zwei separat trainierten Modellen kombiniert wurden. Die besten Prognoseergebnisse wurden für die bei 25 °C getesteten Projektzellen erzielt. Zwei der Zellen (PC01 und PC02) wurden für das Training verwendet, während eine dritte Zelle (PC03) als unabhängiger Testdatensatz diente. Das Modell erzielte konsistente Ergebnisse mit niedrigen RMSE-Werten und hoher Korrelation. Diese Ergebnisse werden in einem Artikel vorgestellt, der derzeit zur Veröffentlichung geprüft wird. Die Ergebnisse zeigen, dass datengesteuerte Modelle auch mit begrenzten Datensätzen zuverlässige SOH-Prognose liefern können. Die Kombination von EIS- und Kapazitätsdaten, ergänzt durch Gradienten-Fusionsmethoden, bietet einen vielversprechenden Ansatz, um die Dauer experimenteller Tests zu verkürzen und gleichzeitig die Prognosegenauigkeit zu erhalten.

[1] Y. Zhang, Q. Tang, Y. Zhang, J. Wang, U. Stimming, A.A. Lee, Identifying degradation patterns of lithium ion batteries from impedance spectroscopy using machine learning, *Nature Communications* 11 (2020) 1706. <https://doi.org/10.1038/s41467-020-15235-7>.

### UAP 5.3: Elektrochemische Validierung mittels Labormethoden

Die in UAP5.2 gealterten Pouchzellen wurden nach Abschluss des Lebensdauer-Testverfahrens einer Post-Mortem Analyse mittels zahlreicher Labormethoden unterzogen. Die dabei erzielten Ergebnisse lassen Schlüsse auf die Hauptalterungseffekte der Zellen zu und liefern zudem tiefere Einblicke in die Vergleichbarkeit der verschiedenen Zellen zueinander.

Die entladenen (0% SOC) Zellen wurden in einer Glovebox unter Schutzgasatmosphäre (<10ppm O<sub>2</sub>, <1ppm H<sub>2</sub>O) geöffnet. Grundlegende physikalische Parameter wurden festgehalten und optische Aufnahmen aller vorhandenen Elektroden sheets wurden zur späteren Zuordnung auffälliger Regionen aufgenommen. Ein Überblick der gealterten Batteriekomponenten ist in Abbildung 17 gegeben.



*Abbildung 18: Gealterte Anoden (links) und Kathoden Sheets (Mitte). Teil des gealterten Separators (rechts). Diese Komponenten wurden aus Zelle B03 entnommen.*

Die so geborgenen Materialien wurden mittels Lasermikroskopie untersucht, wobei optisch auffällige Regionen auf dem Elektrodenmaterial miteinander verglichen wurden. Verschiedene Verfärbungen und Ablagerungen auf der Oberfläche auf Seite der Anode deuteten auf Inhomogenitäten und eine unterschiedlich ausgeprägte Deckschicht hin.

Mithilfe des Lasermikroskops wurde in einigen Zellen neben weiteren Ablagerungen die charakteristische Morphologie möglichen Lithium-Platings beobachtet. Dieselben Proben wurden anschließend mit der REM-EDX Methode untersucht, welche einen eindeutigen Nachweis zuließ. Abbildung 18 zeigt beispielhaft einen solchen Fall für die gealterte Zelle B03. Neben Gebieten mit mehrheitlich lithiumhaltiger Zusammensetzung (Spektren der markierten Gebiete 7,8,12,15) wurden große Mengen von Sauerstoff, Fluor und Phosphor – als Hauptkomponenten der Festkörper-Elektrolyt-Grenzfläche (SEI) – in unterschiedlichen Verhältnissen auf der umliegenden Graphitoberfläche detektiert (Spektren 3,4,5,6,9,10,11,13,14). Diese Ergebnisse zeigen eine besonders ausgeprägte und inhomogene Deckschicht im Umfeld des Platings.

Die genaue Zusammensetzung der gealterten Proben wurde mittels ICP-OES bestimmt, was Aussagen über den Verbleib des Lithiums innerhalb der Zelle zulässt. Die elementare Zusammensetzung wurde hierbei auch durch REM-EDX verifiziert. Zur Bestimmung der Halbzellkurven von Anode und Kathode wurde entsprechend Elektrodenmaterial der geöffneten Zellen zur Fertigung von Knopfzellen gegen eine Referenzelektrode aus Lithium Metall verwendet. Mithilfe von Quecksilberporosimetrie wurde die Porosität der gealterten

Elektrodenmaterialien untersucht und mit den ursprünglichen Materialangaben verglichen. Die so erhaltenen Daten können darüber hinaus zur Parametrierung eines physikalisch-chemischen Modells der Zellen verwendet werden.

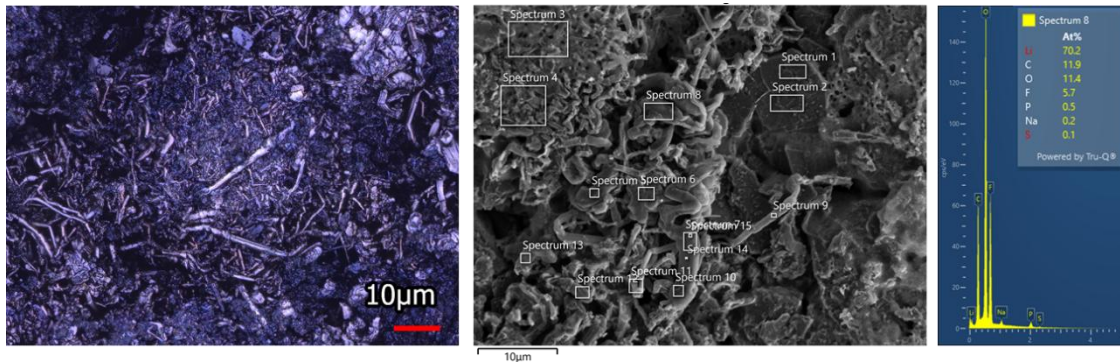


Abbildung 19: Lasermikroskopie Aufnahme gealterter Anode aus optisch auffälligem Bereich mit charakteristischen Strukturen (links), REM Aufnahme der gleichen Probe (mitte), REM-EDX Spektrum mit Stöchiometrie von 70% Lithium (rechts, zugehörig zu Stelle 8 in REM Aufnahme).

Für ein tiefergehendes Verständnis der SEI auf Anodenseite wurden Proben in einer optischen Zelle mittels Raman Spektroskopie untersucht. Der Vergleich unterschiedlicher Proben mit und ohne auffällig ausgeprägter Deckschicht liefert klare Hinweise auf das Vorhandensein von Lithium-Acetylid Spezies innerhalb der Deckschicht. Ein Peak bei einem Raman-Shift von  $1851\text{cm}^{-1}$  ist dafür charakteristisch und wird vermutlich lokal durch den Surface-Enhanced Raman Scattering (SERS) Effekt durch Nähe zu elementarem Lithium verstärkt. [2] Dieses Ergebnis korreliert damit einhergehend vermutlich mit dem zuvor nachgewiesenen Lithium Plating. Abbildung 19 zeigt die Raman Spektren von entsprechenden Anoden Proben.

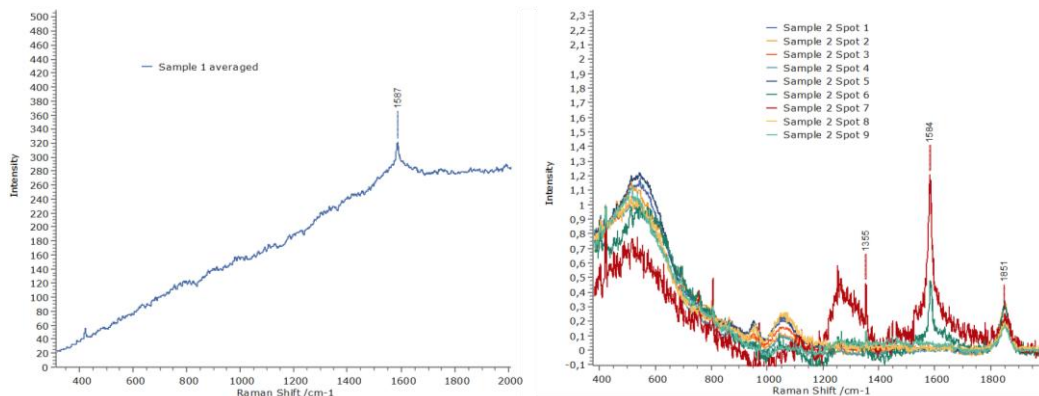


Abbildung 20: Raman Spektren von gealtertem Anodenmaterial ohne auffällige Verfärbung (links, Zelle B04), und mit im Mikroskop erkennbarer Deckschicht (rechts, unterschiedliche Messpunkte auf dem gleichen Sample, Zelle B03). Peaks bei  $1355\text{cm}^{-1}$  und  $1587\text{cm}^{-1}$  sind charakteristische Graphit Signale (D- und G-Bande),  $1851\text{cm}^{-1}$  wird Li-C≡C-X zugeordnet, ein breites Signal bei  $\sim 500\text{cm}^{-1}$  wird in diesem Zusammenhang auch in der Literatur beobachtet.

Insgesamt zeigte die Post-Mortem-Analyse, dass die angewendeten Labormethoden zuverlässig Hauptalterungseffekte identifizieren und Unterschiede zwischen den untersuchten Pouchzellen aufdecken konnten. Besonders hervorzuheben ist, dass mithilfe der Raman-Spektroskopie spezifische SEI-Komponenten wie Lithium-Acetylid nachgewiesen werden konnten, was in Kombination mit weiteren Analysen wie REM-EDX und Lasermikroskopie eindeutige Hinweise auf Lithium Plating und inhomogene Deckschichten lieferte.

[2] Minh Hoang et al. 'Collective Model Fusion for Multiple Black-Box Experts'. In: International Conference on Machine Learning (2019), pp. 2742–2750. issn: 2640-3498.url: <https://proceedings.mlr.press/v97/hoang19a.html>.

#### **UAP 5.4: Wirtschaftlichkeitsbetrachtung**

Am PEM der RWTH Aachen wurde ein Kalkulationstool zur Bewertung von Betriebs- und Investitionskosten in der Zellproduktion entwickelt, das den Formierprozess als besonders kostenrelevanten Abschnitt detailliert abbildet. Es erlaubt die gezielte Eingabe relevanter Prozessparameter wie Formierprotokoll, Temperatur- und Druckführung, Messtechnik oder Ausschussquote und greift auf umfangreiche Datenbanken zu Batteriezellparametern, Produktionsmitteln und -stoffen zu. So können kostenintensive Prozessschritte identifiziert und wirtschaftliche Auswirkungen technischer Änderungen realistisch bewertet werden.

Neben der technischen Betrachtung ermöglicht das Tool auch die Simulation verschiedener Investitionsszenarien, wie die Integration zusätzlicher Messtechnik (EIS), Druckbeaufschlagung, Temperaturregelung oder leistungsstärkerer Formierkanäle. Ein typisches Beispiel ist der Einsatz einer temperierten Formierkammer: Er kann die Prozesszeit verkürzen und die Qualität steigern, erfordert jedoch zusätzliche Investitionskosten.

Für die quantitative Analyse wurde auf Basis eines angepassten ProZell-Kostenmodells eine Gigafactory mit 10 GWh Jahreskapazität, Rundzellen im 4680-Format, NMC811-Kathode und Graphitanode simuliert. Unter Annahme einer Referenz mit drei C/10-Zyklen beträgt der Produktionskostenwert 130,95 \$/kWh. Durch eine Verkürzung der Benetzungszeit um 50 % sinken die Kosten um 0,55 \$/kWh. Die im Projekt getesteten verkürzten Formierprotokolle senken die Prozessdauer deutlich: Optimierung A mit 5,5 Stunden statt 8 Stunden reduziert die Produktionskosten um rund 1,1 % auf 129,50 \$/kWh. Optimierung B mit 2,6 Stunden verkürzt den Prozess noch stärker und führt zu einer Reduzierung um etwa 2,2 % auf 128,05 \$/kWh. Da die Materialkosten rund 80 % der Gesamtkosten ausmachen, entspricht dies einer Senkung der reinen Fertigungskosten um über 9 % allein durch Prozessoptimierungen bei konstanten Materialkosten.

Mit dem am FTM entwickelten TCO-Tool wurde der Einfluss dieser Zellkostensenkungen auf die Gesamtkosten der Fahrzeugnutzung untersucht. Unter Annahme einer Haltedauer von 8 Jahren, 15.000 km Jahresfahrleistung und einer nutzbaren Batteriekapazität von 60 kWh führt eine Reduktion der Zellkosten von 100 €/kWh auf 96 €/kWh zu einer Einsparung von 350 € (0,82 %) über den Nutzungszeitraum, was 0,20 % pro eingespartem Euro Zellkosten entspricht.

Diese Ergebnisse zeigen, dass die im Projekt entwickelten verkürzten Formierprotokolle sowie weiteren Zeitverkürzenden Maßnahmen in der Zellfinalisierung nicht nur zu messbaren Prozesszeitverkürzungen führen, sondern auch einen direkten und signifikanten Beitrag zur Kostenreduktion in der Zellfertigung und zur Senkung der Gesamtbetriebskosten in der Fahrzeuganwendung leisten.

#### **2. Wichtigste Positionen des zahlenmäßigen Nachweises.**

Während des Projektes kam es zu einem Änderungsantrag, welcher bewilligt wurde. Hier wurden 12.000 € von der Position der Kategorie 812 in die Kategorie 822 umgewidmet.

Die angepasste Ausgabenplanung im Hinblick auf die Änderungsanträge stimmte im Wesentlichen mit den tatsächlich angefallenen Kosten überein. Es gab lediglich leichte Verschiebungen in den Positionen. Detaillierte Zahlen hierzu finden sich im zahlenmäßigen Verwendungsnachweis.

### **3. Notwendigkeit und Angemessenheit der geleisteten Projektarbeiten.**

Zu Projektbeginn waren die wesentlichen Prozessschritte der Zellfinalisierung zwar bekannt, jedoch wurde das Potenzial einer durchgängigen, messtechnisch gestützten Betrachtung der gesamten Prozesskette noch nicht vollständig genutzt. Im Projekt OptiPro gelang es durch den Einsatz innovativer Anlagen- und Messtechnik, entscheidende Optimierungs- und Qualitätssicherungspotenziale insbesondere in den Bereichen Formierung und End-of-Line-Test zu erschließen. Ergänzend wurden umfangreiche Prozesskampagnen durchgeführt, die sowohl der Entwicklung eines virtuellen Produktionssystems als auch der Vertiefung des Systemverständnisses dienen.

Die durchgeführten Projektarbeiten waren notwendig, um zentrale technologische Herausforderungen in der Zellfinalisierung von Lithium-Ionen-Batterien zu adressieren. Besonders die langen Prozesszeiten und ein hoher Energieeinsatz stellten zu Projektbeginn Engpässe in der Produktion von Batteriezellen dar.

Im Rahmen des RWTH-Teilvorhabens wurden folgende Arbeitsschwerpunkte verfolgt:

- Aufbau und Inbetriebnahme einer erweiterten Messinfrastruktur zur elektrochemischen Impedanzspektroskopie (EIS) in mehreren Prozessschritten der Zellfinalisierung
- Entwicklung eines Warenträgersystems zur kontaktstabilen Inline-EIS-Messung während der Formierung
- Digitalisierung und Vernetzung von Anlagen zur Datenerfassung und -speicherung im virtuellen Produktionssystem
- Entwicklung eines Machine-Learning-basierten Vorhersagemodells zur Qualitätsprognose
- Durchführung von Alterungstests und Validierung der Modelle anhand realer Zellzyklen

Die Bearbeitung dieser Punkte war notwendig, um das Zielbild einer datenbasierten, echtzeitfähigen und ressourceneffizienten Zellfinalisierung zu realisieren. Die Ausrichtung auf mess- und modellgestützte Methoden war angemessen, da sie sowohl dem aktuellen Stand der Technik entspricht als auch zukunftsweisende Konzepte der Produktionsdigitalisierung integriert.

### **4. Voraussichtlicher Nutzen, insbesondere die Verwertbarkeit des Ergebnisses – auch konkrete Planungen für die nähere Zukunft - im Sinne des fortgeschriebenen Verwertungsplans**

- **Industrieller Nutzen:** Die entwickelten Konzepte zur Inline-EIS-Integration und datenbasierten Zellklassifikation können unmittelbar auf industrielle Formier- und Prüfprozesse übertragen werden. Die Reduktion von Prüfzeiten und die Verbesserung der First-Pass-Yield durch frühzeitige Detektion von Fehlern steigert die Wirtschaftlichkeit der Zellproduktion. Auch allgemein können die gesammelten Erfahrungen zur EIS-Messtechnologie an vielen Stellen über den gesamten Lebenszyklus einer Batterie genutzt werden, um Akteure aus der Industrie bei der Weiterentwicklung ihrer Produkte zu unterstützen.
- **Forschungsseitiger Nutzen:** Die RWTH Aachen nutzt die im Projekt erzeugten Daten, Modelle und entwickelten Infrastrukturen in Folgeprojekten und wissenschaftlichen Arbeiten weiter. Themen wie die Schnellformierung, digitale Zwillinge in der Batterieproduktion oder adaptive Prüfprotokolle werden bereits in Kooperationsprojekten mit Industrie und Forschungspartnern aufgegriffen. Die im

Rahmen des Projektes entstandenen Ergebnisse wurden oder werden noch in Publikationen veröffentlicht, sodass diese für ein möglichst breites Publikum verfügbar sind.

- **Nutzen in Weiterbildung und Lehre:** In mehreren Abschlussarbeiten sowie im Rahmen von Lehrveranstaltungen an PEM, IMA und ISEA fließen die Projektergebnisse in die universitäre Ausbildung ein. Beispielsweise konnten die Ergebnisse des im Projekt veröffentlichten Review Papers zur Zellfinalisierung direkt in die Überarbeitung einer Vorlesung an der RWTH einfließen.

## 5. Während der Durchführung des Vorhabens bekannt gewordene Fortschritt auf dem Gebiet bei anderen Stellen.

Während der Projektlaufzeit wurden Fortschritte bei anderen Akteuren, etwa im Bereich der Schnellformierung und der virtuellen Abbildung von Produktionssystemen, beobachtet. Diese Entwicklungen bestätigen die Projektausrichtung von OptiPro, ohne sie jedoch zu überholen. Die noch nicht veröffentlichten sehr kurzen Formierzeiten von etwas über 2 Stunden stellen nach aktuellem Kenntnisstand einen Benchmark dar. Teilweise fand ein Austausch mit diesen Akteuren statt (FFB, MEET, etc.)

Im Rahmen der Vernetzung mit anderen InZePro-Projekten (u. a. ViPro, Inform, KIPRoBatt) wurde deutlich, dass eine flächendeckende Kombination aus Messtechnik, digitaler Vernetzung und modellgestützter Analyse bislang einzigartig ist. Die innerhalb OptiPro verfolgte holistische Herangehensweise an die Zellfinalisierung hebt sich insofern vom isolierten Vorgehen anderer Initiativen ab.

Während des Projektverlaufs fand ein kontinuierlicher wissenschaftlicher und technischer Austausch auch mit Partnern außerhalb des Projektkonsortiums statt. Dadurch konnte ein umfassender Überblick zu laufenden Forschungs- und Entwicklungsarbeiten in Industrie und Forschungseinrichtungen gewonnen werden. Das Netzwerk des Kompetenzclusters InZePro wurde gezielt genutzt, um relevante Fortschritte anderer Akteure in noch offene Arbeitspakete einfließen zu lassen. Zum Zeitpunkt des Projektabschlusses spiegeln die Inhalte dieses Berichts somit den aktuellen Stand der Wissenschaft wider.

## 6. Erfolgte oder geplante Veröffentlichungen des Ergebnisses nach Nr. 5 der NABF und NKBF.

Im Rahmen des Projekts wurden die Ergebnisse in Journals oder auf Konferenzen veröffentlicht, welche in nachfolgend als Übersicht zusammengefasst sind.

Lfd. Nr.	Autoren	Titel	Journal, Volume, Issue, Conference	Jahr	Sonstiges (DOI)
1	S.Celik, D.U.Sauer	A Bibliometric Analysis on Electrochemical Impedance Spectroscopy of Batteries	Advanced Battery Power Conference	2022	Poster
2	S.Celik, Z.Ma, A.Blömeke, D.Jöst, M.Fida, D.U.Sauer	Electrochemical Impedance Spectroscopy of a Battery Module Considering Different Internal Cell Imbalances	Advanced Battery Power Conference	2023	Poster
3	S.Celik, Z.Ma, Z. Hong, D.Wasyłowski, D.U.Sauer	Detection of Cell Imbalances by Module-Level Electrochemical Impedance Spectroscopy	Advanced Battery Power Conference	2025	Poster
4	S.Celik, Z.Ma, Z. Hong, D.Wasyłowski, D.U.Sauer	EIS-Based Diagnosis of Cell Imbalances in Series-Connected Battery Modules	Batteries & Supercaps	2025	10.1002/batt.202500284

<b>5</b>	Achim Kampker, Heiner Heimes, Christian Offermanns, Sarah Wennemar, Tobias Robben, Nikolaus Lackner	Optimizing the Cell Finishing Process: An Overview of Steps, Technologies, and Trends	World Electric Vehicle Journal. 2023; 14(4):96	2023	<a href="https://doi.org/10.3390/wevj14040096">https://doi.org/10.3390/wevj14040096</a>
<b>6</b>	Kampker, Achim; Heimes, Heiner; Frieges, Moritz H.; Lackner, Nikolaus	Design of a highly adaptable 3D-printed Battery Cell Fixture for in-line Gas Evolution Measurement of Pouch Format Battery Cells during Formation	Advanced Automotive Battery Conference USA	2023	Poster
<b>7</b>	Lackner, N.; Robben, T. et al.	Aspects and implications of very short formation times in the production process of Lithium-ion-battery cells	TBD	2025 - 2026	Paper, geplant