

## Rene Lagger, BSc

# Optimierung einer 18650 Lithium-Ionen Batteriezelle hinsichtlich des mechanischen Verhaltens in Kombination mit dem elektrischen Kurzschluss im Crashlastfall

## Masterarbeit

zur Erlangung des akademischen Grades Diplom-Ingenieur Masterstudium Maschinenbau

eingereicht an der Technischen Universität Graz

> Betreuer: Dipl.-Ing. Christian Ellersdorfer Institut für Fahrzeugsicherheit

Institutsvorstand: Univ.-Prof. Dipl.-Ing. Dr. techn. Hermann Steffan

Graz, November 2015

Eidesstattliche Erklärung

# Eidesstattliche Erklärung

Ich erkläre an Eides statt, dass ich die vorliegende Arbeit selbstständig verfasst, andere als die angegebenen Quellen/Hilfsmittel nicht benutzt, und die den benutzten Quellen wörtlich und inhaltlich entnommenen Stellen als solche kenntlich gemacht habe. Das in TUGRAZonline hochgeladene Textdokument ist mit der vorliegenden Masterarbeit identisch.

Graz, am .....

.....

(Rene Lagger)

Danksagung

# Danksagung

An dieser Stelle möchte ich mich ganz herzlich bei allen Personen bedanken, die mich bei dieser Arbeit unterstützt haben. Besonders möchte ich mich bei meinem Betreuer Dipl.-Ing. Christian Ellersdorfer bedanken, der mir jederzeit mit Rat und Tat zur Seite stand und mich während der Durchführung der gesamten Diplomarbeit tatkräftig unterstützte. Auch für das Korrekturlesen meiner Arbeit möchte ich mich recht herzlich bedanken.

Ebenfalls möchte ich mich bei Univ.-Prof. Dipl.- Ing. Dr. techn. Hermann Steffan für die Ermöglichung der Durchführung einer Arbeit und die Bereitstellung eines Arbeitsplatzes am Institut bedanken.

Des Weiteren möchte ich mich bei allen Mitarbeiterrinnen und Mitarbeitern bedanken, die ständig darum bemüht sind, ein angenehmes Arbeitsklima zu schaffen.

Ein großes Dankeschön gilt auch meiner gesamten Familie und besonders meiner Mutter und meinem Vater, die mir die Möglichkeit gegeben haben, dieses Studium zu absolvieren.

Auch möchte ich mich an dieser Stelle bei meiner Freundin für ihre Unterstützung während des Studiums bedanken.

## **Kurzfassung**

Der stetig größer werdende Bedarf an Mobilität in der Weltbevölkerung und die mit der fortschreitenden Globalisierung und Industrialisierung steigende Anzahl an Verkehrsmitteln weltweit führen dazu, dass sich unser Klima immer mehr zum Negativen hin verändert, beispielsweise durch die steigende Anzahl an schweren und heftigen Wetterextreme wie Überschwemmungen und Stürmen. Aktuell bedient sich das Transportwesen noch hauptsächlich an fossilen Brennstoffen. Die damit einhergehende Produktion schädlicher Emissionen wie Stickstoffoxide (NO<sub>x</sub>), Feinstaub (PM<sub>10</sub>) oder Kohlenmonoxid (CO) führt zu Problemen mit Bildung von bodennahem Ozon in großen Ballungszentren, zur Erwärmung des Weltklimas und trägt in hohem Maße zur Erhöhung der Konzentration des Kohlendioxid-Anteils (CO<sub>2</sub>) in der Erdatmosphäre bei [1]. Um diesen negativen Trend entgegenzuwirken und die Zukunft nachhaltiger zu gestalten, setzt die Automobilindustrie vermehrt auf Elektrofahrzeuge. Eine besondere Herausforderung stellt dabei die Sicherheit von Elektrofahrzeugen dar. Um eine Aussage treffen zu können, wie sich eine 18650 Lithium-Ionen Zelle im Falle eines Unfalles verhält, soll in der vorliegenden Arbeit ein bestehendes Simulationsmodell einer Zelle auf vier unterschiedliche Belastungskonfigurationen hin optimiert werden. Die Belastungskonfigurationen sind der Fachliteratur entnommen und ermöglichen eine Beurteilung der mechanischen Eigenschaften des Zelltyps. 2013 wurden am Vehicle Safety Institut eine Reihe von Versuchen mit Lithium-Ionen Zellen durchgeführt, in denen Messdaten zur Verformungskraft, zum Verformungsweg sowie der Spannungsverlauf aufgezeichnet wurden. In einem ersten Schritt galt es, diese Datenreihen auszuwerten, um für das Simulationsmodell eine Validierungsgrundlage zu schaffen. Die Verknüpfung von mechanischer Belastung und elektrischem Verhalten diente in weiterer Folge zur Ermittlung eines Kurzschlusskriteriums. Um eine Übereinstimmung der Versuchsund Simulationsergebnisse bei allen Belastungskonfigurationen zu erhalten, wurde eine Optimierung der Materialparameter des Simulationsmodells durchgeführt. Aus der Optimierung soll ein einheitliches Simulationsmodell hervorgehen, welches die identischen mechanischen Eigenschaften aufweist wie eine reale 18650 Lithium-Ionen Zelle, abhängig von der gewählten Belastungskonfiguration.

Abstract

## Abstract

The ever-increasing need for mobility in the world's population and, with the progressive globalization and industrialization rising number of transport worldwide, lead to the fact that our climate increasingly changed for the worse towards, for example, by the growing number of serious and violent weather extremes such as floods and storms. Currently, the transport sector mainly serves on fossil fuels. The concomitant production of harmful emissions such as nitrogen oxides (NO<sub>x</sub>), particulate matter (PM<sub>10</sub>) or carbon monoxide (CO) causes problems with the formation of tropospheric ozone in large conurbations, the warming of the global climate and greatly contributes to increasing the concentration of the carbon dioxide content (CO<sub>2</sub>) in the atmosphere [1]. In order to counteract this negative trend and to shape the future of sustainable, the automotive industry is increasingly focusing on electric vehicles. A special challenge is the safety of electric vehicles. In Order to be able to make a statement, how a 18650 lithium-ion cell behaves in case of an accident, in the present work an existing simulation model of a cell should be optimized for four different load configurations. The load configurations are taken from the literature and permit an assessment of the mechanical properties of the cell type. 2013 a series of experiments with lithium-ion cells were conducted at the Vehicle Safety Institute, where measurement data for deforming force, for deformation and the voltage curve were recorded. In a first step it was necessary to evaluate these data series, in order to provide a validation basis for the simulation model. The combination of mechanical stress and electrical behavior subsequently served to determine a short-circuit criterion. In order to obtain a match of the experimental and simulation results on all load configurations, an optimization of the material parameters of the simulation model was carried out. Out of the optimization a common simulation model is to emerge, which has the identical mechanical properties as a real 18650 lithium-ion cell, depending on the selected load configuration.

# Inhaltsverzeichnis

1	E	Einlei	tur	)g	2
	1.1	_	Mc	tivation	2
	1.2	2	Aut	fgabenstellung und Ziel der Arbeit	3
2	L	itera	tur	studie	8
	2.1	L	KTI	VI Freeride E	8
	2.2	2	Par	nasonic CGR-18650KA	11
	2.3	3	Litł	nium-Ionen-Technologie	14
	2.4	ŀ	Get	fahrenquellen bei Lithium-Ionen Batterien	15
	2.5	5	Prü	fmethoden von Lithium-Ionen Zellen	
	2.6	5	Prü	fmethoden aus der Fachliteratur	20
	2.7	7	Prü	fmethoden zur Optimierung des Simulationsmodells	21
	2	2.7.1		Crush in X-Richtung	21
	2	2.7.2		Crush in Z-Richtung	22
	2	2.7.3		Crush Penetration	22
	2	2.7.4		Crush 3-Punkt-Biegung	23
3	١	Vorha	and	enes Simulationsmodell	24
	3.1	<u> </u>	Aus	sgewählter Finite Elemente-Solver für die Simulation	24
		3.1.1		Element-Typen im LS-DYNA	24
		3.1.2		Kontaktbedingungen	25
	3.2	2	Aut	fbau des Simulationsmodells	26
		3.2.1		Komponente "Boden"	27
		3.2.2		Komponente "Mantel"	28
		3.2.3		Komponente "Polkappe"	28
	3	3.2.4		Komponente "Deckel"	

	3.2.5	<b>;</b>	Komponente "Pluspol"	31
	3.2.6	5	Komponente "Aktivmaterial"	31
4	Erge	bnis	sse aus den Versuchen	. 35
	4.1	Mo	otivation	. 35
	4.2	Au	sgangslage bei der Auswertung der Versuche	. 35
	4.3 SOC	Ve 	rsuchsauswertung Anhand der Testkonfiguration "Crush 3-Punkt-Biegung" /	0% 36
	4.3.1	-	Ermittlung von Kraft-Weg und Spannungs-Weg Diagrammen	36
	4.3.2	2	Ermittlung des Mittelwertes und Definition des Streubereiches	38
	4.3.3	3	Definition des Kurzschlussbereiches	41
	4.3.4	ļ	Einfluss des Ladezustandes der Zellen	43
	4.4	Crı	ush in X-Richtung	45
	4.5	Crι	ush in Z-Richtung	46
	4.6	Cru	ush Penetration	47
5	Optii	mie	rung der Materialparameter	. 49
	5.1	De	finition des Toleranzbereiches für das Simulationsmodell	49
	5.2	Vo	rgehensweise bei der Optimierung	49
	5.2.1 Wert	tebe	Komponenten des FE-Modells mit den Parametern und deren dazugehöri ereichen	gen 50
	5.2.2	2	Optimierungsstrategie	. 56
	5.2.3	3	Algorithmus zur Fehlerminimierung	57
	5.2.4	ļ	Anzahl der Iterationsschritte	57
	5.3	Au	sgangssituation vor der Optimierung	58
	5.3.1	-	Crush in X-Richtung	. 58
	5.3.2	2	Crush in Z-Richtung	60
	5.3.3	}	Crush Penetration	61

Inhaltsverzeichnis

	5.3.4	4 Crush 3-Punkt-Biegung	62
6	Erge	bnisse des Optimierungsprozesses	65
	6.1	Crush in X-Richtung	65
	6.2	Crush in Z-Richtung	68
	6.2.	1 Optimierung der Kraft-Weg-Verläufe mit Fokus auf "Crush in Z-Richtung"	70
	6.3	Crush Penetration	74
	6.4	Crush 3-Punkt-Biegung	76
	6.5	Optimierung der Spannungs-Dehnungs-Kurven im plastischen Bereich der äuße	eren
	Zellkoi	mponenten	79
	6.6	Optimierung der Spannungs-Dehnungs-Kurven im plastischen Bereich	des
	Aktivn	naterials	82
7	Zusa	ammenfassung	87
8	Ausl	blick	88
	8.1	Änderung des Materialmodells im Bereich der Polkappe	88
	8.2	Modellierung eines dünnen Rohres in der Mitte der Zelle	89
	8.3	Änderung des Materialmodells im Bereich des Aktivmaterials	90
9	Liter	raturverzeichnis	92
1	0 An	hang	96

Abbildung 1. 1: CO2-Emissionen der Neuwagenflotte in der EU und Emissionsziel bis 2020 [2] 2
Abbildung 1. 2: Kraft/Spannung über Verformungsweg bei Belastung in axialer Richtung [11]. 6
Abbildung 1. 3: Vergleich von Versuch und Simulation aus der vorangegangenen Diplomarbeit
[11]7

Abbildung 2. 1: KTM Freeride E [13]8
Abbildung 2. 2: KTM Powerpack der Freeride E in Verbindung mit dem Elektromotor [15]9
Abbildung 2. 3: Panasonic CGR-18650KA [18]11
Abbildung 2. 4: Aufbau einer 18650Lithium-Ionen Zelle [21]12
Abbildung 2. 5: Zusammenhang der PSS-Technologie [19]13
Abbildung 2. 6: Chemische Vorgänge in einer Lithium-Ionen-Zelle [24]
Abbildung 2. 7: 3-Punkt-Biegung nach Sahraei [32]20
Abbildung 2. 8: Schematische Darstellung der Versuchsanordnung "Crush in X-Richtung" 21
Abbildung 2. 9: Schematische Darstellung der Versuchsanordnung "Crush in Z-Richtung" 22
Abbildung 2. 10: Schematische Darstellung der Versuchsanordnung "Crush Penetration" 23
Abbildung 2. 11: Schematische Darstellung der Versuchsanordnung "Crush 3 Punkt Biegung"

Abbildung 3. 1: Selbstkontakt der FE-Zelle
Abbildung 3. 2: Aufbau und Komponenten des Simulationsmodells der 18650 Lithium-Ionen
Zelle
Abbildung 3. 3: Spannungs-Dehnungs-Kurve LCSS im plastischen Bereich der Komponente
"Boden" [11]
Abbildung 3. 4: Detailansicht des Aufbaus auf der Kathodenseite einer 18650 Lithium-Ionen
Zelle [21]
Abbildung 3. 5: Spannungs-Dehnungs-Diagramm des Mantels mit Kurve für den plastischen
Bereich
Abbildung 3. 6: Spannungs-Dehnungs-Diagramm der Polkappe mit Angabe von Etan im
plastischen Bereich

Abbildung 3. 7: Spannung-Dehnungs-Kurve im plastischen Bereich der Komponente "Deckel"
[11]
Abbildung 3. 8: Material-Koordinatensystem [36]
Abbildung 3. 9: Vergleich von Material-Koordinatensystem und Zellen-Koordinatensystem 33
Abbildung 3.10: Materialverhalten MAT_HONEYCOMB im unkomprimierten und
komprimierten Bereich [37]
Abbildung 4. 1: Kraft-Weg-Verläufe der Zellen bei der Versuchsanordnung "Crush 3 Punkt
Biegung" / 0 [%] SOC
Abbildung 4. 2: Vollständige Deformation der Zelle bei der Versuchsanordnung "Crush 3 Punkt
Biegung" [11]
Abbildung 4. 3: Spannungs-Weg-Verläufe der Zellen bei der Versuchsanordnung "Crush 3 Punkt
Biegung" / 0 [%] SOC
Abbildung 4. 4: Mittelwert des Kraftverlaufes sowie obere und untere Grenzkurve mittels
Standardabweichung bei der Versuchsanordnung "Crush 3-Punkt-Biegung" / 0 [%] SOC 39
Abbildung 4. 5: Mittelwert des Kraftverlaufes und maximaler bzw. minimaler Kraft-Weg-Verlauf
bei der Versuchsanordnung "Crush 3-Punkt-Biegung" / 0 [%] SOC
Abbildung 4. 6: Mittelwert des Spannungsverlaufes und maximaler bzw. minimaler Spannungs-
Weg-Verlauf bei der Versuchsanordnung "Crush 3-Punkt-Biegung" / 0 [%] SOC
Abbildung 4. 7: Kraft- und Spannungsverlauf mit Kurzschlussbereich bei der Versuchsanordnung
"Crush 3-Punkt-Biegung" / 0 [%] SOC
Abbildung 4. 8: Temperaturabhängigkeit des Innenwiderstandes einer Starterbatterie [40] 44
Abbildung 4.9: Kraft- und Spannungsverlauf mit Kurzschlussbereich bei der Versuchsanordnung
"Crush 3-Punkt-Biegung" / 100 [%] SOC45
Abbildung 4. 10: Kraft- und Spannungsverlauf mit Kurzschlussbereich bei der
Versuchsanordnung "Crush in X-Richtung" / 0 [%] SOC46
Abbildung 4. 11: Kraft- und Spannungsverlauf mit Kurzschlussbereich bei der
Versuchsanordnung "Crush in Z-Richtung" / 0 [%] SOC
Versuchsanordnung "Crush in Z-Richtung" / 0 [%] SOC

```
Abbildungsverzeichnis
```

Abbildung 5. 1: Schematische Darstellung des Optimierungsprozesses von Kraft-Weg-Verläufen
im LS-OPT
Abbildung 5. 2: Spannungs-Dehnungs-Kurve im plastischen Bereich des Bodens und des Mantels
der Zelle
Abbildung 5. 3: Repräsentativer kubischer Spline für den plastischen Bereich des Aktivmaterials
[44]
Abbildung 5. 4: Spannungs-Dehnungs-Kurve LCA des Aktivmaterials in Material-
Koordinatenrichtung a55
Abbildung 5. 5: : Vergleich Ausgangsbasis Simulation – Zellversuch bei der Testkonfiguration
"Crush in X-Richtung" / 0 [%] SOC59
Abbildung 5. 6: Simulationsmodell der Zelle mit den dazugehörigen Koordinatensystemen 60
Abbildung 5. 7: Vergleich Ausgangsbasis Simulation – Zellversuch bei der Testkonfiguration
"Crush in Z-Richtung" / 0 [%] SOC61
Abbildung 5. 8: Vergleich Ausgangsbasis Simulation – Zellversuch bei der Testkonfiguration
"Crush Penetration" / 0 [%] SOC62
Abbildung 5. 9: Vergleich Ausgangsbasis Simulation – Zellversuch bei der Testkonfiguration
"Crush 3 Punkt Biegung" / 0 [%] SOC / 15 mm63
Abbildung 5. 10: Vergleich Ausgangsbasis Simulation – Zellversuch bei der Testkonfiguration
"Crush 3 Punkt Biegung" / 0 [%] SOC / 7,5 mm64
Abbildung 6. 1: Vergleich Zellversuch – Simulation mit Parameteroptimierung "Crush in X-
Richtung" / 0 [%] SOC
Abbildung 6. 2: Vergleich Ausgangsbasis – Optimiertes Simulationsmodell "Crush in X-Richtung"
/ 0 [%] SOC
Abbildung 6. 3: Verformung des Zellmodells in der Simulation bei der Testkonfiguration "Crush
Penetration" 67
Abbildung 6. 4: Verformung einer 18650 Lithium-Ionen Zelle bei der Versuchsanordnung "Crush
in X-Richtung" [11]
Abbildung 6. 5: Vergleich Zellversuch – Simulation mit Parameteroptimierung "Crush in Z-
Richtung" / 0 [%] SOC
Abbildung 6. 6: Vergleich Ausgangsbasis – Optimiertes Simulationsmodell "Crush in Z-Richtung"
/ 0 [%] SOC

Abbildung 6. 7: Verformung des Zellmodells in der Simulation bei der Testkonfiguration "Crush
in Z-Richtung" im Vergleich mit der realen Verformung der 18650 Lithium-Ionen Zelle im
Versuch [11]
Abbildung 6. 8: Vergleich Zellversuch - Bestes Simulationsergebnis bei der Testkonfiguration
"Crush in Z-Richtung"
Abbildung 6. 9: Kraft-Weg-Verlauf bei der Testkonfiguration "Crush in X-Richtung" mit Fokus
der Optimierung hinsichtlich Crush in Z-Richtung / Im Vergleich dazu der optimierte Kraftverlauf
gültig für alle Testkonfigurationen71
Abbildung 6. 10: Kraft-Weg-Verlauf bei der Testkonfiguration "Crush Penetration" mit Fokus
der Optimierung hinsichtlich Crush in Z-Richtung / Im Vergleich dazu der optimierte Kraftverlauf
gültig für alle Testkonfigurationen72
Abbildung 6. 11: Kraft-Weg-Verlauf bei der Testkonfiguration "Crush 3 Punkt Biegung" mit
Fokus der Optimierung hinsichtlich Crush in Z-Richtung / Im Vergleich dazu der optimierte
Kraftverlauf gültig für alle Testkonfigurationen73
Abbildung 6. 12: Vergleich Zellversuch – Simulation mit Parameteroptimierung "Crush
Penetration" / 0 [%] SOC
Abbildung 6. 13: Vergleich Ausgangsbasis – Optimiertes Simulationsmodell "Crush Penetration"
Abbildung 6. 13: Vergleich Ausgangsbasis – Optimiertes Simulationsmodell "Crush Penetration" / 0 [%] SOC
Abbildung 6. 13: Vergleich Ausgangsbasis – Optimiertes Simulationsmodell "Crush Penetration" / 0 [%] SOC
Abbildung 6. 13: Vergleich Ausgangsbasis – Optimiertes Simulationsmodell "Crush Penetration" / 0 [%] SOC
Abbildung 6. 13: Vergleich Ausgangsbasis – Optimiertes Simulationsmodell "Crush Penetration" / 0 [%] SOC
Abbildung 6. 13: Vergleich Ausgangsbasis – Optimiertes Simulationsmodell "Crush Penetration" / 0 [%] SOC
Abbildung 6. 13: Vergleich Ausgangsbasis – Optimiertes Simulationsmodell "Crush Penetration" / 0 [%] SOC
Abbildung 6. 13: Vergleich Ausgangsbasis – Optimiertes Simulationsmodell "Crush Penetration" / 0 [%] SOC
Abbildung 6. 13: Vergleich Ausgangsbasis – Optimiertes Simulationsmodell "Crush Penetration" / 0 [%] SOC
Abbildung 6. 13: Vergleich Ausgangsbasis – Optimiertes Simulationsmodell "Crush Penetration" / 0 [%] SOC
Abbildung 6. 13: Vergleich Ausgangsbasis – Optimiertes Simulationsmodell "Crush Penetration"/ 0 [%] SOCAbbildung 6. 14: Verformung des Zellmodells in der Simulation bei der Testkonfiguration "CrushPenetration"76Abbildung 6. 15: Verformung einer 18650 Lithium-Ionen Zelle bei der Versuchsanordnung"Crush Penetration" [11]76Abbildung 6. 16: Vergleich Zellversuch – Simulation mit Parameteroptimierung "Crush 3 PunktBiegung" / 0 [%] SOC77Abbildung 6. 17: Verformung des Zellmodells in der Simulation bei der Testkonfiguration "CrushPenetration"78Abbildung 6. 18: Verformung einer 18650 Lithium-Ionen Zelle bei der Versuchsanordnung
Abbildung 6. 13: Vergleich Ausgangsbasis – Optimiertes Simulationsmodell "Crush Penetration" / 0 [%] SOC
Abbildung 6. 13: Vergleich Ausgangsbasis – Optimiertes Simulationsmodell "Crush Penetration"/ 0 [%] SOCAbbildung 6. 14: Verformung des Zellmodells in der Simulation bei der Testkonfiguration "CrushPenetration"76Abbildung 6. 15: Verformung einer 18650 Lithium-Ionen Zelle bei der Versuchsanordnung"Crush Penetration" [11]76Abbildung 6. 16: Vergleich Zellversuch – Simulation mit Parameteroptimierung "Crush 3 PunktBiegung" / 0 [%] SOC77Abbildung 6. 17: Verformung des Zellmodells in der Simulation bei der Testkonfiguration "CrushPenetration"78Abbildung 6. 18: Verformung einer 18650 Lithium-Ionen Zelle bei der Versuchsanordnung"Crush 3 Punkt Biegung" [11]78Abbildung 6. 19: Vergleich Ausgangsbasis – Optimiertes Simulationsmodell "Crush 3 Punkt
Abbildung 6. 13: Vergleich Ausgangsbasis – Optimiertes Simulationsmodell "Crush Penetration" / 0 [%] SOC
Abbildung 6. 13: Vergleich Ausgangsbasis – Optimiertes Simulationsmodell "Crush Penetration" / 0 [%] SOC

Abbildung 6. 21: Spannungs-Dehnungs-Kurve im plastischen Bereich bei den Komponenten
"Boden" und "Mantel"
Abbildung 6. 22: Spannungs-Dehnungs-Kurve im plastischen Bereich bei der Komponente
"Deckel mit Pluspol"
Abbildung 6. 23: Vergleich der Spannungs-Dehnungs-Kurven LCA und LCB von optimiertem
Zellmodell und Ausgangsbasis der Zelle83
Abbildung 6. 24: Vergleich der Spannungs-Dehnungs-Kurve LCC von optimiertem Zellmodell
und Ausgangsbasis der Zelle
Abbildung 6. 25: Vergleich der Spannungs-Dehnungs-Kurve LCS von optimiertem Zellmodell und
Ausgangsbasis der Zelle

Abbildung 10. 1: Kraft-Weg-Verlauf bei der Versuchsanordnung "Crush in X-Richtung" 100 [%]
SOC96
Abbildung 10. 2: Spannungs-Weg-Verlauf bei der Versuchsanordnung "Crush in X-Richtung" 100
[%] SOC
Abbildung 10. 3: Kraft- und Spannungsverlauf mit Kurzschlussbereich bei der
Versuchsanordnung "Crush in X-Richtung" 100 [%] SOC97
Abbildung 10. 4: Kraft-Weg-Verlauf bei der Versuchsanordnung "Crush in Z-Richtung" 100 [%]
SOC
Abbildung 10. 5: Spannungs-Weg-Verlauf bei der Versuchsanordnung "Crush in Z-Richtung" 100
[%] SOC
Abbildung 10. 6: Kraft- und Spannungsverlauf mit Kurzschlussbereich bei der
Versuchsanordnung "Crush in Z-Richtung" 100 [%] SOC98
Abbildung 10. 7: Kraft-Weg-Verlauf bei der Versuchsanordnung "Crush Penetration" 100 [%]
SOC

Abbildung 10. 8: Spannungs-Weg-Verlauf bei der Versuchsanordnung "Crush Penetration" 100
[%] SOC
Abbildung 10. 9: Kraft- und Spannungsverlauf mit Kurzschlussbereich bei der
Versuchsanordnung "Crush Penetration" 100 [%] SOC 100
Abbildung 10. 10: Kraft-Weg-Verlauf bei der Versuchsanordnung "Crush 3 Punkt Biegung" 100
[%] SOC
Abbildung 10. 11: Spannungs-Weg-Verlauf bei der Versuchsanordnung "Crush 3 Punkt Biegung"
100 [%] SOC
Abbildung 10. 12: Kraft- und Spannungsverlauf mit Kurzschlussbereich bei der
Versuchsanordnung "Crush 3 Punkt Biegung" 100 [%] SOC

#### Tabellenverzeichnis

# Tabellenverzeichnis

Tabelle 1. 1: Übersicht einiger Akkumulatoren und deren Maximalwerte [4]         3
Tabelle 2. 1: Hazard Levels 0-7 nach EUCAR [17] 10
Tabelle 2. 2: Produktspezifikationen Panasonic CGR-18650KA [19]
Tabelle 2. 3: Vor- und Nachteile des Li-Ionen-Batteriesystems [22]13
Tabelle 2. 4: Relevante Inhaltsstoffe von Lithium-Ionen Zellen [26]       17
Tabelle 2. 5: Prüfmethoden mit den dazugehörigen Testkonfigurationen von Lithium-Ionen
Zellen [28]
Tabelle 3. 1: Werte zu der Spannungs-Dehnungs-Kurve "Deckel" [11]
Tabelle 4. 1: Anzahl der ausgewerteten Versuche je Testkonfiguration/Ladezustand
Tabelle 5. 1: Dauer der Simulationen bis zum Erreichen des Kurzschlusses
Tabelle 5. 2: Berechnungsdauer und Speicherbedarf in Abhängigkeit der Iterationsschritte 58
Tabelle 6. 1: Materialparameter gultig für gesamtheitliche Optimierungsergebnisse /
Materialparameter mit Fokus auf optimales Simulationsergebnis bei der Testkonfiguration
"Crush in Z-Richtung"
Tabelle 6. 2: Gegenüberstellung der Materialparameter von der Ausgangsbasis und dem
optimierten Zellmodell

## 1 **EINLEITUNG**

## 1.1 Motivation

Das stetig größer werdende Bewusstsein der Menschheit für die Umwelt führt dazu, dass die Reduktion des CO<sub>2</sub>-Ausstoßes in den Mittelpunkt der Automobilindustrie gerückt ist. Besonders durch den Drang der Politik zu mehr Umweltbewusstsein werden die Automobilhersteller dazu aufgerufen, ihren CO<sub>2</sub>-Flottenverbrauch stetig zu reduzieren. In Abbildung 1. 1 sind die CO<sub>2</sub>-Emissionen in [g/km] innerhalb der Europäischen Union für Benzin- und Diesel-PKW bis zum Jahr 2020 dargestellt. Demzufolge soll der CO<sub>2</sub>-Ausstoß für die gesamte Neuwagenflotte laut EU-Ziel bis 2012 auf 120 [g/km] und bis 2020 auf 95 [g/km] reduziert werden [2].



Abbildung 1. 1: CO2-Emissionen der Neuwagenflotte in der EU und Emissionsziel bis 2020 [2]

Um diesen Anforderungen der EU gerecht zu werden, setzen die Automobilhersteller vermehrt auf alternative Antriebskonzepte. Mit dem Einsatz von Elektrofahrzeugen lässt sich der CO<sub>2</sub>-Ausstoß einer Fahrzeugflotte maßgeblich beeinflussen, da laut der Europäischen Union Elektrofahrzeuge mit 0 [g] CO2 pro [km] in die Berechnung des gesamten Flottenverbrauchs eingehen [3]. Reine Elektrofahrzeuge beziehen ihre Energie häufig aus Lithium-Ionen-Akkus.

Der Grund für die Verwendung von Lithium-Ionen-Akkus ist jener, dass sie im Vergleich zu anderen Typen von Akkumulatoren eine sehr hohe Energiedichte und einen ebenfalls hohen spezifischen Energieinhalt aufweisen, wie in Tabelle 1. 1 [4] ersichtlich.

Тур	Energiedichte	Spezifische Energie
Bleiakkumulator	bis 100 [Wh/l]	Bis 50 [Wh/kg]
NiCd	Bis 60 [Wh/l]	Bis 55 [Wh/kg]
NiMH	Bis 240 [Wh/l]	Bis 80 [Wh/kg]
Li-Ionen	Bis 350 [Wh/l]	Bis 150 [Wh/kg]
Natrium-Schwefel	Bis 240 [Wh/l]	Bis 120 [Wh/kg]

Tabelle 1. 1: Übersicht einiger Akkumulatoren und deren Maximalwerte [4]

Aufgrund der hohen Energiedichte der Lithium-Ionen Akkumulatoren gehen von diesen Batterietypen auch Gefahrenquellen aus, speziell bei der Verwendung in Elektrofahrzeugen. Um in Zukunft besser auf die Fahrzeugsicherheit bei Elektrofahrzeugen eingehen zu können, soll in der vorliegenden Arbeit ein Simulationsmodell einer Lithium-Ionen Zelle generiert werden, wodurch sich mögliche Gefahrenquellen bereits früh in der Fahrzeugentwicklung erkennen lassen.

## 1.2 Aufgabenstellung und Ziel der Arbeit

Die Aufgabenstellung in der vorliegenden Diplomarbeit ist es, ein möglichst exaktes Simulationsmodell einer realen 18650 Lithium-Ionen Zelle zu erstellen, dass die mechanischen und elektrischen Eigenschaften bei Belastung in unterschiedlichen Raumrichtungen in ausreichender Genauigkeit widergibt. Modelle dienen der Abbildung des realen Verhaltens in Batteriesystemen, welche auf unterschiedlichen Rechnerplattformen mittels mathematischer Algorithmen genutzt werden können. Modelle können in weiterer Folge zur vollständigen Systemsimulation herangezogen werden. In der Literatur [5], [6], [7] gibt es hierfür unterschiedliche Modellansätze zur Batteriemodellierung, welche nachstehend beschrieben werden.

• Mehrdimensionale physikalisch-chemische Modelle:

Bei dieser Art der Batteriemodellierung stehen die Materialeigenschaften der Zelle im Vordergrund. Dabei wird versucht, die Materialien im Inneren der Zelle sowie deren mechanische Eigenschaften in verschiedenen Raumrichtungen möglichst genau nachzubilden. Nachteilig bei diesem Modellansatz sind die Gesamtkomplexität und der damit verbundene hohe Rechenaufwand, da durch die zahlreichen Parameter eine Vielzahl an Modellvariationen möglich ist. Auch der Einfluss der Temperatur auf das Materialverhalten kann bei diesen Ansätzen berücksichtigt werden, erhöht jedoch erneut sowohl den Rechenaufwand als auch die Parameterfindung für das Simulationsmodell.

## Elektrische Ersatzschaltungen

Hierbei wird das elektrische Verhalten der Zelle durch einfache Bauteile wie Spannungsquellen, Widerstände, Verbraucher und Ähnliches nachgebildet. Solche Modellansätze eignen sich beispielsweise zur Nachbildung der Batteriedynamik, zielen aber nicht auf die mechanischen Eigenschaften der Zelle ab. Sie dienen in Gesamtfahrzeugsimulationen in vereinfachter Weise zur schnellen Berechnung von elektrischen Schaltungen.

### • Mathematische Modellansätze

Dabei wird das Zellmodell durch mathematische Funktionen beschrieben. Mittels empirischer Erkenntnisse lassen sich Eingangs- und Ausgangsgrößen eines Batteriespeichers geeignet miteinander verknüpfen. Mathematische Modellansätze orientieren sich an nicht physikalischchemischen Funktionsprinzipien.

Damit eine Aussage über das mechanische Verhalten der 18650 Zelle getroffen werden kann, wurde der Ansatz des mehrdimensionalen, physikalisch-chemischen Materialmodells für die Simulation gewählt. Die Zelle selbst wurde im Speziellen als Finite Elemente Modell aufgebaut. Laut [8] hängen die elektrochemischen und mechanischen Eigenschaften der Lithium-Ionen Zelle sehr stark von den Wechselwirkungen auf makroskopischer und mikroskopischer Zellebene ab. Auf mikroskopischer Seite betrachtet sind die Reaktionen zwischen der Anode und der Kathode von großem Interesse. Es ist jedoch nicht praktikabel, alle Vorgänge auf dieser Zellebene zu modellieren. Ein derart detailliertes Simulationsmodell würde die Rechenzeit und den benötigten Speicherbedarf zu extrem hohen Werten verschieben. Für die Verformung der

Zelle ist somit der makroskopische Modellansatz ausreichend, da in erster Linie die Eigenschaften der gesamten Zelle betrachtet werden. Prinzipiell kann bei der Modellierung der Zelle zwischen drei Ebenen unterschieden werden [8]:

#### Mikroskopisches Zellmodell:

Dabei werden einzelne Teilchen bzw. Komponenten der Lithium-Ionen Zelle modelliert und in den Vordergrund gerückt. Dieser Ansatz eignet sich für Betrachtungen, wo die elektrochemischen Prozesse von Batteriezellen genauer untersucht werden.

### Mesoskopisches Zellmodell:

Dieser Modellansatz stellt eine Zwischenebene zwischen der mikroskopischen und der makroskopischen Ebene dar. Der Fokus liegt dabei auf der Betrachtung gesamter Bauteilgruppen und nicht wie in der mikroskopischen Ebene auf einzelner Teilchen bzw. Bauteile.

#### Makroskopisches Zellmodell:

Dabei werden Transportprozesse sowie mechanische Verformungen der gesamten Batteriezelle modelliert. Das makroskopische Zellmodell zielt auf die Eigenschaften des gesamten Simulationsmodells ab. Es eignet sich zur Finite-Elemente Simulation, da es einen Kompromiss zwischen Genauigkeit der Ergebnisse und benötigten Rechenaufwand darstellt.

Um den Übergang von der mikroskopischen Struktur auf die makroskopische Modellierungsebene zu ermöglichen, werden sogenannte RVE's definiert. RVE steht für Representative Volume Elemente und kennzeichnet ein homogenes Kontinuum, welches die wesentlichen Eigenschaften der Mikrostruktur wirkungsvoll repräsentiert [9]. Wird ein Simulationsmodell einer Zelle auf RVE's aufgebaut, so besitzt jedes benachbarte RVE die gleichen Eigenschaften. Somit können Verformungen auf makroskopischer Ebene simuliert werden, ohne dabei die einzelnen Prozesse auf der Mikroebene abbilden zu müssen. Ein RVE entspricht in der FE-Simulation der Maschenweite des FE-Netzes [10].

Damit die tatsächlich auftretenden Kräfte und mechanischen Beanspruchungen bekannt werden, wurden in einer vorangegangenen Diplomarbeit [11] Versuche mit realen Zellen

durchgeführt. Dabei wurden für unterschiedliche Testkonfigurationen die Verformungskraft über den Verformungsweg sowie die Spannung über den Verformungsweg ermittelt, beispielhaft dargestellt bei Belastung in axialer Richtung in Abbildung 1. 2. Der markierte Bereich im Diagramm weist auf den einsetzenden Spannungsabfall (Kurzschlussbereich) innerhalb Zelle hin.



Abbildung 1. 2: Kraft/Spannung über Verformungsweg bei Belastung in axialer Richtung [11]

Anhand dieser Grundlage wurde ein funktionsfähiges makroskopisches Simulationsmodell der 18650 Lithium-Ionen Zelle erstellt, dass den identischen Kraft-Weg-Verlauf aufweisen sollte, wie zuvor aus den Versuchen ermittelt. Es zeigte sich jedoch, dass die gewählten Materialeigenschaften den geforderten Kraft-Weg-Verlauf nur unzureichend genau erfüllten, wie in Abbildung 1. 3 dargestellt. Der gelb hinterlegte Bereich im Diagramm kennzeichnet wiederum den einsetzenden Spannungsabfall innerhalb der Zelle, wobei die Spannung über den Verformungsweg nicht in das Diagramm mitaufgenommen wurde.



Abbildung 1. 3: Vergleich von Versuch und Simulation aus der vorangegangenen Diplomarbeit [11]

Somit liegt das Ziel der Diplomarbeit darin, für das Simulationsmodell der 18650 Zelle ausreichend genaue Materialparameter zu finden, sodass die Kraft-Weg-Verläufe von Versuch und Simulation bis zum Beginn des einsetzenden Spannungsabfalls miteinander übereinstimmen. Weicht die Simulation vom Versuch ab, so muss sich der Kraft-Weg-Verlauf zumindest innerhalb eines zuvor definierten Toleranzbereiches befinden. Hierfür soll das bereits vorhandene Simulationsmodell durch geeignete Materialparameter-Optimierung validiert werden.

Die Aufgabenstellung lässt sich wie folgt untergliedern:

- Auswertung der vorhandenen Versuche zur Ermittlung des Toleranzbereiches f
  ür die Kraft-Weg-Verl
  äufe
- Ermittlung des eintretenden Spannungsabfalls (Kurzschlussbereich) bei den einzelnen Testkonfigurationen

Das Ziel erklärt sich wie folgt:

• Optimierung der Materialparameter und Modellaufbau, um ein valides Zellmodell für unterschiedliche Belastungszustände zu erhalten.

## 2 LITERATURSTUDIE

In diesem Abschnitt soll auf die verwendete 18650 Lithium-Ionen Zelle genauer eingegangen werden. Es soll Aufschluss darüber gegeben werden, wo dieser Zelltyp zum Einsatz kommt und welche technischen Aspekte mit dieser Technologie verbunden sind. Auch mögliche Gefahrenquellen der Lithium-Ionen Technologie sollen in diesem Kapitel näher betrachtet werden. Im Anschluss daran werden die Prüfmethoden von Lithium-Ionen Zellen beschrieben. Es soll zeigen, welche Prüfmethoden für die 18650 Zelle ausgewählt wurden und warum diese Testkonfigurationen für die Validierung des Simulationsmodells von Interesse sind. Im Anschluss daran werden Testkonfigurationen detailliert beschrieben und es soll gezeigt werden, welche Anforderungen sich daraus an das Simulationsmodell der Zelle ableiten lassen.

## 2.1 KTM Freeride E

Der untersuchte Zelltyp wird von der Firma KTM Motorrad AG [12] in der KTM Freeride E [13] eingesetzt, welches ein rein elektrisch betriebenes Fahrzeug in der Fahrzeugklasse L3e [14] der motorisierten Krafträder darstellt. In diesen Elektrofahrzeugen dienen Parallel- und Serienschaltungen von 18650 Lithium-Ionen Zellen als Energiespeichersysteme. In Abbildung 2. 1 ist die KTM Freeride E dargestellt.



Abbildung 2. 1: KTM Freeride E [13]

Ihre Energie schöpft die KTM Freeride E aus einem Batteriepaket in Verbindung mit einem Elektromotor, welches in Abbildung 2. 2 [15] dargestellt ist. Dieses sogenannte KTM Powerpack ist aus insgesamt 360 Lithium-Ionen Zellen aufgebaut, besitzt eine Spannung von 260 [V] und stellt eine elektrische Energiemenge von 2,6 [kWh] bereit.



Abbildung 2. 2: KTM Powerpack der Freeride E in Verbindung mit dem Elektromotor [15]

18650 Lithium-Ionen Zellen finden häufig im Unterhaltungselektroniksektor Verwendung, beispielsweise in Form von Akkus in Laptops, werden aber auch zur Speicherung größerer Energiemengen in Elektrofahrzeugen herangezogen. Durch Serien- und Parallelschaltungen lassen sich Spannungen von bis zu 400 [V] und Energiemengen von bis zu 30 [kWh] bereitstellen [16]. Bedingt durch diese physikalischen Eigenschaften gehen von Batteriepaketen bzw. von den einzelnen Lithium-Ionen Zellen Gefahrenquellen aus, die es im Betrieb von Elektrofahrzeugen zu vermeiden gilt. Damit die Gefahrenklassen von Batteriezellen quantifiziert werden können, wurden die sogenannten Gefährdungsklassen nach EUCAR (Hazard Levels) [17] definiert. Diese Hazard Levels (0-7) beschreiben die Reaktionen, die bei Zellen/Batterien auftreten können und geben Aufschluss darüber, welche Auswirkungen bei dem jeweiligen Level zu erwarten sind. In Tabelle 2. 1 sind die Hazard Levels sowie deren Effekte und Auswirkungen aufgelistet.

Gefährdungs-				
klasse	Beschreibung	Klassifizierungskriterien und Effekt		
(Hazard Level)				
0	Kein Effekt	kein Effekt, keine Funktionsbeeinträchtigung		
		kein Defekt, kein Leck, kein Abblasen, kein		
	Passive Sicherheitsvorrichtung	Feuer, keine Flammen, kein Bersten, keine		
1		Explosion, keine exothermen Reaktionen, kein		
I		Thermal Runaway. Zelle noch einsetzbar,		
	iost aus	Sicherungsvorrichtungen müssen repariert		
		werden		
		wie Gefährdungsklasse 1 aber die Zelle ist		
2 Defek	Defekt, Beschädigung	irreversibel geschädigt und muss ausgetauscht		
		werden		
	Lock Massavarlust a	kein Abblasen, kein Feuer, keine Flammen, kein		
3	Leck, Massevenust <	Bersten, keine Explosion, <50 % Gewichtsverlust		
50%		der Elektrolytlösung (Lösungsmittel + Leitsalz)		
	Abblason Massoverlust	kein Feuer, keine Flammen, keine Explosion,		
4	< 50%	>50% Gewichtsverlust der Elektrolytlösung		
		(Lösungsmittel + Leitsalz)		
5	Feuer oder Flammen	kein Bersten, keine Explosion (z. B. keine		
5	reuer oder Flammen	umherfliegende Teile)		
6 Devitor		keine Explosion, aber umherfliegende Teile der		
U	Dersten	aktiven Elektrodenmassen		
7	Explosion	Explosion (z. B. Zertrümmerung der Zelle)		

Tabelle 2. 1: Hazard Levels 0-7 nach EUCAR [17]

Um die Gefahrenpotentiale von Lithium-Ionen Zellen testen zu können, werden in der Praxis genormte und vordefinierte Versuche mit Batteriezellen durchgeführt, um ein Versagen der Zelle abbilden zu können. Dieses Simulationsmodell muss so aufgebaut sein, dass ein elektrisches Versagen der Zelle bei einem Unfall realitätsnah abgebildet werden kann. Somit können Speichersysteme oder auch einzelne Batteriezellen eines Elektrofahrzeuges bereits in

der Entwicklungsphase auf mögliche Gefahrenquellen hin untersucht werden, womit sich die Kosten in der Entwicklung senken. Durch detaillierte Simulationsmodelle kann der Automobilhersteller in einem ersten Schritt auf die Produktion von Prototypen verzichten, wodurch die Kosten für teure und aufwendige Prototypenversuche reduziert werden.

## 2.2 Panasonic CGR-18650KA

Der Zelltyp, welcher in der KTM Freeride E zum Einsatz kommt, liefert die Firma Panasonic. Die genaue Typenbezeichnung lautet "Panasonic CGR-18650KA". In Abbildung 2. 3 [18] ist die Zelle dargestellt und in Tabelle 2. 2 sind die wichtigsten produktspezifischen Parameter [19] aufgelistet.



Abbildung 2. 3: Panasonic CGR-18650KA [18]

Nennspannung [V]	3,6
Nennkapazität, min. [mAh]	1650
Nennkapazität, typisch [mAh]	1750
Außendurchmesser, max. [mm]	18,6
Gesamthöhe, max. [mm]	65,2
Gewicht [g]	43,5

Tabelle 2. 2: Produktspezifikationen Panasonic CGR-18650KA [19]

Lithium-Ionen Zellen bestehen grundlegend aus einer Anode und einer Kathode, dazwischen befinden sich der ionenleitfähige Elektrolyt sowie ein Separator, der die Elektronen voneinander isoliert. Als Elektrolyt kommt bei der betrachteten Zelle Hexafluorophosphat-Salz (LiPF<sub>6</sub>) zum Einsatz, welches für die Li-Ionen durchlässig ist. Auf der Kathodenseite kommt Aluminium als Elektrodenmaterial zum Einsatz, die Kathode selbst besteht aus Oxiden wie

beispielsweise Kobaltoxid (CoO<sub>2</sub>), Nickeloxid (NiO<sub>2</sub>) oder Manganoxid (MnO<sub>2</sub>). Bei der verwendeten Zelle baut die Kathode auf einer Kombination aus drei Oxiden auf, dem sogenannten "Drittelmaterial Li(Ni<sub>1/3</sub>Mn<sub>1/3</sub>Co<sub>1/3</sub>)O<sub>2</sub>" [20]. Die Anodenelektrode ist aus stromableitenden Kupfer aufgebaut, wobei die Anode selbst aus Kohlenstoff in Form von Graphit (C) besteht. Um das Anodenmaterial vor dem Elektrolyten zu schützen, ist die Bildung einer Schutzschicht nötig, welche als SEI (Solid Electrolyte Interphase) bezeichnet wird. Dieser Film entsteht bei der Produktion der Zellen durch die chemische Reaktion des Kohlenstoffes mit dem Lithium [16]. In Abbildung 2. 4 [21] ist der grundlegende Aufbau einer 18650 Lithium-Ionen Zelle dargestellt.



Abbildung 2. 4: Aufbau einer 18650Lithium-Ionen Zelle [21]

Lithium-Ionen Zellen besitzen bestimmte Vor- und Nachteile gegenüber Batteriesystemen mit anderen elektrochemischen Speichertechnologien, wie beispielsweise Nickel-Metallhydrid (NiMH) oder Nickel-Kadmium (NiCd). Tabelle 2. 3 ist inhaltlich aus [22] entnommen und beschreibt die Vor- und Nachteile der Lithium-Ionen Technologie.

Vorteile	Nachteile
Hohe Energie- und Leistungsdichte	Ladeüberwachung notwendig
Hohe Zellspannung (bis 3,7 V pro Zelle)	Elektronische Überwachung beim Betrieb erforderlich
Gute Energiewirkungsgrade (>90%)	Schlechtes Ladeverhalten bei niedrigen Temperaturen
Großes Entwicklungspotential	Hoher Preis

Tabelle 2. 3: Vor- und Nachteile des Li-Ionen-Batteriesystems [22]

Die Panasonic CGR-18650KA baut auf der sogenannten PSS-Technologie (Panasonic Solid Solution) auf, welche ein durch Panasonic geschütztes Herstellungsverfahren bezeichnet. Dabei soll dieses Verfahren eine Kombination von maximaler Kapazität auf der einen Seite und ein Höchstmaß an Sicherheit auf der anderen Seite bilden. Ziel der PSS-Technologie war es, den hohen Sicherheitsstandart der Mangan-basierenden (LiMn<sub>2</sub>O<sub>4</sub>) Lithium-Ionen Batterie mit der hohen Speicherkapazität der Kobalt-basierenden Lithium-Ionen Batterie zu verbinden. In Abbildung 2. 5 ist der Zusammenhang der PSS-Technologie dargestellt. Durch Kombination der LiMn<sub>2</sub>O<sub>4</sub> Lithium-Ionen Batterie (linker Kreis in der Abbildung) gepaart mit der Standard Lithium-Ionen Zelle PEC (Panasonic Energy Company; unterer Kreis in der Abbildung) ergibt sich eine neuartige Zelltechnologie, die die Vorteile beider Zellen miteinander verbindet.



Abbildung 2. 5: Zusammenhang der PSS-Technologie [19]

## 2.3 Lithium-Ionen-Technologie

Dieses Teilkapitel ist inhaltlich aus [17] und [23] entnommen und beschreibt die Funktionsweise und den Aufbau einer Lithium-Ionen Zelle. Die chemischen Vorgänge beim Lade- und den Entladevorgang einer Lithium-Ionen Zelle sind in Abbildung 2. 6 dargestellt.



Abbildung 2. 6: Chemische Vorgänge in einer Lithium-Ionen-Zelle [24]

Prinzipiell besteht eine Zelle aus folgenden Komponenten [25]:

- einer positiv geladenen Elektrode, der Kathode: bestehend aus Lithium und einem Metalloxid (Kobaltoxid CoO<sub>2</sub>, Manganoxid MnO<sub>2</sub> oder Nickeloxid NiO<sub>2</sub>), welches die äußere Elektrode bildet
- einem Elektrolyten: Lithiumsalz (z.B. LiPF<sub>6</sub>) gelöst in einem organischem Lösungsmittel
- einem Separator: für Li-Ionen durchlässig
- einer negativ geladenen Elektrode, der Anode: eine Metallelektrode, die mit Graphit (C) belegt ist

Beim Lade- und Entladevorgang wandern einzelne Ionen zwischen den Elektroden hin und her und lagern sich in das Aktivmaterial ein. Beim Entladen wandern die Lithium-Ionen von der negativ geladenen Elektrode durch den Elektrolyten und den Separator hindurch zu der positiv

geladenen Elektrode. Gleichzeitig fließen die Elektronen von der negativen Elektrode über eine elektrische Verbindung zu der positiven Elektrode. Über diese elektrische Verbindung kann somit der Strom fließen. Der Entladeprozess ist in Formel 2.1 beschrieben.

Entladen: 
$$Li_{1-x}CoO_2 + Li_xC \rightarrow Li_{1-x+dx}CoO_2 + Li_{x-dx}C$$
 Formel 2.1

Beim Ladevorgang wird dieser Prozess umgekehrt und die Lithium-Ionen fließen von der positiv geladenen Elektrode hindurch zu der negativ geladenen Elektrode. Formel 2.2 beschreibt den Ladevorgang einer Batterie mit einer Lithium-Kobalt-Dioxid-Kathode (LiCoO<sub>2</sub>).

Laden: 
$$LiCoO_2 + C \rightarrow Li_{1-x}CoO_2 + Li_xC$$
 Formel 2.2

## 2.4 Gefahrenquellen bei Lithium-Ionen Batterien

Dieses Teilkapitel soll über mögliche Gefahrenquellen bei Lithium-Ionen Zellen informieren und ist inhaltlich aus [16], [23] und [26] entnommen. Aufgrund ihrer hohen Energiedichte werden Lithium-Ionen Batterien in immer mehr Anwendungen eingesetzt, beginnend bei kleinen Baugrößen wie Akkumulatoren für Laptops bis hin zu großen Anwendungen wie Speichersysteme für Elektrofahrzeuge, beispielsweise beim Tesla Model S [27]. Diese Speichersysteme können beispielsweise aus Standardzellen der Baugröße 18650 oder 26650 aufgebaut sein. Bei größerem Speicherbedarf kommen Serien- und Parallelschaltungen dieser Zellen zum Einsatz. Mit der Forderung nach immer mehr elektrischer Leistung bei Elektrofahrzeugen steigt jedoch auch die Spannung im Bordnetzsystem an. Reine Elektrofahrzeuge werden derzeit mit Spannungen von bis zu 800 [V] betrieben [26]. Derart hohe Bordspannungen stellen ein hohes Gefahrenpotential bei einem Verkehrsunfall dar. Wird beispielsweise eine Zelle bei einem Unfall durch eine mechanische Belastung beschädigt, kann dies zu einer Kurzschlussreaktion innerhalb der Zelle führen, welche eine mögliche Entzündung des Speichersystems nach sich ziehen könnte. Weiter kann eine hohe thermische Belastung zum Versagen der Zelle führen. Besonders kritisch ist in diesem Zusammenhang der sogenannte "Thermal Runaway", d.h., dass die Zelle immer mehr frei werdende Energie erzeugt. Steigt die Temperatur in der Zelle unkontrolliert an, reagiert das Graphit mit den eingelagerten Li-Ionen.

Erwärmt sich die Zelle auf über 100 [°C], so schmilzt zunächst der Separator, was folglich zu einem Kurzschluss im inneren der Zelle führt. Kann die dabei entstehende Wärme, durch äußere Kühlung nicht mehr abgeführt werden, steigt die Temperatur weiter an und ab etwa 200 [°C] beginnt auch das Kathodenmaterial zu reagieren. Durch die Temperaturerhöhung steigt der Druck in der Zelle und es besteht die Möglichkeit, dass die Zelle zum Ausgasen gebracht wird. Beim Ausgasen treten fortlaufend schädliche und giftige Substanzen aus der Zelle aus. Es zeigt sich somit, dass bei Beschädigung von Lithium-Ionen Zellen unterschiedliche Gefahren hervorgerufen werden können.

Nachstehend wird auf die einzelnen Gefahrenpotentiale für Lithium-Ionen Batterien genauer eingegangen, welche sich wie folgt unterteilen lassen [26] (wörtlich):

- Gefahr durch elektrische Spannung
- Gefahr durch elektrischen Strom
- Gefahr durch austretende Inhaltsstoffe
- Gefahr durch Feuer und/oder Explosion

### Gefahr durch elektrische Spannung:

Die derzeitigen Speichersysteme in Fahrzeugen weisen Spannungen von 100 [V] bis 800 [V] [26] auf und können bei Berührung einen für den Menschen tödlichen elektrischen Schlag verursachen. Die Gefahr geht dabei meist von der elektrischen Spannung aus, welche zusammen mit dem Widerstand des menschlichen Körpers den elektrischen Strom ergibt. Je nach Art und Größe der Spannung können dabei unterschiedlich hohe Stromstärken zu tödlichen Verletzungsfolgen beim menschlichen Körper führen. Daher sind Schutzmaßnahmen wie Berührungsschutz und die Einhaltung eines Isolationswiederstandes von oberster Priorität.

#### Gefahr durch elektrischen Strom:

Bei Leitungsunterbrechung besteht die Gefahr, dass es zu der Bildung eines Lichtbogens kommen kann. Durch die dabei örtlich auftretenden Temperaturen von mehr als 2000 [°C] [26] können die Steckverbindungen zu schmelzen beginnen oder sich unter Umständen sogar entzünden. Auch eine Überlastung bzw. ein Kurzschluss im System durch einen Unfall führen schnell zu einer Überhitzung und können in weiterer Folge zum Brand des Fahrzeugs

16

beziehungsweise des Energiespeichers führen. Ein besonderes Augenmerk gilt daher der gesamten leistungsführenden Verkabelung inklusive deren Steckverbindungen.

## Gefahr durch austretende Inhaltsstoffe:

Eine Lithium-Ionen Zelle ist grundsätzlich gas dicht aufgebaut, sodass bei regulärer Handhabung keine Inhaltsstoffe austreten können. Kommt es zu einem Defekt, so kann das Gehäuse der Lithium-Ionen Zelle durch mechanische Belastungen beschädigt werden und es können giftige Inhaltstoffe in gasförmiger oder flüssiger Form austreten. Tabelle 2. 4 [26] gibt Aufschluss darüber, welche Inhaltsstoffe sich in einer Lithium-Ionen Zelle befinden.

Cubatan-	Abkürzung Flammpunkt [°C]	Flammaunkt [°C]	Siedepunkt	Zündtemperatur
Substanz		[°C]	[°C]	
Dimethylcarbonat	DMC	16	90	465
Ethylencarbonat	EC	150	250	465
Propylencarbonat	PC	135	240	510
Polyelthylen	PE	-	-	-
Graphit	С	-	-	600

Tabelle 2. 4: Relevante Inhaltsstoffe von Lithium-Ionen Zellen [26]

In flüssiger Form kann der Elektrolyt der Zelle, bestehend aus einer Mischung von Carbonaten (DMC, EC, PC) und dem Leitsalz LiPF<sub>6</sub>, austreten. Dieses Leitsalz bildet zusammen mit Feuchtigkeit Flusssäure, welche hoch giftig für den Menschen ist und auch die Atemwege stark reizt. Gasförmig tritt hauptsächlich verdampfter Elektrolyt aus. Vor allem Dimethylcarbonat bildet in Verbindung mit Luft ein explosives Gemisch. Des Weiteren können durch die Zersetzung des Elektrolyten Gase wie Methan (CH<sub>4</sub>), Ethan (C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>), und Propan (C<sub>3</sub>H<sub>8</sub>) austreten.

#### Gefahr durch Feuer und/oder Explosion:

Die in der Zelle verbauten verwendeten Materialien sind teilweise brennbar und leicht entzündlich, wie aus Tabelle 2. 4 ersichtlich ist. Besonders das im Elektrolyt befindliche DMC besitzt einen niedrigen Flammpunkt bei 16 [°C] und ist somit leicht entzündlich. Einige Kathodenmaterialien besitzen zudem die Eigenschaft, dass sie bei hohen Temperaturen spontan zerfallen und somit eine exotherme Reaktion auslösen. Bei dieser Reaktion wird

zusätzlich Sauerstoff und Wärme freigesetzt, welche dann zur Beschleunigung der anderen Reaktionsabläufe beiträgt. Die hohen Temperaturen innerhalb der Zelle lassen sich auf folgende Ursachen zurückführen:

- Starke äußere Erwärmung (z.B. Feuer)
- Äußerer Kurzschluss
- Innerer Kurzschluss (z.B. durch einen Unfall)
- Überentladung und Überladung der Zelle

## 2.5 Prüfmethoden von Lithium-Ionen Zellen

Um eine 18650 Lithium-Ionen Zelle auf deren mechanischen Eigenschaften hin zu untersuchen, stehen in der Literatur zahlreiche Normen und Standards zur Verfügung, die auf die Prüfmethoden zur Sicherheit von Lithium-Ionen Zellen näher eingehen. Dabei beschreibt die überwiegende Anzahl an Standards die Sicherheitsanforderungen für Lithium-Ionen Zellen in Form von Testspezifikationen mit Einwirkung und daraus resultierende Auswirkung. Tabelle 2. 5 zeigt eine Einteilung der Prüfmethoden für Lithium-Ionen Zellen und wurde aus der Norm UL 1642 [28] entnommen. Diese Art von Prüfmethoden lassen sich in dieser oder sehr ähnlicher Form auch in anderen Standards und Normen wiederfinden.

Mechanical Tests	Electrical Tests	Environmental Tests	Fire Explosure Test
Crush	Short-Circuit	Heating	Projectile
Impact	Abnormal Charging	Temperature Cycling	
Shock	Forced-Discharge	Low Pressure	
Vibration			

Tabelle 2. 5: Prüfmethoden mit den dazugehörigen Testkonfigurationen von Lithium-Ionen Zellen [28]

Die Prüfmethoden für Batteriezellen lassen sich in die vier Hauptgruppen Mechanical Tests, Electrical Tests, Environmental Tests und Fire Explosure Test einteilen, wobei jeder dieser Hauptgruppen verschiedene Testkonfigurationen zugeordnet werden können. Im Hinblick auf die Optimierung der mechanischen Eigenschaften des Simulationsmodells der Zelle sind vor

allem die Mechanical Tests von Interesse. Laut der Norm UL 1642 sind die Testkonfigurationen der Mechanical Tests wie folgt definiert:

## • Crush in radialer Richtung

Eine Batteriezelle wird in radialer Richtung zwischen zwei parallelen flachen Platten solange belastet, bis die aufzubringende Kraft einen bestimmten Maximalwert erreicht. Im Anschluss wird die Zelle wieder entlastet. Durch die dabei ermittelten Werte für Verformungskraft und Verformungsweg lassen sich Schlussfolgerungen über das Materialverhalten der Batteriezelle treffen.

## • Crush in Richtung der Längsachse

Eine zylindrische oder prismatische Batteriezelle wird in Richtung ihrer Längsachse, also in axialer Richtung, zwischen zwei parallelen Platten gestaucht. Auch diese Testkonfiguration liefert Rückschlüsse zu den Materialeigenschaften der Lithium-Ionen Zelle.

Impact Test

Eine zylindrische oder prismatische Batteriezelle liegt parallel zu ihrer Längsachse auf einer ebenen Platte auf. Durch einen herabfallenden Körper aus einer vordefinierten Höhe und mit einer bestimmten Masse wird die Zelle mittig penetriert. Diese Testkonfiguration soll eine möglichst hohe lokale Deformation der Zelle hervorrufen.

### Shock Test

Dabei wird die Zelle insgesamt drei Stößen von gleicher Größe ausgesetzt. Die Beschleunigung, die die Zelle dabei erfährt, soll in den ersten 3 [ms] im Mittel 75 [g] betragen und die Maximalbeschleunigung soll zwischen 125 und 175 [g] liegen. Hohe Beschleunigungen lassen jedoch keine Rückschlüsse auf das mechanische Verhalten der Zelle zu, sofern die Zelle selbst dadurch nicht beschädigt wird. Deshalb spielt diese Testkonfiguration für die Materialparameteroptimierung eine untergeordnete Rolle und kommt auch in der Arbeit nicht zum Einsatz.

• Vibration Test

Eine Batteriezelle wird einer harmonischen Schwingung mit einer festgelegten Amplitude ausgesetzt, wobei die Frequenz zwischen 10 [Hz] und 55 [Hz] variiert. Auch diese Testkonfiguration lässt keine Rückschlüsse auf das mechanische Deformationsverhalten der Zelle zu und wird deshalb nicht weiter berücksichtigt.

Somit konnten aus der Norm bereits drei aussagefähige Testkonfigurationen gefunden werden, die Rückschlüsse auf das mechanische Verhalten der Zelle ermöglichen und die für die Optimierung der Zelle betreffend ihrer Materialparameter von großem Interesse sind.

## 2.6 Prüfmethoden aus der Fachliteratur

Eine zusätzliche Prüfmethode, um die mechanischen Eigenschaften einer Lithium-Ionen Zelle zu untersuchen, konnte zudem in der einschlägigen Fachliteratur ([29], [30]) gefunden werden. Dabei handelt es sich um die Testkonfiguration "3-Punkt-Biegung", welche ebenfalls in Veröffentlichungen von Greve [31] und Sahraei [32] besonders hervorgehoben wird. Bei dieser Testkonfiguration liegt eine zylindrische Zelle auf zwei ebenfalls zylindrischen Auflagern auf und wird durch einen zylindrischen starren Prüfkörper mittig belastet. Dabei erfährt die Zelle zum einen eine globale Belastung infolge der Biegung, zum anderen wirkt eine lokale Belastung auf die Zelle, welche durch den eindringenden Körper nachgestellt wird. Diese Kombination von lokaler und globaler Belastung kann wertvolle Informationen zu den mechanischen Eigenschaften der Zelle liefern und kommt deshalb als Testkonfiguration für die Lithium-Ionen Zelle zum Tragen. In Abbildung 2. 7 ist diese Testkonfiguration abgebildet.



Abbildung 2. 7: 3-Punkt-Biegung nach Sahraei [32]

## 2.7 Prüfmethoden zur Optimierung des Simulationsmodells

Das Hauptaugenmerk in dieser Diplomarbeit liegt auf dem Finden von Materialparametern für ein bereits vorhandenes Simulationsmodell einer 18650 Lithium-Ionen Zelle, um valide und prognosefähige Aussagen treffen zu können. An dieser Stelle werden Lastfälle gezeigt, die zur Validierung des Simulationsmodells herangezogen wurden. Mit Hilfe der Versuchsdaten können Rückschlüsse auf die mechanischen Eigenschaften der Batteriezelle gezogen werden. Der sogenannte "Crush in X-Richtung" sowie der "Crush in Z-Richtung" leiten sich aus der UL 1642 dienen zur Validierung des Simulationsmodells ab und bezüglich der Materialeigenschaften der Zelle in radialer und axialer Richtung. Die Testkonfigurationen "Penetration" und "3-Punkt-Biegung" spiegeln einerseits nur lokale Belastungen und andererseits lokale und globale Belastungen wieder. Auch bei diesen beiden Lastfällen gilt es, die Materialparameter des Simulationsmodells auf die mechanischen Eigenschaften der 18650 Zelle abzustimmen.

### 2.7.1 Crush in X-Richtung

Bei der Versuchsanordnung "Crush in X-Richtung" wird die Zelle zwischen zwei flachen, parallelen Platten eingespannt und in radialer Richtung deformiert. Diese Testkonfiguration verursacht eine gleichmäßige Belastung der Zelle entlang ihrer Längsachse. Anhand dieser Testkonfiguration sollen passende Materialen für das Simulationsmodell der Zelle gefunden werden, die die Richtungsabhängigkeit des Werkstoffes bei Belastung in radialer Richtung ausreichend genau abbilden. In Abbildung 2. 8 ist der "Crush in X-Richtung" dargestellt.



Abbildung 2. 8: Schematische Darstellung der Versuchsanordnung "Crush in X-Richtung"

### 2.7.2 Crush in Z-Richtung

Bei dieser Testkonfiguration, auch als "Crush in Z-Richtung" bezeichnet, wird die Zelle in axialer Richtung zwischen zwei flachen, parallelen Platten zusammengepresst, dargestellt in Abbildung 2. 9. Eine Stauchung der gesamten Zelle lässt Rückschlüsse auf die mechanischen Eigenschaften in axialer Richtung zu. Damit im Simulationsmodell hinreichend genaue Materialparameter zugeordnet werden können, dient diese Testkonfiguration als Validierungsgrundlage. Auch die Richtungsabhängigkeit der Materialen in der Simulation, betreffend den Belastungen in unterschiedliche Raumrichtungen, gilt es beim "Crush in Z-Richtung" zu berücksichtigen.



Abbildung 2. 9: Schematische Darstellung der Versuchsanordnung "Crush in Z-Richtung"

## 2.7.3 Crush Penetration

Abbildung 2. 10 zeigt die Versuchsanordnung "Crush Penetration", welcher dem "Impact Test" aus der Norm UL 1642 nachempfunden ist. Die Zelle wird hierfür auf einem ebenen Untergrund aufgelegt. Anschließend dringt ein starrer Körper mit zylindrischem Querschnitt in die Zelle ein und deformiert diese. Anhand dieser Testkonfiguration soll ein Eindringen eines starren Körpers bei einem Unfall nachgestellt werden.
Literaturstudie



Abbildung 2. 10: Schematische Darstellung der Versuchsanordnung "Crush Penetration"

## 2.7.4 Crush 3-Punkt-Biegung

Bei der Versuchsanordnung "Crush 3-Punkt-Biegung" wirken laut [32] zwei Belastungsarten gleichzeitig auf die zu prüfende Zelle. Zum einen erfährt die Zelle eine globale Belastung infolge der Biegung, zum anderen wirkt eine lokale Belastung auf die Zelle, welche durch den eindringenden Körper nachgestellt wird. Der Versuchsaufbau dieser Testkonfiguration ist in Abbildung 2. 11 schematisch dargestellt. Dabei liegt die Zelle auf zwei zylindrischen starren Auflagern auf und wird durch einen ebenfalls zylindrischen starren Prüfkörper mittig belastet.



Abbildung 2. 11: Schematische Darstellung der Versuchsanordnung "Crush 3 Punkt Biegung"

# 3 VORHANDENES SIMULATIONSMODELL

Dieses Kapitel soll zeigen, wie das vorhandene Simulationsmodell der Zelle aufgebaut ist, welche einzelnen Komponenten sich im Zellmodell befinden und welche Materialparameter den Komponenten zugeordnet wurden.

## 3.1 Ausgewählter Finite Elemente-Solver für die Simulation

Die Realisierung des Simulationsmodells der Zelle fand mit Hilfe des FE-Solver LS-DYNA statt. Laut Hersteller [33] ist dieser Solver besonders gut geeignet für Crashtest-Simulationen und andere hochdynamische und nicht-lineare Problemstellungen. Dazu zählen unter anderem Simulationen von Airbags, von Sicherheitsgurten oder auch Insassensimulationen. Aufgrund des verwendeten expliziten Rechenalgorithmus und der großen Anzahl an produktspezifischer Problemlösungen findet dieser FE-Solver in der Automobilindustrie häufig Verwendung.

## 3.1.1 Element-Typen im LS-DYNA

Damit ein Simulationsmodell im LS-DYNA erstellt werden kann, muss zuvor ein vordefinierter Element-Typ ausgewählt werden, welcher dann dem Bauteil zugeordnet wird. Für das vorhandene FE-Modell der Zelle wurden zwei unterschiedliche Element-Typen ausgewählt [34]:

- Element-Typ "Shell"
- Element-Typ "Solid"

Diese beiden Element-Typen unterscheiden sich darin, dass ein Shell-Element aus mindestens drei Knoten aufgebaut ist und somit eine Fläche (auch Schale genannt) repräsentiert, ein Solid-Element hingegen aus mindestens fünf Knoten besteht und ein Volumen-Element darstellt. Shell-Elemente besitzen eine geringe Wandstärke im Vergleich zu ihrer Längenausdehnung und eignen sich daher besser für die Modellierung von dünnwandigen Bauteilen. Bei dem vorliegenden Simulationsmodell der Zelle wurde ein Verhältnis von Wandstärke zu Länge von 0,1 angenommen.

## 3.1.2 Kontaktbedingungen

Um die mechanischen Eigenschaften der FE-Zelle mit dem mathematischen Rechenmodell des Simulationsprogramms zu koppeln, bedarf es definierter Kontaktbedingungen. Erst dadurch lassen sich Bauteile, die einer mechanischen Belastung ausgesetzt sind und zueinander in Kontakt stehen, berechnen. Im LS-DYNA findet sich hierfür eine Reihe von vordefinierter Kontaktmodelle, welche ein realistisches Bauteilverhalten ermöglichen. Im Simulationsmodell sind folgende zwei Kontaktbedingungen definiert, die aus dem LS-DYNA Benutzerhandbuch Vol. 1 [34] entnommen wurden:

- CONTACT\_AUTOMATIC\_SURFACE\_TO\_SURFACE
- CONTACT\_AUTOMATIC\_SINGLE\_SURFACE

Bei der Kontaktbedingung "CONTACT\_AUTOMATIC\_SURFACE\_TO\_SURFACE" handelt es sich um einen Kontakt zwischen sich gegenseitig berührenden, unterschiedlichen Bauteilen.

Die Bedingung "CONTACT\_AUTOMATIC\_SINGLE\_SURFACE" stellt einen sogenannten "Selbstkontakt" dar, das den Kontakt einzelner Elemente in ein und demselben Bauteil untereinander abbildet. Abbildung 3. 1 zeigt exemplarisch einen Selbstkontakt der FE-Zelle.

*C0	NTACT_AUTO	MATIC_SING	LE_SURFACE	E_ID				
	2Selfcontact_Mantel							
ş	.>1	.>2	.>3	>4	>5	>6	>7.	
Ş	SSID		SSTYP		SBOX		SPR	
	1		2		0		0	
Ş	FS	FD	DC	VC	VDC	PENCHK	BT	DT
	.2	.1	.001	0	0	0	0	0
Ş	SFS		SST		SFST		FSF	VSF
	1		1		1		1	1

Abbildung 3. 1: Selbstkontakt der FE-Zelle

Dabei sind besonders die Parameter FS, FD und DC von Bedeutung:

- FS: Statischer Reibungskoeffizient
- FD: Dynamischer Reibungskoeffizient
- *DC:* Exponentieller Abklingkoeffizient, der den Übergang von dynamischer auf statische Reibung bei abnehmender Relativgeschwindigkeit beschreibt.

Damit lässt sich das Reibungsverhalten in den Kontaktflächen definieren. Formel 3.1 zeigt, wie die drei Parameter in Beziehung zueinander stehen und wurde aus dem LS-DYNA Benutzerhandbuch Vol. 1 [34] entnommen:

$$\mu_{c} = FD + (FS - FD)^{-DC*|v_{rel}|}$$
Formel 3.1

## 3.2 Aufbau des Simulationsmodells

Der Aufbau des vereinfachten Simulationsmodells der 18650 Lithium-Ionen Zelle ist in Abbildung 3. 2 dargestellt.



Abbildung 3. 2: Aufbau und Komponenten des Simulationsmodells der 18650 Lithium-Ionen Zelle

Wie bereits eingangs erwähnt, konnte für die Optimierung auf ein bereits vollständig vorhandenes Modell zurückgegriffen werden. In Kapitel 1.2 wurde darauf hingewiesen, dass das Hauptaugenmerk dieser Arbeit auf der Optimierung von Materialparametern liegt, damit der Kraftverlauf über den Verformungsweg einer 18650 Lithium-Ionen Zelle bis zum Eintreten des beginnenden Spannungsabfalls in der Simulation nachgestellt werden kann. Die Integration

der Zelle in eine Gesamtfahrzeugsimulation, die benötigte Rechenzeit als auch die maximale Finite Elemente Anzahl der Zelle weisen auf die Anforderungen an das Simulationsmodell hin, weshalb ein Modell erstellt wurde, welches aus insgesamt sechs Bauteilen aufgebaut ist. Zusammenfassend sollen in den folgenden Teilkapiteln die einzelnen Bauteile erläutert und die dazu gehörigen Materialparameter, die den Ausgang der Optimierung darstellten kurz erklärt werden.

## 3.2.1 Komponente "Boden"

Der Boden des Zellmodells besteht aus Elementen vom Typ Shell. Ihm wurde ein Materialverhalten zugeordnet, dass dem eines unlegierten Baustahles entspricht. Die wichtigsten Materialparameter sind nachstehend angegeben.

- Dichte ρ: 7890 [kg/m<sup>3</sup>]
- Elastizitätsmodul E: 210000 [N/mm<sup>2</sup>]
- Querdehnungszahl: 0,33 [-]
- Streckgrenze: 285 [N/mm<sup>2</sup>]
- Dicke von Boden: 0,35 [mm]

Dem Boden wurde die Materialkarte "MAT\_PIECEWISE\_LINEAR\_PLASTICITY" zugewiesen, welche ein elastisch-plastisches Werkstoffverhalten besitzt. Dem elastischen Bereich, welcher durch den Elastizitätsmodul charakterisiert wird, folgt ein Bereich plastischer Verformung. Der Elastische Bereich wird durch den E-Modul charakterisiert. Dem Materialmodell wird eine gewünschte plastische Charakteristik durch die Angabe von Spannung  $\sigma$  zu Dehnung  $\varepsilon$ , wie sie in Abbildung 3. 3 ersichtlich ist, zugewiesen. Eine Spannungs-Dehnungs-Kurve mit den dazugehörigen Werten wurde bereits in einer vorangegangenen Diplomarbeit [11] experimentell mittels Versuchen ermittelt und ist im Simulationsmodell als sogenannte Load Curve for defining effective stress versus effective plastic strain (LCSS) hinterlegt.



Spannungs-Dehnungs-Kurve "Boden"

Abbildung 3. 3: Spannungs-Dehnungs-Kurve LCSS im plastischen Bereich der Komponente "Boden" [11]

## 3.2.2 Komponente "Mantel"

Der Mantel des Simulationsmodells der Zelle ist gleichfalls wie der Boden aus Shell-Elementen aufgebaut. Auch diesem Bauteil wurde die Materialkarte MAT\_PIECEWISE\_LINEAR\_PLASTICITY zugewiesen.

## 3.2.3 Komponente "Polkappe"

Die 18650 Lithium-Ionen Zelle besitzt im Bereich der Kathode einen Aufbau aus einer mittig angeordneten Gummidichtung, einer Dichtung entlang des Umfangs sowie einen positiven Ableiter, dargestellt in Abbildung 3. 4. Durch das Aufeinandertreffen der unterschiedlichen Materialien ergeben sich kleine Hohlräume, speziell im Übergangsbereich zwischen dem positiven Pol und dem inneren Aufbau der Zelle. Diese Zwischenräume sind der Grund dafür, dass es bei der Testkonfiguration "Crush in Z-Richtung" zu einem konstanten Kraftniveau zwischen 1,8 und 2,6 [mm] entlang des Verformungsweges kommt.



Abbildung 3. 4: Detailansicht des Aufbaus auf der Kathodenseite einer 18650 Lithium-Ionen Zelle [21]

Aufgrund der Anzahl an unterschiedlich verbauten Materialien und den damit verbundenen unterschiedlichen Werkstoffeigenschaften in diesem Bereich der 18650 Zelle, wurde der Polkappe des Simulationsmodells wiederrum die Materialkarte MAT\_PIECEWISE\_LINEAR\_PLASTICITY zugewiesen, welche sich jedoch im Bereich der plastischen Verformung von jener des Mantels unterscheidet. Der plastische Bereich wird nicht durch eine Spannungs-Dehnungs-Kurve definiert, sondern vereinfacht durch die Angabe der Steigung einer Geraden im plastischen Bereich (Etan). In Abbildung 3. 5 und Abbildung 3. 6 sind die unterschiedlichen Spannungs-Dehnungs-Diagramme für den Mantel und der Polkappe dargestellt.



Abbildung 3. 5: Spannungs-Dehnungs-Diagramm des Mantels mit Kurve für den plastischen Bereich



Abbildung 3. 6: Spannungs-Dehnungs-Diagramm der Polkappe mit Angabe von Etan im plastischen Bereich

## 3.2.4 Komponente "Deckel"

Dem Deckel des Simulationsmodells wurde die Materialkarte MAT\_PIECEWISE\_LINEAR\_PLASTICITY zugewiesen, wie auch bereits bei den beiden Komponenten Boden und Mantel. Damit bei der Testkonfiguration "Crush in Z-Richtung" das Kraftniveau der 18650 Zelle nachgestellt werden kann, wurde dem Deckel eine höhere plastische Steifigkeit zugeordnet, wie in Abbildung 3. 7 ersichtlich. Die Werte zu der Spannungs-Dehnungs-Kurve sind in Tabelle 3. 1 aufgelistet. Diese Materialparameter konnten wiederum aus einer vorangegangenen Diplomarbeit [11] übernommen werden.

Spannung [N/mm <sup>2</sup> ]	Dehnung [%]
750	0
1360	1,6
1445	4,5
1520	8,25
1590	13
1632	16,65
1670	20
1699	23,5
1705	25

Tabelle 3. 1: Werte zu der Spannungs-Dehnungs-Kurve "Deckel" [11]



Spannungs-Dehnungs-Kurve "Deckel"

Abbildung 3. 7: Spannung-Dehnungs-Kurve im plastischen Bereich der Komponente "Deckel" [11]

## 3.2.5 Komponente "Pluspol"

Der Pluspol des Simulationsmodells besitzt die identische Materialkarte wie der zuvor erläuterte Deckel. Grund für die Modellierung des Pluspols ist folgender, dass die Ausrichtung der Zelle damit eindeutig definiert werden kann. Somit lässt sich auch die Zellausrichtung im Postprozessor optisch darstellen.

### 3.2.6 Komponente "Aktivmaterial"

Das Innere der Zelle wird als sogenanntes Aktivmaterial bezeichnet. Bei der vorliegenden Arbeit lag das Hauptaugenmerk auf dem Aktivmaterial, da dieses Material den größten Teil der Zelle darstellt. Des Weiteren können für den mehrschichtigen Aufbau im Inneren der Zelle keine Datenstände zu Spannung und Dehnung Anhand von Materialversuchen erhoben werden, wie es beispielsweise beim Boden, beim Mantel oder beim Deckel der Fall war. Der Grund dafür liegt im Zusammenhang der unterschiedlichen Werkstoffeigenschaften. Um die Summeneigenschaften des mehrschichtigen Aufbaus im Inneren der Zelle abbilden zu können, wurde dem Aktivmaterial die Materialkarte "MAT\_HONEYCOMB" aus der Werkstoffdatei von LS-DYNA zugewiesen. Das Material eignet sich lt. Handbuch besonders für wabenförmigen Strukturen sowie Schaumwerkstoffe, welche ein anisotropisches Materialverhalten aufweisen.

Diese Richtungsabhängigkeit des Werkstoffs ist speziell bei der Belastungskonfiguration "Crush in Z-Richtung" von großer Bedeutung. Um ein besseres Verständnis für das ausgewählte Materialmodell zu erlangen, ist es notwendig, die Werkstoffparameter des Materialmodells darzustellen. Nachfolgende Auflistung zeigt die Parameter der Materialkarte "MAT\_HONEYCOMB" sowie deren Bedeutung, welche aus dem Theoriehandbuch von LS-DYNA [35] entnommen wurde:

MID:	Material-Identifikationsnummer; wird dem Material bei der Erstellung			
	zugewiesen			
RHO:	Dichte des Materials			
Е:	Elastizitätsmodul im 100 [%] verdichteten/komprimierten Zustand			
PR:	Querdehnungszahl im 100 [%] verdichteten/komprimierten Zustand			
SIGY:	Fließgrenze bzw. Streckgrenze des vollständig komprimierten Materials			
VF:	Relatives Volumen zu dem Zeitpunkt, bei dem das Material vollständig			
	komprimiert ist			
MU:	Viskositätskoeffizient µ			
LCA/LCB/LCC:	Lastkurven-Identifikationsnummer; beschreibt eine Normalspannung-			
	Dehnungs-Kurve im plastischen Bereich in den einzelnen Richtungen des			
	Material-Koordinatensystems			
LCS:	Lastkurven-Identifikationsnummer; Schubspannungs-Dehnungs-Kurve			

Die Lastkurven beziehen sich auf ein Material-Koordinatensystem mit den Koordinaten a, b und c, wie in Abbildung 3. 8 dargestellt.



Abbildung 3. 8: Material-Koordinatensystem [36]

Vergleicht man das Material-Koordinatensystem mit dem Koordinatensystem der Zelle, so fallen die Richtungen a, b und c jeweils mit den Achsrichtungen x, y und z der Zelle zusammen, wie in Abbildung 3. 9 dargestellt.



Abbildung 3. 9: Vergleich von Material-Koordinatensystem und Zellen-Koordinatensystem

Die Lastkurven stellen Spannungs-Dehnungs-Kurven für den plastischen Bereich dar und repräsentieren das Verhältnis von Normalspannung (LCA/LCB/LCC) bzw. Schubspannung (LCS) zu relativer Volumenänderung. Sie wurden für jede Material-Koordinatenrichtung getrennt ermittelt. Da für das Aktivmaterial keine Daten anhand von Materialversuchen zur Verfügung standen, mussten die einzelnen Spannungs-Dehnungs-Kurven durch Erprobung festgestellt werden.

EAAU/EBBU/ECCU:	Elastizitätsmodu	le der	einzelnen	Koordinatenrichtungen	im
	unkomprimierte	n Zusta	nd		
GABU/GBCU/GCAU:	Schubmodule	der	einzelnen	Koordinatenrichtungen	im
	unkomprimierte	n Zusta	nd		

Der Buchstabe "U" bei den Elastizitätsmodulen und den Schubmodulen deutet auf die unbelastete Konfiguration des Materials hin.

Um das Materialverhalten von MAT\_HONEYCOMB zu verdeutlichen, dient Abbildung 3.10 [37]. MAT\_HONEYCOMB besitzt im Prinzip zwei nahezu unabhängige Deformationsphasen. In der ersten, unkomprimierten Phase sind die Spannungen und Dehnungen in allen drei Material-Koordinatenrichtungen voneinander entkoppelt. Hier gelten die Elastizitätsmodule (EAAU/EBBU/ECCU) und Schubmodule (GABU/GBCU/GCAU). Nachdem das Material vollständig verdichtet wurde, kommt die zweite, komprimierte Phase zum Tragen. In dieser Phase gelten der Elastizitätsmodul (E) sowie die Streckgrenze (SIGY). Nach Überschreiten der Streckgrenze setzt der Bereich der plastischen Verformung ein, welcher durch die einzelnen Lastkurven (LCA/LCB/LCC/LCS) abgebildet wird.



Abbildung 3.10: Materialverhalten MAT\_HONEYCOMB im unkomprimierten und komprimierten Bereich [37]

# 4 ERGEBNISSE AUS DEN VERSUCHEN

# 4.1 Motivation

Damit das Versagen der Batteriezelle und der damit einhergehende Kurzschluss innerhalb der Zelle ermittelt werden kann, wurden zunächst Versuche mit Zellen durchgeführt. Die Durchführung der Versuche erfolgte in einer vorangegangenen Diplomarbeit [11] an einem eigens am Vehicle Safety Institute entwickelten Batterieprüfstand, dem sogenannten PRESTO 420 [38]. Mittels einer Kraftmessdose konnte während den Versuchen die aufzubringende Verformungskraft gemessen werden. Zusätzlich wurden die Spannung und der Verformungsweg mitgemessen. Die gewonnenen Daten aus den Versuchen sollen Erkenntnisse liefern, zu welchem Zeitpunkt der Kurzschluss in der Zelle eintritt und wie der einsetzende Spannungsabfall mit der Verformung der Zelle in Verbindung gebracht werden kann.

# 4.2 Ausgangslage bei der Auswertung der Versuche

Die Batteriezellen bei den Versuchen wurden sowohl im vollständig geladenen Zustand (100 [%] SOC) als auch im vollständig ungeladenen Zustand (0 [%] SOC) getestet und ausgewertet. SOC steht für State of Charge [39] und gibt Aufschluss über den Ladezustand der Batteriezelle. Abhängig vom Ladezustand der Zellen konnte bei jeder Testkonfiguration eine unterschiedliche Anzahl an Versuchen ausgewertet werden. Grund dafür ist folgender, dass es bei einigen Versuchen Probleme mit der installierten Messtechnik gab und somit nur jene Versuche gültige Messergebnisse lieferten, bei denen alle Messdaten vollständig und korrekt aufgezeichnet wurden. Tabelle 4. 1 gibt Aufschluss über die Anzahl der getesteten Batteriezellen je Ladezustand und Testkonfiguration sowie über die ausgewerteten Versuche, welche gültige Messergebnisse lieferten.

Testkonfiguration	Ladezustand	adezustand Anzahl der getesteten Batteriezellen/Versuch	
Crush X	0%	4	2
Crush X	100%	2	2
Crush Z	0%	6	4

Crush Z	100%	2	2
Crush Penetration	0%	5	4
Crush Penetration	100%	4	4
Crush 3 Punkt Biegung	0%	5	5
Crush 3 Punkt Biegung	100%	4	4

Tabelle 4. 1: Anzahl der ausgewerteten Versuche je Testkonfiguration/Ladezustand

# 4.3 Versuchsauswertung Anhand der Testkonfiguration "Crush 3-Punkt-Biegung" / 0% SOC

## 4.3.1 Ermittlung von Kraft-Weg und Spannungs-Weg Diagrammen

Dieses Teilkapitel zeigt, wie aus den bereits vorhandenen Daten die Kraft-Weg Verläufe sowie die Spannungs-Weg Verläufe der einzelnen Testkonfigurationen ermittelt wurden. Beispielhaft soll die Versuchsauswertung anhand der Testkonfiguration "Crush 3 Punkt Biegung" bei 0 [%] SOC genauer beschrieben werden. Als Ausgangsbasis für die Auswertung dienten Rohdaten von Kraft, Spannung und Verformungsweg, sowie Versuchsdauer, welche für jeden einzelnen Versuch vorhanden waren. Um alle Versuche jeder Testkonfiguration untereinander vergleichbar zu machen, mussten zunächst die Schrittweite der Verformungswege vereinheitlicht und interpoliert werden. Bei der Versuchsdatenaufzeichnung wurden zum Teil unterschiedliche Schrittweiten aufgezeichnet. Die Auswertung der Versuchsdaten erfolgte mit Excel. In Abbildung 4. 1 sind alle Kraft-Weg-Verläufe beim Versuch "Crush 3 Punkt Biegung" mit vollständig entladenen Zellen dargestellt. Auf der Ordinate ist die Kraft in [N] und auf der Abszisse der Verformungsweg der Zelle in [mm] aufgetragen. Insgesamt konnten für diese Testkonfiguration fünf vollständige Versuchssätze ausgewertet werden. Zunächst steigen alle Kraftniveaus aus den Versuchen nahezu identisch bis ca. 7,5 [mm] Verformungsweg und einer Kraft von ca. 3500 [N] an. Danach stellt sich bei allen Prüflingen ein Kraftabfall bis annähernd 2000 [N] ein. Der Grund dafür liegt in einem Versagen des Mantels der Zelle. Anschließend erfolgt ein steilerer Kraftverlauf-Anstieg bis zu einem Höchstwert bei Prüfling Nr. 4 von ca. 9500 [N], welcher bei 20 [mm] Verformungsweg auftritt. Nach dem Erreichen der Maximalkraft fällt das Kraftniveau erneut ab, was möglicherweise auf ein Abgleiten der Zelle auf den zylindrischen Auflagern zurückzuführen ist. Das Quetschen der Zelle zwischen den Auflagern und dem

eindringenden Prüfkörper bewirkt eine erneute Zunahme der Kraft bei Prüfling Nr. 4 ab 21 [mm] Verformung bis zum Ende der Messstrecke bei 22 [mm], wie in Abbildung 4. 2 ersichtlich. Es zeigt sich, dass alle Batterieversuche bei der Testkonfiguration "Crush 3 Punkt Biegung" einen annähernd identischen Kraftverlauf aufweisen.



Abbildung 4. 1: Kraft-Weg-Verläufe der Zellen bei der Versuchsanordnung "Crush 3 Punkt Biegung" / 0 [%] SOC



Abbildung 4. 2: Vollständige Deformation der Zelle bei der Versuchsanordnung "Crush 3 Punkt Biegung" [11]

In Abbildung 4. 3 sind die Verläufe der Spannungen der einzelnen Batteriezellen bei der Versuchsanordnung "Crush 3 Punkt Biegung" über den Verformungsweg abgebildet. Auf der Ordinate ist die Spannung in [V] aufgetragen und auf der Abszisse wiederum die Verformung der Zelle in [mm]. Die vollständig entladenen Zellen bei dieser Testkonfiguration weisen im

Mittel eine Spannung von 3,2 [V] auf, welche 0,4 [V] unterhalb der Nennspannung dieses Zelltyps liegt. Besonders auffällig ist, dass der Kraftverlauf-Einbruch zwischen 7,5 und 8,5 [mm] Verformungsweg, wie in Abbildung 4. 1 gezeigt, keinen Einfluss auf das elektrische Versagen der Zelle besitzt. Der Bruch des Mantels wirkt sich somit nicht auf die elektrochemischen Prozesse im Inneren der Zelle aus. Der Spannungsabfall setzt erst später bei einer fortschreitenden Deformation der inneren Elektroden ein. Des Weiteren zeigte sich, dass bei den Versuchen Nr. 02, 04 und 05 die Spannung bei ca. 20 [mm] Verformung auf einen Wert zwischen 0 und 0,5 [V] abfällt, bei Versuch Nr. 01 und 03 der Spannungsabfall jedoch bereits etwas früher eintritt. Der frühere Spannungsabfall lässt sich auf ein früheres Versagen des Separator Materials zurückführen, welches möglicherweise durch das dünne Stahlröhrchen im Inneren der Zelle beschädigt wurde. Dennoch konnte bei allen Batterieversuchen ein ähnlicher Spannungsverlauf bis auf einen Wert von ca. 0 [V] herab festgestellt werden.





## 4.3.2 Ermittlung des Mittelwertes und Definition des Streubereiches

Die Auswertung der einzelnen Kraft-Weg und Spannungs-Weg-Verläufe aus den Batterieversuchen ergab, dass alle Versuche innerhalb eines bestimmten Bereiches streuen. An dieser Stelle soll auf die Versuchsstreuung mit den dazu möglichen Streubereichen und auf die

Berechnung der gemittelten Kurve aus den Versuchen genauer eingegangen werden. Anhand der Datenaufzeichnungen der einzelnen Versuche wurde in einem ersten Schritt der Mittelwert für den Kraft- und den Spannungsverlauf berechnet. Der berechnete Mittelwert aus den Versuchen dient dem Simulationsmodell in weiterer Folge als Ausgangsbasis für die Optimierung. Allen Versuchen ist gemeinsam, dass sie in einem bestimmten Bereich streuen, abhängig von der jeweiligen Testkonfiguration. Weicht der Verlauf des Simulationsmodells jedoch von dem berechneten Mittelwert aus den Versuchen ab, sollte sich dieser innerhalb eines festgelegten Toleranzbereiches befinden. Für die Ermittlung des Streubereiches wurden zwei unterschiedliche Varianten getestet. Eine erste Möglichkeit, um die Versuchsstreuung aus den Zelltests mathematisch wiedergeben zu können, ist die Berechnung der dazugehörigen Standardabweichung ausgehend vom Mittelwert. Durch Addition bzw. Subtraktion der Standardabweichung zum bzw. vom Mittelwert ergibt sich ein gültiger Streubereich sowohl für den Kraft-Weg-Verlauf als auch für den Spannungs-Weg-Verlauf. In Abbildung 4. 4 ist der Mittelwert aus den Zellversuchen bei der Testkonfiguration "Crush 3 Punkt Biegung" mit 0 [%] SOC ersichtlich. Dabei markiert die blaue Linie die obere Grenze des Streubereiches und die orange Linie die untere Grenze.



Abbildung 4. 4: Mittelwert des Kraftverlaufes sowie obere und untere Grenzkurve mittels Standardabweichung bei der Versuchsanordnung "Crush 3-Punkt-Biegung" / 0 [%] SOC

Eine 2. Möglichkeit zur Festlegung des Streubereiches bei den Versuchen bestand darin, dass für die obere Grenzkurve jene Versuchswerte herangezogen werden, welche die höchsten Kraftwerte zum jeweiligen Verformungsweg aufwiesen. Selbiges gilt für die untere Grenzkurve. Hier wurden jene Versuchswerte ausgewählt, welche die niedrigsten Kraftwerte aufwiesen. Somit ergibt sich ein erneuter Streubereich für die Versuchsauswertung, wie in Abbildung 4. 5 dargestellt. Die blaue Linie kennzeichnet den Kraft-Weg-Verlauf mit den höchsten, in den Versuchen auftretenden Verformungskräften und die orange Linie den Verlauf mit den niedrigsten, in den Versuchen auftretenden Kräften.



Abbildung 4. 5: Mittelwert des Kraftverlaufes und maximaler bzw. minimaler Kraft-Weg-Verlauf bei der Versuchsanordnung "Crush 3-Punkt-Biegung" / 0 [%] SOC

Für einen gültigen Streubereich aus der Versuchsauswertung heraus wurde die 2. Möglichkeit mit den maximal und minimal auftretenden Verformungskräften zum jeweiligen Verformungsweg ausgewählt. Grund dafür ist folgender, dass diese Methode auf repräsentative Werte aus der Datenanalyse zurückgreift.

Auch für den Spannungs-Weg-Verlauf bei der Versuchsanordnung "Crush 3 Punkt Biegung" mit 0 [%] SOC wurde zunächst der Mittelwert aus den Versuchen berechnet. Auch hier ist der gültige Streubereich durch die maximal und minimal auftretenden Spannungswerte zum jeweiligen Verformungsweg aus den einzelnen Versuchen festgelegt, wie in Abbildung 4. 6

dargestellt. Die rote Linie kennzeichnet den gemittelten Verlauf der Spannung über den Verformungsweg und die blaue bzw. orange Linie stellen die maximal und minimal auftretenden Spannungswerte aus allen, zur Auswertung verwendbaren Versuchen dar. Dadurch, dass bei den niedrigsten aufgezeichneten Spannungswerten der Spannungsabfall bereits bei 15 [mm] Verformungsweg einsetzt, hingegen bei den höchsten aufgezeichneten Spannungswerten der Spannungsabfall erst bei annähernd 20 [mm] Verformung einsetzt, ergibt sich ein breiter Spannungs-Streubereich bei dieser Testkonfiguration. Die gemittelte Spannung fällt von 3,2 [V] ausgehend binnen 5,8 [mm] Verformungsweg auf einen Wert von 0,5 [V] herab.



Abbildung 4. 6: Mittelwert des Spannungsverlaufes und maximaler bzw. minimaler Spannungs-Weg-Verlauf bei der Versuchsanordnung "Crush 3-Punkt-Biegung" / 0 [%] SOC

## 4.3.3 Definition des Kurzschlussbereiches

Lithium-Ionen Zellen können durch unterschiedliche Einflussfaktoren beschädigt oder zerstört werden. Wichtig im Zusammenhang mit der Definition des Kurzschlussbereiches ist die Frage, ob eine mechanische Belastung der Zelle zu einem Versagen führt oder ob ein elektrisches Versagen in Betracht gezogen werden muss. In der vorliegenden Arbeit wird der eintretende Kurzschlussbereich anhand des elektrischen Versagens der Zelle festgelegt. Zwar tritt bei der Testkonfiguration "Crush 3 Punkt Biegung" ein mechanisches Versagen (Mantelriss) vor dem

elektrischen Versagen ein, jedoch wirkt sich der Riss im Mantel nicht auf den Spannungsverlauf aus. Somit kann als wichtiges Kriterium im Zusammenhang mit dem Versagen der 18650 Lithium-Ionen Zelle der einsetzende Spannungsabfall in der Zelle gedeutet werden. Bei den vordefinierten Crush-Tests soll unter allen Umständen ein elektrischer Kurzschluss der Zelle ausgeschlossen werden können, da es im schlimmsten Fall zu einem "Thermal Runaway" kommen kann. Somit gilt ein Versagen des Simulationsmodells der Zelle bereits ab dem Zeitpunkt, an dem die Spannung zum 1. Mal abfällt. Dieser sogenannte Kurzschlussbereich ist der vorliegenden Arbeit vom beginnenden Spannungsabfall des gemittelten in Spannungsverlaufes bis auf einen Wert von 0,5 [V] herab definiert. Der Kurzschlussbereich tritt abhängig von der Testkonfiguration bei unterschiedlich Verformungsgraden der Zelle ein. In Abbildung 4. 7 sind die gemittelten Kraft-Weg und Spannungs-Weg-Verläufe sowie deren Streubereiche aus den Zellversuchen bei der Testkonfiguration "Crush 3 Punkt Biegung" und 0 [%] SOC abgebildet. Der markierte Bereich im Diagramm stellt dabei den Kurzschlussbereich dar. Wie bereits erwähnt, erstreckt sich der Bereich vom 1. einsetzenden Spannungsabfall der gemittelten Spannung bis auf einen Wert von 0,5 [V] herab. Auffällig ist, dass bei der Testkonfiguration "Crush 3 Punkt Biegung" der Kurzschlussbereich bereits bei 15 [mm] Verformungsweg einsetzt, hingegen die Maximalkraft erst bei ca. 20 [mm] Verformung auftritt. Demzufolge ist hierbei nicht die maximal erreichbare Kraft für das Versagen der Zelle verantwortlich, sondern das Zusammenstoßen von positiv und negativ geladener Elektrode im Inneren der Zelle, welches sich auf eine Zerstörung des Separators zurückzuführen lässt. Diese könnte wiederrum durch ein Eindringen des gebrochenen Stahlröhrchens in das Separator Material erklärbar sein. Auch könnten spitze Bruchstücke des Metallmantels die Zwischenschicht beschädigen, was ebenfalls zu einem Versagen der elektrochemischen Prozesse und somit zum Kurzschluss führt. Auffällig ist außerdem der Kraftverlauf-Einbruch bei ca. 7 [mm] Verformung, welcher sich jedoch nicht auf den Spannungsverlauf auswirkt. Der Kurzschlussbereich setzt erst später ab einem Verformungsweg von 15 [mm] ein. Ein Grund für das Aufrechterhalten der Spannung könnte sein, dass zunächst der Mantel der Batteriezelle einknickt, ohne dass es jedoch zu einem inneren Kurzschluss in der Zelle kommt. Wie bereits in Kapitel 2.6 beschrieben, kommt es bei der 3 Punkt Biegung gleichzeitig zu einer lokalen und globalen Belastung der Zelle. Somit wirkt sich erst die lokale Deformation der Zelle auf die Spannung aus, wobei die vorangegangene Biegung sich nicht direkt auf den Spannungsverlauf auszuwirken scheint. Ab 15 [mm] Verformung fällt die Spannung kontinuierlich ab.

42



Abbildung 4. 7: Kraft- und Spannungsverlauf mit Kurzschlussbereich bei der Versuchsanordnung "Crush 3-Punkt-Biegung" / 0 [%] SOC

## 4.3.4 Einfluss des Ladezustandes der Zellen

Bei der Auswertung der Versuche konnte festgestellt werden, dass sich die Kraftverläufe und die Spannungsverläufe bei 0 [%] SOC und 100 [%] SOC ähnlich verhalten, auch wenn der maximal auftretende Kraftwert bei 100 [%] SOC um ca. 1500 [N] über jenem Wert bei 0 [%] SOC liegt. Die Kraft-Weg-Verläufe bei der Testkonfiguration "Crush 3 Punkt Biegung" besitzen in beiden Fällen (0 [%] und 100 [%] SOC) einen Krafteinbruch bei ca. 7 [mm] Verformung und auch die Spannungs-Weg-Verläufe zeigen ein vergleichbares Muster, da bei beiden Verläufen die Spannung bis annähernd 15 [mm] konstant bleibt und anschließend kontinuierlich abfällt. Es zeigte sich jedoch, dass bei völlig entladenen Batteriezellen (0 [%] SOC) der Kurzschluss innerhalb der Zelle früher eintritt. Ein Grund dafür könnten die unterschiedlichen Temperaturen darstellen, die bei den Versuchen vorherrschten. Während die Versuche mit 0 [%] SOC am Vehicle Safety Institut bei einer Raumtemperatur von circa 20 [°C] durchgeführt werden konnten, fanden die Versuche mit 100 [%] SOC aus Sicherheitsgründen auf einem Testgelände im Freien statt, wo lediglich um die 0 [°C] Außentemperatur vorherrschte. Bei höherer Temperatur in der Zelle sinkt die Zellspannung, da durch die erhöhte Temperatur der Innenwiderstand der Zelle sinkt, wie in Abbildung 4. 8 dargestellt. Die Zellspannung ist keine

konstante Größe, sondern von unterschiedlichen Faktoren abhängig. Unter anderem hängt sie vom Elektrolytwiderstand ab, welcher wiederum von der Elektrolyttemperatur abhängig ist. Sinkt der Widerstand in der Zelle, fällt nach dem Ohm´schen Gesetz bei konstanter Stromabgabe auch die Spannung ab. Dies könnte ein Grund dafür sein, dass bei den Versuchen mit 0 [%] SOC (durchgeführt bei 20 [°C]) der Kurzschluss schneller eintritt als bei den Versuchen mit 100 [%] SOC (durchgeführt bei 0 [°C]).



Abbildung 4. 8: Temperaturabhängigkeit des Innenwiderstandes einer Starterbatterie [40]

In Abbildung 4. 9 sind der gemittelte Kraft-Weg und Spannungs-Weg-Verlauf über den Verformungsweg bei der Testkonfiguration "Crush 3-Punkt-Biegung" und 100 [%] SOC inklusive derer Toleranzbereiche dargestellt. Der Kraftverlauf weist wiederrum einen Krafteinbruch bei ca. 7 [mm] Verformungsweg auf und steigt danach bis zu einer gemittelten Maximalkraft von annähernd 9500 [N] bei 19 [mm] Verformungsweg an. Die gemittelte Spannung beträgt ca. 4,2 [V], was der Ladeschlussspannung der 18650 Lithium-Ionen Zelle entspricht. Der gemittelte Spannungsverlauf selbst bleibt über einen Verformungsweg von annähernd 16 [mm] konstant und fällt danach kontinuierlich bis auf einen Wert von 0,5 [V] ab. Es zeigte sich, dass bei der Versuchsanordnung "Crush 3 Punkt Biegung mit 100 [%] SOC" im Vergleich zum "Crush 3-Punkt-Biegung mit 0 [%] SOC" der Kurzschlussbereich jedoch später einsetzt. Der Vollständigkeit halber sei hier erwähnt, dass im Anhang (Kapitel 10) die Diagramme aus den einzelnen Testkonfigurationen mit 100 [%] SOC aufgelistet sind.



Ergebnisse aus den Versuchen

Abbildung 4. 9: Kraft- und Spannungsverlauf mit Kurzschlussbereich bei der Versuchsanordnung "Crush 3-Punkt-Biegung" / 100 [%] SOC

## 4.4 Crush in X-Richtung

Abbildung 4. 10 zeigt die gemittelten Verläufe von Kraft und Spannung sowie die dazugehörigen Grenzkurven der Streubereiche bei Belastung in radialer Richtung mit 0 [%] SOC. Auf der linken Ordinate ist die Kraft in [N] aufgetragen, auf der rechten Ordinate die Spannung in [V] und auf der Abszisse die Verformung der Zelle in [mm]. Der markierte Bereich im Diagramm kennzeichnet den Kurzschlussbereich vom einsetzenden Spannungsabfall bis auf 0,5 [V] herab. Auffällig bei der Testkonfiguration "Crush in X-Richtung" ist der abrupt einsetzende Spannungsabfall bei ca. 7,5 [mm] Verformung. Ein möglicher Grund dafür könnte das Versagen des Mantels der Zelle sein. Dadurch kann es zum Kontakt zwischen positiver und negativer Elektrode innerhalb der Zelle kommen, weshalb die Spannung in der Zelle zusammenbricht. Der gemittelte Kraftverlauf steigt zunächst flach bis auf einen Wert von ca. 5 [mm] Verformung an, wobei das Kraftniveau nicht über 10000 [N] steigt. Des Weiteren zeigt sich, dass der Streubereich der Verformungskraft, ermittelt aus maximal und minimal auftretenden Kraftwerten, bei dem Zellversuch "Crush in X-Richtung" mit 0 [%] SOC sehr schmal ausfällt. Daraus kann abgeleitet werden, dass die Versuche gut reproduzierbar sind. Die erreichbare

Verformungskraft von annähernd 50000 [N] bis zum Erreichen des Kurzschlusses weist außerdem darauf hin, dass die Batteriezellen in radialer Richtung sehr hohe mechanische Belastungen aufnehmen können.



Abbildung 4. 10: Kraft- und Spannungsverlauf mit Kurzschlussbereich bei der Versuchsanordnung "Crush in X-Richtung" / 0 [%] SOC

# 4.5 Crush in Z-Richtung

Bei der Belastung in axialer Richtung, der Testkonfiguration "Crush in Z-Richtung" dargestellt in Abbildung 4. 11, fällt der gemittelte Spannungsverlauf (blaue Linie) bereits nach ca. 3,3 [mm] Verformung stark ab. Ein Grund dafür könnte sein, dass es durch das Stauchen der Zelle zu einem Kontakt von positiven Ableiter und negativer Elektrode kommt. Ein Kurzschluss, welcher über die Prüfanlage ausgelöst wird, lässt sich in diesem Zusammenhang ausschließen, da die Prüfeinrichtung im Vorfeld elektrisch isoliert wurde. Die Spannung fällt dabei exponentialförmig von anfänglich 3,2 [V] im Mittel innerhalb eines Verformungsweges von 4 [mm] auf 0,5 [V] ab. Bedingt durch die axiale Belastungssituation ergibt sich für den Zellversuch "Crush in Z-Richtung" ein relativ langer Verformungsweg von 26 [mm]. Die Auswertung der Daten ergab zudem, dass ab ca. 19 [mm] Verformung für die untere Grenzkurve der Spannung (grüne Linie) Werte unterhalb von 0 [V] auftraten. Dieser Wertebereich befindet sich jedoch weit hinter dem

definierten Kurzschlussbereich und ist somit von untergeordneter Bedeutung. Bei der Verformungskraft zeigte sich, dass der gemittelte Verlauf (rote Linie) bis annähernd 3000 [N] und 1,5 [mm] Verformungsweg ansteigt, anschließend jedoch das Kraftniveau konstant bleibt, bis schließlich ab ca. 2,5 [mm] die Kraftwerte weiter ansteigen. Dieses konstante Kraftniveau trat bei allen Versuchen auf und lässt sich möglicherweise auf ein Knicken des dünnen Stahlrohres in der Mitte der Zelle zurückführen, um welches die positiven und negativen Elektroden sowie das Separator Material aufgewickelt sind [41]. Ein weiterer Grund könnte sein, dass sich im Bereich der Polkappe Zwischenräume befinden, wie bereits in Abbildung 3. 4 gezeigt. Diese bewirken, dass die Kraftwerte erst dann weiter ansteigen, wenn die Zwischenräume vollständig komprimiert wurden und ein erneuter, direkter Kontakt zwischen dem inneren Schichtaufbau der Zelle und dem positiven Pol vorhanden ist. Der Maximalwert der erreichbaren Verformungskraft liegt im Mittel bei ca. 9000 [N], tritt jedoch erst bei 14 [mm] Verformungsweg auf. Die erzielte Verformungskraft von ca. 4200 [N] bis zum Erreichen des Kurzschlussbereiches zeigt, dass die 18650 Lithium-Ionen Zelle in axialer Richtung wesentlich geringe Verformungskräfte aufnehmen kann im Vergleich zur Belastung in radialer Richtung.



Abbildung 4. 11: Kraft- und Spannungsverlauf mit Kurzschlussbereich bei der Versuchsanordnung "Crush in Z-Richtung" / 0 [%] SOC

# 4.6 Crush Penetration

In Abbildung 4. 12 ist die Testkonfiguration "Crush Penetration" dargestellt, bei der ein zylindrischer Prüfkörper mittig angeordnet auf die flach liegende Zelle drückt. Das Diagramm zeigt die Kraft-Weg und Spannungs-Weg-Verläufe mit den ermittelten Streubereichen sowie dem definierten Kurzschlussbereich der Zelle, welcher farblich markiert wurde. Bei dieser Testkonfiguration fällt besonders der konstante Kraftanstieg bis zu einer Maximalkraft von 16000 [N] auf. Durch die seitliche Einbeulung verformt sich zunächst der Mantel der Zelle, anschließend werden der innere, mehrschichtige Aufbau der Zelle sowie das mittig angeordnete Stahlröhrchen gestaucht. Damit lässt sich der konstant steigende Kraftverlauf erklären. Der Streubereich, in dem sich die gemittelte Verformungskraft befindet, fällt zudem sehr schmal aus. Der einsetzende Kurzschlussbereich beginnt bei der Testkonfiguration "Crush Penetration" bei ca. 6,5 [mm] Verformung und endet bei 12 [mm] Verformung. Es zeigte sich, dass die Spannung ebenfalls nahezu konstant abfällt. Dieser Sachverhalt lässt sich möglicherweise darauf zurückführen, dass die beginnende Penetration des Mantels noch zu keiner Zerstörung des Separator Materials führt, welches die elektrisch gegensinnig gepolten Elektroden voneinander trennt. Erst eine sehr große Deformation des mehrschichtigen Aufbaus innerhalb der Zelle führt zu einem Einsetzen des Kurzschlusses.



Abbildung 4. 12: Kraft- und Spannungsverlauf mit Kurzschlussbereich bei der Versuchsanordnung "Crush Penetration" / 0 [%] SOC

# 5 **OPTIMIERUNG DER MATERIALPARAMETER**

Dieses Kapitel soll zeigen, wie die Optimierung der Materialparameter des vorhandenen Simulationsmodells der Zelle erfolgte, um die mechanischen Eigenschaften einer 18650 Lithium-Ionen Zelle nachbilden zu können. Die Optimierung zielt darauf ab, dass sich die Kraft-Weg-Verläufe von Simulation und Versuch einander angleichen. Da unter allen Umständen ein elektrisches Versagen der Batteriezelle im Falle eines Crashs verhindert werden soll, ist eine Simulation über den Kurzschlussbereich hinaus nicht nötig. Tabelle 5. 1 gibt Aufschluss darüber, ab welchem Verformungsweg der Kurzschluss bei den Versuchen eingetreten ist und bis zu welchem Verformungsweg die dazugehörige Simulation der Zelle durchgeführt wird.

Testkonfiguration	Crush-X	Crush-Z	Penetration	3 Punkt Biegung
Eintretender Kurzschluss bei	7,5mm	3,3mm	6,5mm	15mm
Simulation der Zelle bis	8mm	4mm	7mm	15mm (7,5mm)

Tabelle 5. 1: Dauer der Simulationen bis zum Erreichen des Kurzschlusses

# 5.1 Definition des Toleranzbereiches für das Simulationsmodell

Bei der Versuchsauswertung wurde in Teilkapitel 4.3.2 die Definition des Streubereiches zu den jeweiligen Versuchen erläutert. Da jede Testkonfiguration eine bestimmte Versuchsstreuung besitzt, wird dem Simulationsmodell im Hinblick auf die Optimierung ein Toleranzbereich zugeordnet, innerhalb dessen sich der Kraftverlauf befinden soll. Aufgrund der Erkenntnis, dass der Kurzschluss bei den Kraft-Weg-Verläufen mit 0 [%] SOC früher eintritt als bei 100 [%] SOC, soll das Simulationsmodell auf die gemittelten Kraftverläufe bei 0 [%] SOC hin optimiert werden. Die dazugehörigen Toleranzbereiche für das Simulationsmodell lassen sich folglich mit den Streubereichen aus den Zellversuchen bei 0 [%] SOC abdecken.

# 5.2 Vorgehensweise bei der Optimierung

Die Optimierung des Zellmodells fand mit dem Programm LS-OPT [42] statt. LS-OPT ist laut Hersteller ein eigenständiges Design-Optimierungsprogramm zur Lösung von nichtlinearen

Optimierungsproblemen, welches eine Schnittstelle zu LS-DYNA bildet. Damit das Simulationsmodell der Zelle über die mechanischen Eigenschaften einer 18650 Lithium-Ionen Zelle verfügt, müssen die Kraft-Weg-Verläufe aus der Simulation an die Verläufe aus den Versuchen angepasst werden. Um eine Anpassung der Verläufe zu realisieren, wurden dem Simulationsmodell der Zelle 41 unterschiedliche Materialparameter zugeordnet, welche es in der Optimierung aufeinander abzustimmen gilt. In Abbildung 5. 1 ist die grundlegende Vorgehensweise bei der Optimierung der Materialparameter bzw. der Anpassung der Kraft-Weg-Verläufe zueinander schematisch dargestellt. In der Optimierung werden die Kraft-Weg-Verläufe aus den Zellversuchen mit dem Kraft-Weg-Verlauf des Simulationsmodells solange verglichen, bis sich die Abweichung in allen Testkonfigurationen auf ein Minimum reduziert hat. Durch eine Anpassung des Wertebereiches in jedem Iterationsschritt sollen für das Simulationsmodell der Zelle die optimalen Materialparameter gefunden werden. In den folgenden Teilkapiteln wird auf die Vorgehensweise genauer eingegangen. Zudem werden die Komponenten sowie deren Materialparameter näher beschrieben.



Abbildung 5. 1: Schematische Darstellung des Optimierungsprozesses von Kraft-Weg-Verläufen im LS-OPT

# 5.2.1 Komponenten des FE-Modells mit den Parametern und deren dazugehörigen Wertebereichen

In diesem Teilkapitel werden die Materialparameter zu den einzelnen Zellkomponenten erläutert und deren Einfluss auf das Simulationsmodell verdeutlicht. Damit für das Simulationsmodell optimale Kraft-Weg-Verläufe gefunden werden können, wurden jedem einzelnen der 41 Materialparameter zusätzlich zu einem festgelegtem Startwert ein Maximalund ein Minimalwert zugeordnet, quasi ein Wertebereich für jeden Parameter. Innerhalb dieses Bereiches findet eine kontinuierliche Variation der Parameter statt, bis schlussendlich ein optimales Simulationsergebnis erzielt wird.

## Parameter bei den Komponenten "Boden" und "Mantel":

## • Elastizitätsmodul von Boden und Mantel EmodM

Dem Boden sowie dem Mantel der Zelle wurde als Startwert der Elastizitätsmodul eines unlegierten Stahles von 210000 [N/mm<sup>2</sup>] zugeordnet. Als Wertebereich wurden ein Maximalwert von 300000 [N/mm<sup>2</sup>] und ein Minimalwert von 70000 [N/mm<sup>2</sup>] festgelegt. Obwohl die Werkstoffeigenschaften der beiden Komponenten durch Materialversuche bekannt sind, wurde für die Optimierung dennoch ein Wertebereich zugeordnet, da durch die getroffenen Modellvereinfachungen mit einem konstant gehaltenen Elastizitätsmodul kein zufriedenstellendes Optimierungsergebnis erzielt werden konnte. Durch den gewählten Wertebereich konnte bei den Testkonfigurationen "Crush Penetration" und "Crush 3 Punkt Biegung" ein verbesserter Kraft-Weg-Verlauf für das Simulationsmodell der Zelle erreicht werden.

## • Streckgrenze von Boden und Mantel SigYM

Die Streckgrenze wurde zu Beginn mit 285 [N/mm<sup>2</sup>] festgesetzt. Bei der Optimierung wurde ein Wertebereich zwischen 200 und 750 [N/mm<sup>2</sup>] definiert. Die Streckgrenze markiert den Beginn der einsetzenden plastischen Verformung. Eine Verschiebung der Streckgrenze zu niedrigeren Werten äußert sich in einem flach ansteigenden Kraftverlauf speziell bei den Testkonfigurationen "Crush in Z-Richtung" und "Crush 3 Punkt Biegung". Die plastische Verformung des Bodens und des Mantels selbst ist durch die Angabe einer Spannungs-Dehnungs-Kurve definiert, wie in Abbildung 5. 2 dargestellt. Diese Kurve wird in der Optimierung der Materialparameter ebenfalls an das Simulationsmodell angepasst.

51



Spannungs-Dehnungs-Kurve "Boden" und "Mantel"

Abbildung 5. 2: Spannungs-Dehnungs-Kurve im plastischen Bereich des Bodens und des Mantels der Zelle

## • Wandstärke des Mantels DM

Obwohl die Wandstärke des Mantels genau bekannt ist (Startwert: 0,15 [mm]), wurde bei der Optimierung ein Wertebereich zwischen 0,15 [mm] (Minimalwert) und 0,24 [mm] (Maximalwert) festgelegt. Bei der Testkonfiguration "Crush in Z-Richtung" konnte zu Beginn der Materialparameteroptimierungen die notwendige Maximalkraft nicht erreicht werden. Aus der Erhöhung der Wandstärke resultiert eine erhöhte Summensteifigkeit der gesamten Zelle, wodurch eine Verbesserung des Optimierungsergebnisses erreicht werden konnte.

## Parameter bei der Komponente "Deckel" und "Pluspol":

Elastizitätsmodul EmodD des Deckels und des Pluspols

Der Elastizitätsmodul von Deckel und Pluspol wurde zu Beginn der Optimierung mit 10000 [N/mm<sup>2</sup>] gewählt. Bei der Optimierung zeigte sich, dass dieser Parameter einen geringfügigen Einfluss auf die Testkonfiguration "Crush in Z-Richtung" besitzt, weshalb ein Wertebereich zwischen 5000 [N/mm<sup>2</sup>] und 70000 [N/mm<sup>2</sup>] zugeordnet wurde.

• Streckgrenze SigYD des Deckels und des Pluspols

Die Streckgrenze dieser Zellkomponenten bewirkt eine Verschiebung des einsetzenden plastischen Bereiches, wie bereits bei der Streckgrenze des Mantels genauer erläutert. Als Startwert wurden 750 [N/mm<sup>2</sup>] festgesetzt, wobei als Minimalwert 250 [N/mm<sup>2</sup>] und als

Maximalwert 2000 [N/mm<sup>2</sup>] gewählt wurden. Dieser Materialparameter beeinflusst bei der Testkonfiguration "Crush in Z-Richtung" den Kraftverlauf-Anstieg zu Beginn der Simulation.

Parameter bei der Komponente "Polkappe":

Quasistatischer Elastizitätsmodul EtanPK der Polkappe

Im Gegensatz zum Boden und zum Mantel ist bei der Polkappe der plastische Bereich durch die Angabe des quasistatischen Elastizitätsmoduls definiert. Der Startwert wurde mit 150 [N/mm<sup>2</sup>] gewählt. Als Minimalwert wurden 15 [N/mm<sup>2</sup>] und als Maximalwert 300 [N/mm<sup>2</sup>] festgelegt. Dieser Materialparameter beeinflusst das Optimierungsergebnis bei der Testkonfiguration "Crush 3 Punkt Biegung", da die Polkappe gemeinsam mit dem Mantel die gesamte Außenhülle des FE-Modells der Zelle darstellt. Eine Verringerung des quasistatischen Elastizitätsmoduls bewirkt einen flacheren Kraftverlauf-Anstieg bei dieser Testkonfiguration.

• Elastizitätsmodul EmodPK und Streckgrenze SigYPK der Polkappe

Diese beiden Materialparameter beschreiben den elastischen Verformungsbereich der Polkappe und bewirken eine Verbesserung bei den Testkonfigurationen "Crush in Z-Richtung" und "Crush 3 Punkt Biegung".

## Parameter bei der Komponente "Aktivmaterial":

Streckgrenze SigY des vollständig komprimierten Aktivmaterials

Bei diesem Materialparameter konnte ein Einfluss auf die Optimierungsergebnisse bei allen Testkonfigurationen festgestellt werden. Von der Streckgrenze des Aktivmaterials hängt es ab, ab wann die Normalspannungs-Dehnungs-Kurven LCA, LCB und LCC sowie die Schubspannungs-Dehnungs-Kurve LCS für den plastischen Bereich in Kraft treten. Als Startwert wurden lediglich 1,7 [N/mm<sup>2</sup>] festgesetzt, was auf den biege- und schubweichen mehrschichtige Aufbau im Inneren der 18650 Lithium-Ionen Zelle zurückzuführen ist. Der Wertebereich wurde zwischen 1 [N/mm<sup>2</sup>] und 1000 [N/mm<sup>2</sup>] definiert. Höhere Spannungswerte führten bei der Materialparameteroptimierung zu schlechteren Endergebnissen.

## Elastizitätsmodul Emod des vollständig komprimierten Aktivmaterials

Der Elastizitätsmodul trägt aufgrund der überwiegenden plastischen Verformung der Zelle geringfügig zur Verbesserung des Kraftverlaufes bei der Testkonfiguration "Crush in X-Richtung"

bei. Der Wertebereich wurde zwischen 250 und 1500 [N/mm<sup>2</sup>] gewählt, der Startwert beträgt 1400 [N/mm<sup>2</sup>], wodurch die Steifigkeit des mehrschichtigen Aufbaus im Inneren der Zelle abgebildet werden soll.

• Werte zu den Spannungs-Dehnungs-Kurven des Aktivmaterials Ax1 – Ax5 / Ay1 – Ay5 Diese Parameter dienen zur Definition der Normalspannungs-Dehnungs-Kurve für den plastischen Bereich des Aktivmaterials in der Materialkoordinatenrichtung a. Die Parameter sind durch das Preprozessor-Input-File *supporting\_points\_LCA.txt* definiert. Das File selbst ist eine Textdatei, welche wie folgt festgelegt ist:

0	< <ay1>&gt;</ay1>
< <ax2>&gt;</ax2>	< <ay2>&gt;</ay2>
< <ax3>&gt;</ax3>	< <ay3>&gt;</ay3>
< <ax4>&gt;</ax4>	< <ay4>&gt;</ay4>
0.89	< <ay5>&gt;</ay5>

Jedem Wert auf der X-Achse wird ein Wert auf der Y-Achse zugeordnet und LS-OPT erzeugt durch Interpolation einen kubischen Spline durch die Punkte hindurch, wie in Abbildung 5.3 dargestellt. Die Werte auf der X-Achse entsprechen der Spannung in [N/mm<sup>2</sup>] und auf der Y-Achse wird die maximale Dehnung respektive Stauchung des Bauteils in [%] aufgetragen. Die Parameter Ax1 und Ax5 wurden mit 0 und 0,89 konstant gehalten. Hintergrund ist folgender, dass die plastische Verformung bei 0 beginnen muss und eine maximal zulässige Stauchung des Aktivmaterials mit 89 [%] festgelegt wurde. Die Erzeugung des Splines durch Interpolation der vorgegebenen Punkte (Ax1 – Ax5 etc.) erfolgt unter Zuhilfenahme des Perl-Programmes cubic hermite interpolation LCA.pl im Preprozessor von LS-OPT. Perl [43] stellt dabei eine eigene Programmiersprache dar, wobei die Idee hinter der Vorgehensweise von der Firma Dynamore selbst stammt. Sobald das Preprocessing abgeschlossen ist, gibt das Perl-Programm die Datei curve out LCA.inc aus. In dieser Datei werden jeweils 100 Werte in X- und Y-Richtung erzeugt, die zur Erstellung des kubischen Splines verwendet werden. So wird zu jedem Optimierungspunkt eine neue Spannungs-Dehnungs-Kurve erstellt. Das identische Prozedere findet gleichfalls bei der Erstellung der Spannungs-Dehnungs-Kurven für die Material-Koordinatenrichtungen b und c (LCB und LCC) sowie zur Erzeugung der Schubspannungs-Dehnungs-Kurve LCS statt. Somit werden bei jedem Optimierungspunkt insgesamt 24 Materialparameter für die Spannungs-Dehnungs-Kurven neu variiert. In Abbildung 5. 4 ist

beispielhaft die Spannungs-Dehnungs-Kurve LCA des Aktivmaterials der Material-Koordinatenrichtung a dargestellt.



Abbildung 5. 3: Repräsentativer kubischer Spline für den plastischen Bereich des Aktivmaterials [44]



Abbildung 5. 4: Spannungs-Dehnungs-Kurve LCA des Aktivmaterials in Material-Koordinatenrichtung a

## • Querdehnungszahl PR des Aktivmaterials

Für die Querdehnungszahl wurde als Startwert 0,33 [-] festgelegt. Der Maximalwert darf dabei 0,499 [-] nicht überschreiten, da eine Querdehnungszahl größer als 0,5 bei einer Druckbelastung

eine Volumenzunahme bedeutet, was eine Fehlermeldung des Optimierungsprozesses nach sich zieht. Es zeigte sich, dass mit einer Querdehnungszahl von 0,41 [-] das beste Simulationsergebnis erzielt werden konnte.

### Elastizitätsmodule des Aktivmaterials EAAU / EBBU / ECCU

Die Elastizitätsmodule des Aktivmaterials lassen durch die gewählte Materialkarte MAT\_HONEYCOMB in die einzelnen Material-Koordinatenrichtungen unterteilen. Dadurch können die elastischen Verformungen der Zelle in den Koordinaten a, b und c getrennt beeinflusst werden. Es zeigte sich, dass speziell der Elastizitätsmodul ECCU die Testkonfiguration "Crush in Z-Richtung" maßgeblich beeinflusst. Aufgrund des Zusammenfalls der Material-Koordinatenrichtung c mit der Z-Achse des Zellmodells steigt der Kraftverlauf steil an, sobald der Elastizitätsmodul ECCU erhöht wird. Der Elastizitätsmodul EAAU wirkt sich hingegen bei der Testkonfiguration "Crush in "Crush in "Crush Penetration" auf den Kraftverlauf des Simulationsergebnisses aus.

## Schubmodule des Aktivmaterials GABU / GBCU / GCAU

Die Schubmodule lassen sich wie die Elastizitätsmodule des Aktivmaterials durch die gewählte Materialkarte in die einzelnen Material-Koordinatenrichtungen unterteilen. Die Schubspannungen betreffend den Material-Koordinatenrichtungen a und b lassen sich durch den Schubmodul GABU beeinflussen, welcher bei den drei Testkonfigurationen "Crush in X-Richtung", "Crush Penetration" und "Crush 3 Punkt Biegung" eine Verbesserung des Optimierungsergebnisses hervorgerufen hat. Bei den genannten Konfigurationen treten hohe Schubspannungen in den Achsrichtungen x und y des Zellmodells auf, weshalb der Wertebereich des Schubmoduls GABU zwischen 10 [N/mm<sup>2</sup>] und 1000 [N/mm<sup>2</sup>] festgelegt wurde.

### 5.2.2 Optimierungsstrategie

Bei der Optimierungsstrategie wurde der Ansatz der SRSM-Strategie angewendet. SRSM steht für Sequential with domain reduction und bedeutet, dass die Optimierung kontinuierlich erfolgt. Dabei wird in jedem Iterationsschritt das Optimum aus dem vorgegebenen Wertebereich gesucht (beginnend mit dem Startwert), um in einen nächsten Iterationsschritt

diesen Grenzbereich wiederrum zu verkleinern, bis schlussendlich ein Optimum für den Materialparameter gefunden ist. Die Anzahl der Iterationsschritte kann dabei frei gewählt werden. Durch das gewählte Space-Filling-Schema sowie der Anzahl an veränderlichen Parametern ergeben sich insgesamt 64 Optimierungsmöglichkeiten je Testkonfiguration und Iterationsschritt.

## 5.2.3 Algorithmus zur Fehlerminimierung

Allgemein wird mit einem Algorithmus die Vorgangsweise zur Lösung eines Problems bezeichnet. Die vorangegangenen Zellversuche dienten der Ermittlung von Kraft-Weg-Verläufen für jede einzelne der vier Testkonfigurationen. Damit das Fehlermaß zwischen den vorgegebenen Versuchskurven und den erzielbaren Simulationskurven auf ein Minimum reduziert wird, kann im Optimierungsprogramm LS-OPT zwischen zwei unterschiedlichen Fehlerminimierungsalgorithmen ausgewählt werden. Der sogenannte *Mean Square Error* Algorithmus baut auf der Fehlerminimierung zwischen der vorgegebenen Versuchskurve und der Simulationskurve auf, wobei die unterschiedlichen Y-Werte der beiden Kurven verglichen werden. Dieser Algorithmus setzt jedoch monoton steigende X-Werte der Versuchskurve voraus [45]. In der vorliegenden Arbeit wurde somit der 2. zur Verfügung stehende Fehlerminimierungsalgorithmus *Curve Mapping* verwendet, welcher den "Bereich" (die Fläche) zwischen den beiden Kurven auf ein Minimum reduziert.

## 5.2.4 Anzahl der Iterationsschritte

Eine sinnvolle Anzahl an Iterationsschritten besteht aus einem Kompromiss aus Genauigkeit und dem dazugehörigen Rechenaufwand. Bei der Optimierung der vier Testkonfigurationen ergaben sich durch die gewählte SRSM-Optimierungsstrategie mit den variierbaren Parametern insgesamt 64 Möglichkeiten je Konfiguration und Iterationsschritt. Da mit jedem zusätzlichen Iterationsschritt 64 neue Optimierungsmöglichkeiten hinzugefügt werden und sich somit der Speicherbedarf am Laufwerk sowie der Rechenaufwand am Cluster erhöht, muss die Anzahl an Iterationen sorgfältig ausgewählt werden. In Tabelle 5. 2 sind die Berechnungsdauer und der Speicherbedarf von vier identischen Optimierungen abgebildet, jedoch mit einer unterschiedlich gewählten Anzahl an Iterationsschritten.

Ontimierung	der N	<b>Aaterial</b>	parameter	
opuniciang	acri	iaccitat	purumeter	

Iterationsschritte Berechnungsdauer am Cluster		Benötigter Speicherbedarf
4	11 Stunden	15,8 Gigabyte
5	16,5 Stunden	27,9 Gigabyte
6	21,5 Stunden	37,3 Gigabyte
7	29 Stunden	46,5 Gigabyte

Tabelle 5. 2: Berechnungsdauer und Speicherbedarf in Abhängigkeit der Iterationsschritte

Mit 4 bzw. 5 Iterationsschritten stellte sich kein zufriedenstellendes Ergebnis ein, da das Endergebnis aufgrund der wenigen Iterationen noch zu sehr von der vorgegebenen Versuchskurve abwich. Bei 7 Iterationsschritten konnte im Vergleich zu 6 Iterationsschritten das Endergebnis nur mehr geringfügig verbessert werden. Die Genauigkeit des Endergebnisses, der hohe Speicherbedarf von fast 47 [GB] und die Berechnungsdauer von 29 [h] begründen die Entscheidung, dass für die folgenden Optimierungsvorgänge die Anzahl an Iterationen mit sechs festgelegt wurde.

## 5.3 Ausgangssituation vor der Optimierung

Um zu zeigen, wie sehr sich das Simulationsmodell der Zelle noch von der realen 18650 Lithium-Ionen Zelle hinsichtlich der mechanischen Eigenschaften unterscheidet, wurde zunächst eine Berechnung mit der Ausgangsbasis des Simulationsmodells durchgeführt. Die Ausgangsbasis des Zellmodells beinhaltet jene Materialparameter, welche bereits in Kapital 3.2 "Aufbau des Simulationsmodells" ausführlich beschrieben wurden. Es soll gezeigt werden, wie sehr sich die Kraft-Weg-Verläufe aus der Simulation noch von jenen aus den Batterieversuchen unterscheiden. Zudem sollen Möglichkeiten genannt werden, mit welchen Materialparametern die Verläufe aus den einzelnen Testkonfigurationen besser an die Verläufe aus den Versuchen angenähert werden könnten.

## 5.3.1 Crush in X-Richtung

In Abbildung 5. 5 ist der Vergleich von der Ausgangsbasis des Simulationsmodells und vom Versuch bei Belastung in radialer Richtung dargestellt. Es zeigt sich, dass die Kraftwerte der
Simulation ab 3 [mm] Verfomung kontinuierlich bis zum Erreichen des Kurzschlussbereiches bei 8 [mm] Verformungsweg ansteigen. Der aus den Versuchen gemittelte Kraft-Weg-Verlauf (rote Linie) steigt hingegen erst ab 5 [mm] Verformungsweg an, dafür aber steiler als jener der Simulation. Ein Grund dafür könnte sein, dass sich bei der realen Zelle in axialer Richtung in der Mitte ein dünnes Rohr befindet. Dieses Rohr besitzt im Inneren kein definiertes Material, was in der Simulation nicht nachgestellt werden konnte und der Grund dafür sein könnte, dass sich die Zelle in den Versuchen länger zusammenstauchen lässt, bis schlussendlich die Verformungskraft zu steigen beginnt. Außerdem fällt bei dieser Testkonfiguration der sehr geringe Streubereich aus dem Zellversuch "Crush in X-Richtung" auf, wodurch ein ebenfalls sehr schmaler Toleranzbereich für das Simulationsmodell resultiert, erkennbar an der oberern und unterern Grenzkurve (grüne bzw. gelbe Linie). Eine Möglichkeit, um die Simulation besser anzunähern, wäre beispielsweise die Anpassung der Spannungs-Dehnungs-Kurve des Aktivmaterials im Inneren der Zelle in den Material-Koordinatenrichtugen a und b (LCA und LCB), welche mit den Korodinatenrichtungen x und y der Zelle zusammenfallen, wie in Abbildung 5. 6 erkennbar. Eine weitere Möglichkeit liegt in der Anpassung des Elastizitätsmoduls EAAU des **Aktivmaterials** des Zellmodells.



Abbildung 5. 5: : Vergleich Ausgangsbasis Simulation – Zellversuch bei der Testkonfiguration "Crush in X-Richtung" / 0 [%] SOC



Abbildung 5. 6: Simulationsmodell der Zelle mit den dazugehörigen Koordinatensystemen

### 5.3.2 Crush in Z-Richtung

Der Vergleich von Simulation und Versuch bei Belastung in axialer Richtung ist in Abbildung 5. 7 dargestellt. Es zeigte sich, dass der Kraft-Weg-Verlauf vom Simulationsmodell bereits eine ähnliche Charakteristik besitzt wie der Verlauf aus dem Versuch "Crush in Z-Richtung". Jedoch fällt der Kraftanstieg im Versuch deutlich flacher aus als in der Simulation. Auch der Bereich, in dem die Verformungskraft im Versuch konstant bleibt, konnte in der Simulation nicht vollständig abgebildet werden. Die konstant gehaltene Verformungskraft im Versuch bei 3000 [N] zwischen 1,8 [mm] und 2,6 [mm] Verformungsweg könnte auf ein Knicken des Mantels der Zelle zurückführen sein. Eine Möglichkeit, um das konstante Kraftniveau in der Simulation zu berücksichtigen, wäre beispielsweise eine Veränderung der Materialparameter zu der Spannungs-Dehnungs-Kurve LCC des Aktivmaterials, welche für die plastische Verformung im Inneren der Zelle in axialer Richtung mit verantwortlich ist. Ein flacherer Kraftanstieg zu Beginn der Simulation könnte möglicherweise durch eine Reduktion der Spannungswerte für den plastischen Bereich der Polkappe realisiert werden. Eine Änderung der Streckgrenze des Mantels von 285 [N/mm<sup>2</sup>] zu kleineren Werten könnte sich ebenfalls positiv auf den Kraft-Weg-Verlauf des Simulationsmodells der Zelle auswirken.





Abbildung 5. 7: Vergleich Ausgangsbasis Simulation – Zellversuch bei der Testkonfiguration "Crush in Z-Richtung" / 0 [%] SOC

### 5.3.3 Crush Penetration

Bei der Testkonfiguration "Crush Penetration", wie in Abbildung 5. 8 dargestellt, zeigte sich, dass der Kraft-Weg-Verlauf des Simulationsmodells einen noch zu hohen Maximalwert der Verformungskraft aufweist. Der gemittelte Maximalwert aus den Versuchen beläuft sich auf 6000 [N], wo hingegen das Simulationsmodell einen Wert von mehr als 12000 [N] besitzt. Diesen um mehr als 100 [%] überhöhten Wert der Simulation gilt es mit Hilfe der Materialparameteroptimierung zu reduzieren. Vor allem die Material-Koordinatenrichtungen a und b beeinflussen die mechanischen Eigenschaften bei dieser Testkonfiguration, da durch den mittig wirkenden zylindrischen Prüfkörper diese beiden Koordinatenrichten am stärksten belastet werden. Durch die Penetration der Zelle wirken hohe Schubkräfte auf das Aktivmaterial sowie den Mantel der Zelle ein. Folglich lässt sich der Kraft-Weg-Verlauf des Simulationsmodells möglicherweise auch noch durch Veränderung des Schubmoduls GABU des Aktivmaterials zusätzlich positiv beeinflussen. Des Weiteren könnte sich die Schubspannungs-Dehnungs-Kurve LCS des Aktivmaterials mit ihren Materialparametern Sx1 – Sx5 und Sy1 – Sy5 positiv auf den Verlauf auswirken. Beim Mantel der Zelle könnte eine Reduktion der Streckgrenze zum

gewünschten Verlauf führen, da die Streckgrenze den Beginn der plastischen Verformung definiert. Welche Parameter den Kraft-Weg-Verlauf am meisten beeinflussen, wird in Kapitel 6 noch ausführlich erläutert.



Abbildung 5. 8: Vergleich Ausgangsbasis Simulation – Zellversuch bei der Testkonfiguration "Crush Penetration" / 0 [%] SOC

### 5.3.4 Crush 3-Punkt-Biegung

Die letzte Versuchsanordnung für die Zelle stellt die sogenannte Testkonfiguration "Crush 3 Punkt Biegung" dar, wie in Abbildung 5. 9 ersichtlich. Besonders auffallend bei diesem Versuch ist der Kraftrückgang, beginnend bei annähernd 7,5 [mm] Verformung, welcher jedoch keinen Einfluss auf den Spannungsverlauf besitzt. Die Spannung beginnt erst ab 15 [mm] Verformung abzufallen, wie bereits in Kapitel 4.3.3 beschrieben. Speziell dieser Rückgang der Verformungskraft ist in der Simulation schwer zu implementieren und muss durch eine Angabe eines Versagenskriteriums (FAIL) in der Materialkarte des Mantels berücksichtigt werden. Die Definition des FAIL-Wertes bezieht sich auf die plastische Dehnung des Mantels. Sobald das Material eine bestimmte plastische Verformung überschreitet, werden einzelne FE-Elemente der Komponente in der Simulation gelöscht [36]. In Abbildung 5. 9 ist der Kraft-Weg-Verlauf bei der Testkonfiguration "Crush 3 Punkt Biegung" bis zum Erreichen des Kurzschlussbereiches bei

15 [mm] dargestellt. Das Diagramm zeigt einen kontinuierlichen Kraftanstieg in der Simulation, ohne das es jedoch zu einem Kraftverlauf-Einbruch bei 7,5 [mm] Verformungsweg kommt.



Abbildung 5. 9: Vergleich Ausgangsbasis Simulation – Zellversuch bei der Testkonfiguration "Crush 3 Punkt Biegung" / 0 [%] SOC / 15 mm

Die Zuordnung eines Versagenskriteriums für die Testkonfiguration "Crush 3 Punkt Biegung" in der Materialkarte des Mantels wurde zunächst der Einfachheit halber außer Acht gelassen. Aus diesem Grund findet die Materialparameteroptimierung von 0 – 7,5 [mm] Verformungsweg statt, wie sie in Abbildung 5. 10 dargestellt ist. Es zeigt sich, dass sich das Simulationsmodell (blaue Linie) bereits in guter Näherung zum Mittelwert aus dem Versuch (rote Linie) befindet. Dennoch weist die Maximalkraft der Simulation (4500 [N]) eine Differenz von ca. 1300 [N] gegenüber dem Versuch (3200 [N]) auf, was einer Abweichung von annähernd 40 [%] bezogen auf den Mittelwert aus dem Versuch entspricht. Bei der 3 Punkt Biegung erfährt die Batteriezelle eine globale Belastung (Biegung) als auch eine lokale Belastung (Deformation durch Prüfkörper). Somit tragen alle Material-Koordinatenrichtungen (A/B/C/S) bei dieser Testkonfiguration zu den mechanischen Eigenschaften der Zelle bei, weshalb eine Änderung der Lastkurven des Aktivmaterials (LCA/LCB/LCC/LCS) in Betracht gezogen wurde. Der steile Anstieg im Kraftverlauf des Simulationsmodells lässt sich möglicherweise durch Veränderung

des Elastizitätsmoduls des Mantels sowie der dazugehörigen Streckgrenze zu niedrigeren Werten positiv beeinflussen.



Abbildung 5. 10: Vergleich Ausgangsbasis Simulation – Zellversuch bei der Testkonfiguration "Crush 3 Punkt Biegung" / 0 [%] SOC / 7,5 mm

# 6 ERGEBNISSE DES OPTIMIERUNGSPROZESSES

In den folgenden Teilkapiteln sollen die Endergebnisse aus dem Optimierungsprozess bei den vier unterschiedlichen Testkonfigurationen erläutert und veranschaulicht werden. Eine Gegenüberstellung von Ausgangssituation und optimiertem Zellmodell soll zeigen, wie sehr die Ergebnisse im Detail verbessert werden konnten. Es sollen diejenigen Materialparameter genannt werden, welche die Kraft-Weg-Verläufe bei der jeweiligen Testkonfiguration maßgeblich beeinflusst haben. Dabei kennzeichnet die hellblaue Linie das Endergebnis des optimierten Simulationsmodells, die rote Linie stellt den Mittelwert aus den Versuchen dar und die grüne bzw. gelbe Linie markieren den bereits genannten Streubereich aus den Zellversuchen heraus, welcher mit dem Toleranzbereich des Simulationsmodells gleichzusetzen ist. Allen Testkonfigurationen ist gemeinsam, dass sie bis zum eintretenden Kurzschlussbereich dargestellt sind.

## 6.1 Crush in X-Richtung

Bei der Testkonfiguration "Crush in X-Richtung" konnte mit der Optimierung der Materialparameter ein Simulationsergebnis erzielt werden, welches mit dem gemittelten Kraftverlauf aus dem Zellversuch nahezu vollständig übereinstimmt, wie in Abbildung 6. 1 ersichtlich ist. Bei dem Zellversuch "Crush in X-Richtung" kristallisierte sich ein sehr schmaler heraus, wodurch ein ebenfalls schmaler Toleranzbereich für Streubereich das Simulationsmodell entstanden ist. Dennoch konnte mit der Materialparameteroptimierung ein Kraft-Weg-Verlauf für das Simulationsmodell gefunden werden, welcher von 0 – 4 [mm] Verformung eine maximale negative Abweichung von ca. 40 [%] bezogen auf den Mittelwert aus den Versuchen aufweist und von 4 – 7,5 [mm] eine maximale positive Abweichung von ca. Diese prozentualen Abweichungen resultieren aus den hohen 13 [%] besitzt. Verformungskräften, welche in dieser Testkonfiguration auftreten. Die maximale Verformungskraft aus den Zellversuchen beträgt annähernd 67000 [N] bei 8 [mm] Verformungsweg. Bei 3 [mm] Verformung beträgt der Mittelwert aus den Versuchen 4371 [N], der Kraftwert aus der Simulation beträgt 2612 [N]. Daraus resultiert eine 40-prozentige Abweichung zwischen diesen beiden Kraftwerten bezogen auf den Mittelwert, welche in

Anbetracht der maximal erreichbaren Verformungskraft jedoch sehr gering ausfällt. Das verbesserte Optimierungsergebnis konnte durch eine Verringerung des Elastizitätsmoduls EAAU und des Schubmoduls GABU des Aktivmaterials im Vergleich zur Ausgangssituation realisiert werden. Die Optimierung des Elastizitätsmoduls und der Streckgrenze des Mantels bewirkte eine Anpassung der Kraft-Weg-Kurve der Simulation ab 3 [mm] Verformungsweg.



Abbildung 6. 1: Vergleich Zellversuch – Simulation mit Parameteroptimierung "Crush in X-Richtung" / 0 [%] SOC

Besonders deutlich wird der Optimierungsfortschritt, wenn die Ausgangsbasis des Simulationsmodells mit dem optimiertem Simulationsmodell nach erfolgter Materialparameteroptimierung verglichen wird, wie in Abbildung 6. 2 dargestellt. Die dunkelblaue Linie kennzeichnet die Ausgangsbasis des Simulationsmodells, die hellblaue Linie stellt das optimierte Endergebnis der Simulation dar und die rote Linie kennzeichnet wiederum den Mittelwert aus den Zellversuchen. Es zeigt sich, dass durch die getroffenen Materialparameteroptimierungen beispielsweise bei 5,75 [mm] Verformungsweg eine Verbesserung von mehr als 106 [%] gegenüber der Ausgangsbasis erzielt werden konnte. Somit lässt sich abschließend festhalten, dass die Optimierung der Materialparameter für die Testkonfiguration "Crush in X-Richtung" eine Verbesserung zu jedem Zeitpunkt darstellt.



Abbildung 6. 2: Vergleich Ausgangsbasis – Optimiertes Simulationsmodell "Crush in X-Richtung" / 0 [%] SOC

In Abbildung 6. 3 ist die Stauchung der Zelle in der Simulation dargestellt. Als Vergleich ist in Abbildung 6. 4 der dazugehörige Zellversuch "Crush in X-Richtung" abgebildet. Es zeigt sich, dass mit der Optimierung der Materialparameter ein Simulationsmodell erstellt werden konnte, welches die Verformung der Zelle detailgetreu wiedergibt, was sich ebenfalls an den übereinstimmenden Kraftverläufen aus Simulation und Versuch erkennen lässt.



Abbildung 6. 3: Verformung des Zellmodells in der Simulation bei der Testkonfiguration "Crush Penetration"



Abbildung 6. 4: Verformung einer 18650 Lithium-Ionen Zelle bei der Versuchsanordnung "Crush in X-Richtung"

### 6.2 Crush in Z-Richtung

In Abbildung 6. 5 ist der Kraft-Weg-Verlauf des Simulationsmodells mit den optimierten Materialparametern dargestellt. Dieser Kraftverlauf weist bereits deutliche Tendenzen in Richtung des realen Kraft-Weg-Verlaufes aus den Zellversuchen auf. Durch eine Anpassung des Elastizitätsmoduls und der Streckgrenze des Mantels konnte eine Verbesserung des Kraft-Weg-Verlaufes zu Beginn des Verformungsweges gegenüber der Ausgangsbasis realisiert werden. Die Anpassung des Schubmoduls GCAU des Aktivmaterials bewirkte eine Verbesserung des Kraftverlaufes gegen Ende des Verformungsweges hin. Zunächst steigt der Kraft-Weg-Verlauf des optimierten Simulationsmodells bis 1,8 [mm] Verformung nahezu linear an. Das erzielte Kraftniveau bei 2 [mm] Verformungsweg von 4330 [N] liegt, bezogen auf den Mittelwert, um ca. 51 [%] über jenem aus dem Versuch, welches einen Wert von 2870 [N] aufweist. Ab ca. 3,5 [mm] Verformung schlägt die positive Abweichung in eine negative Abweichung um. Dennoch konnte mit der Materialparameteroptimierung ein Kraftverlauf gefunden werden, welcher bereits eine deutliche Verbesserung im Vergleich zur Ausgangsbasis des Simulationsmodells darstellt. In Abbildung 6. 6 ist der Vergleich von Ausgangsbasis und optimiertem Simulationsmodell abgebildet.



Abbildung 6. 5: Vergleich Zellversuch – Simulation mit Parameteroptimierung "Crush in Z-Richtung" / 0 [%] SOC

Durch eine Anpassung der Spannungs-Dehnungs-Kurve LCC des Aktivmaterials, welche die plastische Verformung des Zellmodells in axialer Richtung beschreibt, konnte eine Verbesserung des optimierten Kraftverlaufes von mehr als 50 [%] gegenüber der Ausgangsbasis des Zellmodells erreicht werden.



Abbildung 6. 6: Vergleich Ausgangsbasis – Optimiertes Simulationsmodell "Crush in Z-Richtung" / 0 [%] SOC In Abbildung 6. 7 ist wiederum der Vergleich der Verformung der Zelle zwischen der Simulation und dem realen Verformungsbild aus den Zellversuch dargestellt. Das Knicken der Zelle konnte in der Simulation nicht nachgestellt werden, was sich auf das idealisierte Zellmodell in der Simulation zurückführen lässt.





Abbildung 6. 7: Verformung des Zellmodells in der Simulation bei der Testkonfiguration "Crush in Z-Richtung" im Vergleich mit der realen Verformung der 18650 Lithium-Ionen Zelle im Versuch [11]

### 6.2.1 Optimierung der Kraft-Weg-Verläufe mit Fokus auf "Crush in Z-Richtung"

Unterkapitel sollen Teilergebnisse dargestellt werden, die In diesem durch Materialparameteroptimierungen erzielt wurden, wobei das Hauptaugenmerk auf einer nochmaligen Verbesserung des Kraft-Weg-Verlaufes bei der Testkonfiguration "Crush in Z-Richtung" gelegen ist. Es wurde untersucht, ob die 51-prozentige Abweichung bei dieser Testkonfiguration weiter reduziert werden kann, ohne das es bei den restlichen drei Testkonfigurationen zu einer Verschlimmerung der Endergebnisse kommt. Schlussendlich zeigte sich, dass ein nochmals optimierter Kraftverlauf bei der Testkonfiguration "Crush in Z-Richtung" möglich ist, jedoch bei allen anderen Testkonfigurationen eine Verschlechterung der optimierten Endergebnisse eingetreten ist. In Abbildung 6. 8 ist der Kraft-Weg-Verlauf bei der Testkonfiguration "Crush in Z-Richtung" dargestellt. Durch eine erneute Reduktion des Elastizitätsmoduls ECCU des Aktivmaterials sowie der dazugehörigen Streckgrenze konnte ein Kraftverlauf erzielt werden, welcher zu Beginn des Verformungsweges bis ca. 1 [mm] identisch mit dem Kraftverlauf aus dem Versuch ansteigt. Auch die gemittelte Verformungskraft von annähernd 6400 [N] bei 4 [mm] aus dem Versuch konnte in der Simulation mit einer 99prozentigen Übereinstimmung erreicht werden.



Abbildung 6. 8: Vergleich Zellversuch - Bestes Simulationsergebnis bei der Testkonfiguration "Crush in Z-

Richtung"

Das Optimierungsergebnis in Abbildung 6. 8 weist jedoch kein ausgeprägtes konstantes Kraftniveau zwischen 1,8 und 2,6 [mm] Verformungsweg auf. Der Hauptgrund, warum in dieser Materialparameterzusammensetzung kein zufriedenstellendes Endergebnis gesehen wird, liegt in der Tatsache, dass bei allen anderen Testkonfigurationen eine Verschlimmerung der erzielbaren Ergebnisse eingetreten ist, wie die folgenden Abbildungen zeigen. Die dunkelblaue Linie markiert dabei den Kraft-Weg-Verlauf, welcher durch die Materialparameter erzielt wurde, die ein verbessertes Simulationsergebnis bei der Testkonfiguration "Crush in Z-Richtung" ermöglichten. Die hellblaue Linie stellt das das Endergebnis dar, welches bei der Optimierung der Materialparameter betreffend aller Testkonfigurationen erzielt wurde und die rote Linie kennzeichnet wiederum den gemittelten Kraftverlauf aus den Zellversuchen. Es zeigte sich, dass bei der Testkonfiguration "Crush in X-Richtung", dargestellt in Abbildung 6. 9, durch die ausgewählten Materialparameter eine deutliche Verschlechterung des Endergebnisses eingetreten ist. Bei 4 [mm] Verformungsweg stimmt das gesamtheitliche Optimierungsergebnis mit dem Kraftverlauf aus den Versuchen überein (5250 [N]), hingegen weicht der Kraftverlauf mit Fokus auf Crush in Z-Richtung mit 27900 [N] um mehr als 430 [%] von dem Mittelwert aus den Versuchen ab. Die erhöhten Parameterwerte des Elastizitätsmoduls sowie des Schubmoduls GABU des Aktivmaterials wirken sich negativ auf den Kraftverlauf des Simulationsergebnisses bei der Testkonfiguration "Crush in X-Richtung" aus.



Abbildung 6. 9: Kraft-Weg-Verlauf bei der Testkonfiguration "Crush in X-Richtung" mit Fokus der Optimierung hinsichtlich Crush in Z-Richtung / Im Vergleich dazu der optimierte Kraftverlauf gültig für alle Testkonfigurationen

In Abbildung 6. 10 sind die Simulationsergebnisse bei der Testkonfiguration "Crush Penetration" dargestellt. Es zeigte sich, dass bei Verwendung der Materialparameter, welche ein optimales Ergebnis beim Crush in Z-Richtung ergeben, eine 170-prozentige Verschlechterung des Ergebnisses bei der Testkonfiguration "Crush Penetration" eingetreten ist. Die Erhöhung des Elastizitätsmoduls EAAU und des Schubmoduls GABU des Aktivmaterials sorgen dafür, dass ein steiler Kraftverlauf-Anstieg ab 1 [mm] Verformungsweg bis zum Einsetzen des Kurzschlussbereiches stattfindet.



Abbildung 6. 10: Kraft-Weg-Verlauf bei der Testkonfiguration "Crush Penetration" mit Fokus der Optimierung hinsichtlich Crush in Z-Richtung / Im Vergleich dazu der optimierte Kraftverlauf gültig für alle Testkonfigurationen

Die letzte der vier Testkonfigurationen ist der "Crush 3 Punkt Biegung", dargestellt in Abbildung 6. 11. Auch in diesem Fall stellt sich mit den gewählten Materialparametern eine massive Verschlechterung des Ergebnisses ein. Gegen Ende des Verformungsweges bei 7,5 [mm] konnte eine Abweichung gegenüber dem gesamtheitlich gültigen Optimierungsergebnisses von mehr als 140 [%] festgestellt werden. Die Streckgrenze des Mantels wurde von ursprünglich 247,27 [N/mm<sup>2</sup>] auf 651,66 [N/mm2] angehoben, weiter wurde der Schubmodul GABU des Aktivmaterials erhöht, wodurch sich die Steigerung des Kraftverlaufes bei der Testkonfiguration "Crush 3 Punkt Biegung" begründen lässt.



Abbildung 6. 11: Kraft-Weg-Verlauf bei der Testkonfiguration "Crush 3 Punkt Biegung" mit Fokus der Optimierung hinsichtlich Crush in Z-Richtung / Im Vergleich dazu der optimierte Kraftverlauf gültig für alle Testkonfigurationen

In Tabelle 6. 1 sind die gesamten Materialparameter, sowohl für die gesamtheitlich gültigen Optimierungsergebnisse, als auch für den Fall des optimalen Endergebnisses in der Testkonfiguration "Crush in Z-Richtung" aufgelistet. Erkennbar ist, dass besonders jene Materialparameter erhöht wurden, welche zu einer erhöhten Gesamtsteifigkeit des Simulationsmodells in den Material-Koordinatenrichtungen a und b beitragen. Beispielsweise der Elastizitätsmodul EAAU und der Schubmodul GABU des Aktivmaterials. Hingegen wurde der Elastizitätsmodul ECCU des Aktivmaterials markant verringert, welcher mitunter zum Erzielen des optimierten Kraftverlaufs bei der Testkonfiguration "Crush in Z-Richtung" beigetragen hat.

Komponenten des Zellmodells	Material- parameter	Werte gültig für die	Fokus auf ein optimales
		gesamtheitlichen	Ergebnis bei Crush in Z-
		Optimierungsergebnisse	Richtung
Boden und Mantel	EmodM	28134,55 [N/mm²]	13412,76 [N/mm <sup>2</sup> ]
	SigYM	247,27 [N/mm <sup>2</sup> ]	651,66 [N/mm <sup>2</sup> ]
	DM	0,22 [mm]	0,22 [mm]
Deckel und	EmodD	68338,45 [N/mm²]	24561,55 [N/mm²]
Pluspol	SigYD	1935,02 [N/mm²]	671,22 [N/mm <sup>2</sup> ]

Polkappe	EmodPK	85,28 [N/mm²]	69,90 [N/mm²]
	SigYPK	924,59 [N/mm <sup>2</sup> ]	145,68 [N/mm²]
	EtanPK	44,48 [N/mm²]	48,78 [N/mm²]
Aktivmaterial	Emod	304,98 [N/mm <sup>2</sup> ]	675,18 [N/mm²]
	SigY	556,64 [N/mm²]	46,57 [N/mm²]
	PR	0,41 [-]	0,41 [-]
	EAAU	374,59 [N/mm²]	1878,99 [N/mm²]
	EBBU	1647,54 [N/mm²]	1967,10 [N/mm²]
	ECCU	226,54 [N/mm <sup>2</sup> ]	2,51 [N/mm²]
	GABU	22,90 [N/mm²]	973,70 [N/mm²]
	GBCU	7,81 [N/mm²]	7,84 [N/mm²]
	GCAU	1449,47 [N/mm²]	2355,43 [N/mm <sup>2</sup> ]

Tabelle 6. 1: Materialparameter gültig für gesamtheitliche Optimierungsergebnisse / Materialparameter mitFokus auf optimales Simulationsergebnis bei der Testkonfiguration "Crush in Z-Richtung"

### 6.3 Crush Penetration

In Abbildung 6. 12 ist das Ergebnis des Optimierungsprozesses bei der Testkonfiguration "Crush Penetration" dargestellt. Es zeigt sich, dass sich der Kraft-Weg-Verlauf des Simulationsmodells bis annähernd 3 [mm] Verformung innerhalb des definierten Toleranzbereiches befindet. Von 3 bis ca. 6,7 [mm] Verformungsweg besitzt die Simulation eine maximale negative Abweichung von annähernd 26 [%] bezogen auf den gemittelten Kraftverlauf aus den Versuchen. Ab 6,7 [mm] weicht das Simulationsergebnis nur mehr geringfügig, in etwa 2,5 [%], vom Verlauf des Mittelwertes ab. Betrachtet man jedoch die Abweichung der Simulation bezogen auf den Toleranzbereich, so zeigt sich, dass sich der Simulationsverlauf nur zwischen 3,1 [mm] und 5,9 [mm] außerhalb der festgelegten unteren Grenzkurve befindet. Das bedeutet, dass mit der Optimierung der Materialparameter ein Simulationsmodell der Zelle gefunden werden konnte, welches den vorgegebenen Kraft-Weg-Verlauf zu 60 [%] erfüllt und nahezu den identischen Kraftverlauf aus den Zellversuchen aufweist. Dieses optimale Simulationsergebnis konnte durch eine Verringerung des Elastizitätsmoduls EAAU sowie des Schubmoduls GABU des Aktivmaterials erzielt werden.



Abbildung 6. 12: Vergleich Zellversuch – Simulation mit Parameteroptimierung "Crush Penetration" / 0 [%] SOC

Betrachtet man den Vergleich von Ausgangsbasis und optimierten Simulationsmodell, dargestellt in Abbildung 6. 13, wird der Optimierungsfortschritt noch deutlicher. Am Beginn des eintretenden Kurzschlussbereiches bei 7 [mm] Verformungsweg konnte eine Verbesserung des Simulationsergebnisses von mehr als 107 [%] gegenüber der Ausgangsbasis erzielt werden.



Abbildung 6. 13: Vergleich Ausgangsbasis – Optimiertes Simulationsmodell "Crush Penetration" / 0 [%] SOC

In Abbildung 6. 14 ist die Verformung des Simulationsmodells der Zelle dargestellt, im Vergleich dazu ist in Abbildung 6. 15 die tatsächliche Deformation der 18650 Lithium-Ionen Zelle aus der Versuchsanordnung "Crush Penetration" abgebildet. Es zeigt sich, dass mit den gewählten Materialparametern ein Simulationsergebnis erzielt werden konnte, welches die Deformation im Bereich des Mantels und des Aktivmaterials genau wiedergibt, wiederum erkennbar an der Übereinstimmung von Kraft-Weg-Verlauf aus Versuch und Simulation.



Abbildung 6. 14: Verformung des Zellmodells in der Simulation bei der Testkonfiguration "Crush Penetration"



Abbildung 6. 15: Verformung einer 18650 Lithium-Ionen Zelle bei der Versuchsanordnung "Crush Penetration"

[11]

## 6.4 Crush 3-Punkt-Biegung

Bei der Testkonfiguration "Crush 3 Punkt Biegung", dargestellt in Abbildung 6. 16, konnte ein ebenfalls verbessertes Optimierungsergebnis erzielt werden. Durch eine Reduktion der Streckgrenze des Mantels sowie einer Verringerung des quasistatischen Elastizitätsmoduls der Polkappe und des Schubmoduls GABU des Aktivmaterials konnte eine Verbesserung des

Simulationsergebnisses gegenüber der Ausgangsbasis erzielt werden. Der Kraft-Weg-Verlauf der Simulation befindet sich bis 3 [mm] Verformungsweg noch innerhalb des Toleranzbereiches, weist bei 7,5 [mm] Verformungsweg jedoch eine negative Abweichung von 24 [%] in Bezug auf den Mittelwert des Kraftverlaufes aus den Zellversuchen auf. Eine Unterschreitung des Kraftverlaufes ist jedoch vorteilhafter anzusehen als eine Überschreitung des gemittelten Kraft-Weg-Verlaufes aus den Versuchen. Der Grund dafür ist, dass höhere Kraftwerte ein steiferes Simulationsmodell bedeuten. Somit könnte bei einer tatsächlichen Beschädigung der 18650 Lithium-Ionen Zelle bereits ein elektrisches Versagen eintreten, obwohl in der Simulation aufgrund der erhöhten Steifigkeit des Zellmodells noch kein Versagen festgestellt worden wäre. Dadurch, dass sich die einzelnen Materialparameter gegenseitig stark beeinflussen, ist es besonders schwierig, für alle vier Testkonfigurationen ein optimales Simulationsergebnis zu erreichen, welches sich innerhalb des definierten Toleranzbereiches befindet.



Abbildung 6. 16: Vergleich Zellversuch – Simulation mit Parameteroptimierung "Crush 3 Punkt Biegung" / 0 [%] SOC

In Abbildung 6. 17 ist die Verformung des Simulationsmodells dargestellt. Der Kraftverlauf der Simulation besitzt eine negative Abweichung in Bezug auf den gemittelten Kraftverlauf aus dem Versuch. Das bedeutet, dass die Gesamtsteifigkeit des Simulationsmodells unterhalb der

Steifigkeit der 18650 Lithium-Ionen Zelle liegt. Dies lässt sich auch im Vergleich mit der realen Deformation der Zelle feststellen, abgebildet in Abbildung 6. 18. Der Mantel weist in der Simulation eine höhere Verformung im Bereich des Prüfkörpers auf, erkennbar an den Einbuchtungen, die sich seitlich und unterhalb des eindringenden Prüfkörpers bilden. Im Vergleich dazu weist die 18650 Lithium-Ionen Zelle in diesem Bereich keine nennenswerten Einbuchtungen auf.



Abbildung 6. 17: Verformung des Zellmodells in der Simulation bei der Testkonfiguration "Crush Penetration"



Abbildung 6. 18: Verformung einer 18650 Lithium-Ionen Zelle bei der Versuchsanordnung "Crush 3 Punkt Biegung" [11]

In Abbildung 6. 19 ist der Vergleich von dem Kraftverlauf des optimierten Simulationsmodells mit dem Kraftverlauf der Ausgangsbasis des Zellmodells dargestellt. Deutlich erkennbar ist, dass

durch die getroffenen Materialparameterveränderungen ein verbessertes Simulationsergebnis erzielt werden konnte. Betrug die Abweichung in der Simulation bezogen auf den gemittelten Kraftverlauf aus dem Versuch bei der Ausgangsbasis noch 37 [%], konnte mit der Optimierung die Abweichung auf 24 [%] minimiert werden. Somit lässt sich auch an dieser Stelle festhalten, dass durch die Optimierung ein verbessertes Simulationsmodell von 13 [%] gefunden wurde.



Abbildung 6. 19: Vergleich Ausgangsbasis – Optimiertes Simulationsmodell "Crush 3 Punkt Biegung" / 0 [%] SOC

## 6.5 **Optimierung der Spannungs-Dehnungs-Kurven im plastischen Bereich der** äußeren Zellkomponenten

Unter den äußeren Zellkomponenten werden jene Komponenten des Simulationsmodells verstanden, die das Aktivmaterial umgeben. Dazu zählen der Boden, der Mantel sowie der Deckel des Simulationsmodells inklusive Pluspol. Auch die Polkappe zählt zu den äußeren Zellkomponenten, deren plastischer Verformungsbereich ist im Gegensatz zu den restlichen Zellkomponenten jedoch durch die Angabe der Steigung einer Geraden nach dem Erreichen der Streckgrenze gekennzeichnet. Die Optimierung dieser Spannungs-Dehnungs-Kurven ist von großer Bedeutung für das Simulationsmodell, da bei allen vier Testkonfigurationen eine plastische Verformung der Zelle eingetreten ist, wie in Abbildung 6. 20 beispielhaft gezeigt an der Testkonfiguration "Crush 3 Punkt Biegung". Im linken Bild ist die Deformation auf der

Oberseite des Zellmodells zu erkennen, welche durch den eindringenden Prüfkörper entstanden ist. Im rechten Bild ist die Unterseite des Zellmodells abgebildet. Durch die beiden zylindrischen Auflager bei der Testkonfiguration "Crush 3 Punkt Biegung" entsteht auch hier eine plastische Deformation des Zellmodells. Somit ist die Optimierung der Spannungs-Dehnungs-Kurven für den plastischen Verformungsbereich bei den Zellkomponenten wichtig, da sie das optimierte Simulationsergebnis maßgeblich beeinflussen.



Abbildung 6. 20: Plastische Verformung des Simulationsmodells der Zelle am Beispiel "Crush 3 Punkt Biegung"

Damit die gewünschten mechanischen Eigenschaften der 18650 Zelle in der Simulation nachgestellt werden konnten, wurden diese Spannungs-Dehnungs-Kurven variiert. In Abbildung 6. 21 sind die Verläufe für die Komponenten "Boden" und "Mantel" von der Ausgangsbasis des Simulationsmodells und vom optimierten Zellmodell dargestellt. Es zeigt sich, dass der anfänglich gewählte Verlauf mit kontinuierlich steigenden Spannungswerten (blaue Linie) deutlich vom optimierten Verlauf (rote Linie) abweicht. Durch den flach gewählten Verlauf bei der Optimierung bis annähernd 16,65 [%] Dehnung und dem im Anschluss steilen Anstieg der Spannungswerte bis zur maximalen Dehnung von 25 [%] konnte eine Verbesserung der mechanischen Eigenschaften bei den Testkonfigurationen "Crush in X-Richtung" und "Crush Penetration" erzielt werden.



Spannungs-Dehnungs-Kurve im plastischen Bereich für die Komponenten "Boden" und "Mantel"

Abbildung 6. 21: Spannungs-Dehnungs-Kurve im plastischen Bereich bei den Komponenten "Boden" und "Mantel"

In Abbildung 6. 22 ist die Spannungs-Dehnungs-Kurve der Komponente "Deckel mit Pluspol" für den plastischen Bereich dargestellt. Dabei fällt auf, dass die Verläufe von Ausgangsbasis (blaue Linie) und Optimierung (rote Linie) vollkommen identisch sind, jedoch bei der Optimierung des Zellmodells für die Streckgrenze des Deckels ein höherer Startwert festgelegt wurde. Die Streckgrenze des Deckels betrug bei der Ausgangsbasis 750 [N/mm<sup>2</sup>], hingegen stellte sich bei der Optimierung ein Startwert von 1935,02 [N/mm<sup>2</sup>] ein, was einer Erhöhung von 1185,02 [N/mm<sup>2</sup>] in jedem Punkt entspricht. Grund dafür ist folgender, dass bei der Optimierung der Elastizitätsmodul des Mantels sowie dessen Streckgrenze im Vergleich zur Ausgangsbasis des Zellmodells deutlich reduziert wurden. Um dennoch einen steilen Kraftanstieg zu Beginn des Verformungsweges bei der Testkonfiguration "Crush in Z-Richtung" realisieren zu können, wurden die Werte der Spannungs-Dehnungs-Kurve für den plastischen Verformungsbereichs des Deckels angehoben.



Spannungs-Dehnungs-Kurve im plastischen Bereich für die Komponente "Deckel mit Pluspol"

Abbildung 6. 22: Spannungs-Dehnungs-Kurve im plastischen Bereich bei der Komponente "Deckel mit Pluspol"

## 6.6 **Optimierung der Spannungs-Dehnungs-Kurven im plastischen Bereich des** Aktivmaterials

Ein weiteres wichtiges Kriterium, um die mechanischen Eigenschaften des Zellmodells zu beeinflussen, stellen die Normalspannungs-Dehnungs-Kurven (LCA/LCB/LCC) sowie die Schubspannungs-Dehnungs-Kurve LCS des Aktivmaterials dar. Diese Spannungs-Dehnungs-Kurven beeinflussen die plastische Verformbarkeit des Aktivmaterials nach dem Erreichen der Streckgrenze. Die Kurven werden für jeden Optimierungsschritt neu erstellt, wie bereits in Kapitel 5.2.1 erläutert wurde. In Abbildung 6. 23 sind die Normalspannungs-Dehnungs-Kurven LCA und LCB des Aktivmaterials dargestellt, welche in den Material-Koordinatenrichtungen a und b wirken. Es ist der Vergleich zwischen der Ausgangsbasis und dem optimierten Zellmodell abgebildet. Erkennbar ist, dass die Kurven bis ca. 28 [%] plastische Dehnung annähernd ident verlaufen, jedoch anschließend die Spannungs-Dehnungs-Kurve aus der Optimierung (rote Linie) weiter kubisch ansteigt, wo hingegen die Kurve der Ausgangsbasis (blaue Linie) nahezu linear ansteigt. Die optimierten Spannungs-Dehnungs-Kurven LCA und LCB tragen zum verbesserten Simulationsergebnis bei den Testkonfigurationen "Crush 3 Punkt Biegung" und "Crush Penetration" bei.



Spannungs-Dehnungs-Kurven LCA und LCB im plastischen Bereich des Aktivmaterials

Abbildung 6. 23: Vergleich der Spannungs-Dehnungs-Kurven LCA und LCB von optimiertem Zellmodell und Ausgangsbasis der Zelle

Abbildung 6. 24 zeigt die Normalspannungs-Dehnungs-Kurve LCC des Aktivmaterials von der Ausgangsbasis sowie jene aus der Optimierung. Hier zeigt sich, dass die Kurve des optimierten Simulationsmodells am Ende der plastischen Verformung bei 89 [%] einen wesentlich höheren Spannungswert aufweist (700 [N/mm<sup>2</sup>]) als die Spannungs-Dehnungs-Kurve des Aktivmaterials von der Ausgangsbasis, welche einen Endwert von ca. 200 [N/mm<sup>2</sup>] besitzt. Aus den beiden Kurven lässt sich erkennen, dass der Verlauf der Optimierung (rote Linie) zunächst nur gering und ab ca. 60 [%] plastische Verformung steil zu steigen beginnt. Die Kurve der Ausgangsbasis (blaue Linie) steigt hingegen nur zwischen 30 und 45 [%] plastische Dehnung an und verläuft von 0 – 30 [%] und 45 – 89 [%] annähernd linear. Bei der Optimierung der Materialparameter wurden die Werte des Elastizitätsmoduls und der Streckgrenze des Mantels gegenüber der Ausgangsbasis des Simulationsmodells verringert, damit bei den Testkonfigurationen "Crush Penetration" und "Crush 3 Punkt Biegung" ein verbessertes Simulationsergebnis erzielt werden konnte. Durch diese Reduktion der Gesamtsteifigkeit des Zellmodells wurde bei der Testkonfiguration "Crush in Z-Richtung" die notwendige Verformungskraft bei Eintritt des Kurzschlussbereiches unterschritten. Die optimierte Spannungs-Dehnungs-Kurve LCC des Aktivmaterials bewirkt, dass die Werkstoffsteifigkeit des Aktivmaterials in Material-

Koordinatenrichtung c erhöht wird, wodurch das nötige Maximalkraftniveau wiederum erreicht werden konnte.



Abbildung 6. 24: Vergleich der Spannungs-Dehnungs-Kurve LCC von optimiertem Zellmodell und Ausgangsbasis der Zelle

Eine weitere, im Aktivmaterial implementierte Spannungs-Dehnungs-Kurve, ist die Schubspannungs-Dehnungs-Kurve LCS. In Abbildung 6. 25 ist der Vergleich der Kurven LCS von der Ausgangsbasis und vom optimierten Simulationsmodell dargestellt. Dabei weist die Spannungs-Dehnungs-Kurve des optimierten Simulationsmodells (rote Linie) einen deutlichen Spannungsanstieg zwischen 20 und 45 [%] plastischer Dehnung auf. Die Kurve der Ausgangsbasis (blaue Linie) steigt von 5 – 25 [%] an, verläuft von 25 – 50 [%] linear und steigt anschließend auf einen Endwert von ca. 210 [N/mm<sup>2</sup>] bei 89 [%] plastischer Verformung an. Der Endwert bei der Optimierung beläuft sich hingegen auf 300 [N/mm<sup>2</sup>] und übertrifft die Ausgangsbasis um 90 [N/mm<sup>2</sup>]. In Kombination mit der Verringerung des Elastizitätsmoduls des Mantels sowie des quasistatischen Elastizitätsmoduls der Polkappe, konnte bei der Testkonfiguration "Crush 3 Punkt Biegung" ein verbesserter Kraft-Weg-Verlauf realisiert werden. Wie bereits erwähnt, beeinflussen sich die Materialparameter sehr stark untereinander. Bei der Testkonfiguration "Crush 3 Punkt Biegung" setzt die zusammengesetzte Beanspruchung aus lokaler Deformation und Biegung eine ausreichend hohe

84

Werkstoffsteifigkeit bei Schubbelastung voraus, woraus sich der Verlauf der optimierten Spannungs-Dehnungs-Kurve LCS erklären lässt.



Abbildung 6. 25: Vergleich der Spannungs-Dehnungs-Kurve LCS von optimiertem Zellmodell und Ausgangsbasis der Zelle

Eine Auflistung der veränderten Materialparameter soll abschließend zeigen, wie die Werte der Ausgangsbasis des Zellmodells (vgl. Kapitel 3.2) im Vergleich zum optimierten Zellmodell verändert worden sind. In Tabelle 6. 2 ist die Gegenüberstellung der Materialparameter von Ausgangsbasis und optimiertem Simulationsmodell dargestellt. In Kombination mit den optimierten Spannungs-Dehnungs-Kurven des plastischen Verformungsbereiches von den einzelnen Komponenten des Zellmodells konnte ein gesamtheitlich optimiertes und verbessertes Simulationsmodell der 18650 Lithium-Ionen-Zelle erstellt werden.

Komponenten	Material-	Werte der	Werte des optimierten
des Zellmodells	parameter	Ausgangsbasis	Zellmodells
Boden und Mantel	EmodM	210000 [N/mm <sup>2</sup> ]	28134,55 [N/mm²]
	SigYM	285 [N/mm²]	247,27 [N/mm <sup>2</sup> ]
	DM	0,15 [mm]	0,22 [mm]

Deckel und	EmodD	10000 [N/mm²]	68338,45 [N/mm²]
Pluspol	SigYD	750 [N/mm²]	1935,02 [N/mm <sup>2</sup> ]
Polkappe	EmodPK	8523 [N/mm²]	85,28 [N/mm²]
	SigYPK	319 [N/mm²]	924,59 [N/mm²]
	EtanPK	150 [N/mm²]	44,48 [N/mm²]
Aktivmaterial	Emod	1400 [N/mm²]	304,98 [N/mm²]
	SigY	1,7 [N/mm²]	556,64 [N/mm²]
	PR	0,33 [-]	0,41 [-]
	EAAU	1000 [N/mm²]	374,59 [N/mm²]
	EBBU	1000 [N/mm²]	1647,54 [N/mm²]
	ECCU	10 [N/mm²]	226,54 [N/mm²]
	GABU	500 [N/mm²]	22,90 [N/mm²]
	GBCU	500 [N/mm <sup>2</sup> ]	7,81 [N/mm <sup>2</sup> ]
	GCAU	10 [N/mm <sup>2</sup> ]	1449,47 [N/mm <sup>2</sup> ]

Tabelle 6. 2: Gegenüberstellung der Materialparameter von der Ausgangsbasis und dem optimierten Zellmodell

Zusammenfassung

# 7 ZUSAMMENFASSUNG

In der vorliegenden Arbeit wurden die mechanischen Eigenschaften einer 18650 Lithium-Ionen Zelle analysiert, um in weiterer Folge optimale Materialeigenschaften für ein Simulationsmodell einer 18650er Zelle zu generieren. Aus einer Reihe an Messdaten wurden gültige Kraft-Weg-Verläufe für verschiedene Testkonfigurationen erstellt, die zur Validierung der mechanischen Eigenschaften des Simulationsmodells dienen. Die Auswertungen von Spannungs-Weg-Verläufen führten zur Identifikation eines elektrischen Versagenskriteriums für das Simulationsmodell der Zelle, welches den einsetzenden Spannungsabfall in der Zelle markiert. Das Hauptaugenmerk dieser Arbeit lag in der Optimierung von Materialparametern, damit dem Simulationsmodell die identischen mechanischen Eigenschaften zugeordnet werden können wie der realen 18650 Lithium-Ionen Zelle. Durch die optimierten Testkonfigurationen Materialparameter konnte allen ein verbessertes bei Simulationsergebnis erzielt werden. Mittels Variation der Spannungs-Dehnungs-Kurven für den plastischen Verformungsbereich in den einzelnen Zellkomponenten konnten mit dem optimierten Simulationsmodell mechanische Deformationen realisiert werden, wie sie auch bei den Zellversuchen eingetreten sind. Als Endergebnis dieser Arbeit kann ein Simulationsmodell gesehen werden, welches die Kraft-Weg-Verläufe aus den Zellversuchen in realistischer Weise wiedergibt, wodurch ein mögliches Versagen der Zelle abgebildet werden kann. In den erhöhten Abweichungen von Versuch und Simulation in einigen Testkonfigurationen wird auch das weitere Verbesserungspotential des Simulationsmodells gesehen. Ein Austausch einzelner Materialien in den Komponenten ist nur ein möglicher Ansatz, welcher zur Erzielung genauerer Ergebnisse verfolgt werden könnte.

# 8 AUSBLICK

Mit der Optimierung der Materialparameter konnte für die Testkonfigurationen "Crush in X-Richtung" und "Crush Penetration" ein Zellmodell gefunden werden, welches die vorgegebenen Kraft-Weg-Verläufe aus diesen beiden Zellversuchen mit minimalen Abweichungen wiedergibt. Auch bei den Testkonfigurationen "Crush in Z-Richtung" sowie "Crush 3 Punkt Biegung" konnten Verbesserungen gegenüber der Ausgangsbasis des Zellmodells erreicht werden, jedoch fallen die Abweichungen mit 51 [%] und 24 [%] gegenüber den gemittelten Kraftverläufen aus den Versuchen deutlich höher aus als bei den beiden anderen Testkonfigurationen. Diese Abweichungen bei den Testkonfigurationen "Crush in Z-Richtung" sowie "Crush 3 Punkt Biegung" lassen sich gegebenenfalls durch folgende Änderungen noch positiv beeinflussen.

Verbesserungsmöglichkeiten bei der Testkonfiguration "Crush in Z-Richtung":

- 1.) Änderung des Materialmodells im Inneren der Zelle im Bereich der Polkappe
- 2.) Modellierung eines dünnen Rohres in der Mitte der Zelle

Verbesserungsmöglichkeiten bei der Testkonfiguration "Crush 3 Punkt Biegung":

3.) Änderung des Materialmodells im Bereich des Aktivmaterial

## 8.1 Änderung des Materialmodells im Bereich der Polkappe

Eine Möglichkeit, um den Kraft-Weg-Verlauf des Simulationsmodells bei der Testkonfiguration "Crush in Z-Richtung" besser an den gemittelten Kraftverlauf aus dem Zellversuch anzunähern, wäre eine Änderung des Materialmodells im Inneren der Zelle im Bereich der Polkappe. Wie bereits in Kapitel 6 gezeigt wurde, besitzt das Simulationsmodell trotz der durchgeführten Materialparameteroptimierung eine positive Abweichung von 51 [%] in Bezug auf den gemittelten Kraftverlauf aus den Versuchen. Damit der Kraftverlauf-Anstieg in der Simulation zu Beginn des Verformungsweges weniger steil ausfällt, könnte das Aktivmaterial im Polkappenbereich durch ein Materialmodell ersetzt werden, welches die geringere Materialsteifigkeit der 18650 Lithium-Ionen-Zelle zu Beginn der Verformung besser

wiedergibt. Beispielsweise könnte die Verwendung der Materialkarte MAT\_CRUSHABLE-FOAM zum gewünschten Ergebnis führen, welche die elastisch-plastischen Eigenschaften eines Verformungsschaumes wiederspiegelt und sich besonders für Druckbelastungen eignet. In Abbildung 8. 1 ist der Bereich gekennzeichnet, in dem sich eine Änderung des Materialmodells vorteilhaft auf den Kraftverlauf auswirken könnte.



Änderung des Materialmodells im Inneren der Zelle im Bereich der Polkappe zur möglichen Verbesserung des Kraft-Weg-Verlaufes bei der Testkonfiguration "Crush in Z-Richtung"

Abbildung 8. 1: Materialmodelländerung bei dem Simulationsmodell der Zelle für verbesserten Kraftverlauf bei der Testkonfiguration "Crush in Z-Richtung"

### 8.2 Modellierung eines dünnen Rohres in der Mitte der Zelle

Eine weitere Möglichkeit für ein verbessertes Simulationsergebnis bei der Testkonfiguration "Crush in Z-Richtung" wäre die Implementierung eines dünnen Röhrchens in der Mitte des Simulationsmodells der Zelle, wie in Abbildung 8. 2 angedeutet ist. Durch die Modellierung dieses Röhrchens könnte der benötigte geringere Kraftverlauf-Anstieg in der Simulation zu Beginn der Verformung realisiert werden, da sich in dem Rohr kein definiertes Material befindet, was zu einer Senkung der Gesamtsteifigkeit des Simulationsmodells führt. Dem Rohr selbst könnte beispielsweise die Materialcharakteristik eines Stahlwerkstoffes zugeordnet werden. Eine im Anschluss an die Implementierung des Rohres durchgeführte Materialparameteroptimierung könnte zeigen, ob sich die gewünschte Verbesserung bei der Testkonfiguration "Crush in Z-Richtung" einstellt, ohne dass es bei den anderen Testkonfigurationen zu einer Verschlechterung des Optimierungsergebnisses kommt.



Rohr in der Mitte des Zellmodells zur möglichen Verbesserung des Kraft-Weg-Verlaufes bei der Testkonfiguration "Crush in Z-Richtung"

Abbildung 8. 2: Rohr in der Mitte des Zellmodells Zelle für verbesserten Kraftverlauf bei der Testkonfiguration "Crush in Z-Richtung"

## 8.3 Änderung des Materialmodells im Bereich des Aktivmaterials

Damit bei der Testkonfiguration "Crush 3 Punkt Biegung" die Abweichung von 24 [%] aus dem optimierten Kraftverlauf des Simulationsmodells nochmals verbessert wird, könnte eine Änderung des Aktivmaterials im Inneren der Zelle zu dem gewünschten Ergebnis führen, wie in Abbildung 8. 3 dargestellt ist. Der rot markierte Bereich, welcher sich über den gesamten Umfang des Zellmodells erstreckt, könnte durch ein Material ersetzt werden, welches beispielsweise eine höhere Werkstoffsteifigkeit als das Aktivmaterial aufweist. Somit könnte der zu flach ansteigende Kraftverlauf zu Beginn der Verformung bei der Testkonfiguration "Crush 3 Punkt Biegung" verbessert werden.



Abbildung 8. 3: Mögliche Änderung des Materialmodells im Bereich des Aktivmaterials der Zelle für verbesserten Kraftverlauf bei der Testkonfiguration "Crush 3 Punkt Biegung"

Literaturverzeichnis

# 9 LITERATURVERZEICHNIS

- [1] C. Mi, M. A. Masrur, D. W. Gao und K. Werner, Hybridkraftfahrzeuge: Grundlagen und Anwendungen mit Perspektiven für die Praxis, Weinheim: Wiley-VCH, 2014.
- P. Hofmann, Hybridfahrzeuge; Ein alternatives Antriebssystem f
  ür die Zukunft, Bd. 2. Auflage, Wien: Springer Verlag, 2014.
- [3] A. Karle, Elektromobilität; Grundlagen und Praxis, München: Carl Hanser Verlag, 2015.
- [4] K. Borgeest, Elektronik in der Fahrzeugtechnik; Hardware, Software, Systeme und Projektmanagement, Bd. 3. Auflage, Aschaffenburg: Springer Verlag, 2014.
- [5] P. Keil und A. Jossen, "Aufbau und Parametrierung von Batteriemodellen," in *19. DESIGN&ELEKTRONIK-Entwicklerforum Batterien & Ladekonzepte*, München, 2012.
- [6] M. Auer und S. Krug, "Gesamtfahrzeugsimulation eines batterieelektrischen Fahrzeugs,"
   Baden-Württemberg, 2012.
- [7] J. P. Schmidt, "Verfahren zur Charakterisierung und Modellierung von Lithium-Ionen Zellen," Karsruher Institut für Technologie, Karlsruhe, 2013.
- [8] S. Golmon, K. Maute und M. L. Dunn, "Numerical modeling of electrochemicalmechanical interactions in lithium polymer batteries," Elsevier, 2009.
- [9] F. Al-Abbasi und J. Nemes, "Micromechanical modeling of dual phase steels," Elsevier, Kanada, 2003.
- [10] A. Behrens und H. Just, "FE-basierte Rissanalyse in der Kalt- und Warmumformung mit Hilfe des Modells der effektiven Spannungen," Helmut Schmidt Universität, Erlangen, 2001.
- [11] S. F. Heindl, "Entwicklung eines makroskopischen Finite Elemente Modells einer 18650LI-Ionen Zelle für Crashbelastungen," Graz, 2013.
- [12] KTM Sportmotorcycle GmbH, Mattighofen, 2015.
- [13] "http://www.1000ps.at/modellnews-2353656-ktm-freeride-e," [Online].
- [14] [Online]. Available: http://www.fahrzeugindustrie.at/kraftfahrrecht/fahrzeugklassen/.
- [15] KTM, "http://www.ktm.com/at/e-ride/freeride-e-sx/," [Online].

Literaturverzeichnis

- [16] H. Wallentowitz und A. Freialdenhoven, Strategien zur Elektrifizierung des Antriebsstranges, Bd. 2. überarbeitete Auflage, Wiesbaden: Vieweg + Teubner, 2011.
- [17] R. Korthauer, Handbuch Lithium-Ionen-Batterien, Heidelberg: Springer Vieweg, 2013.
- [18] "http://www.bto.pl/B2CProdukt.aspx?id\_artykulu=47303," [Online].
- [19] "http://www.pohl-electronic.de/pdf/Panasonic/CGR18650KA.pdf," [Online].
- [20] M. Sternad und M. Wilkening, "Abschlussbericht," Graz, 2013.
- [21] J. O. Besenhard und M. Winter, "Wiederaufladbare Batterien. Teil 1: Akkumulatoren mit wäßriger Elektrolytlösung," Chemie in unserer Zeit, Bd. 33, Nr. 5, 1999.
- [22] E. Rummich, Energiespeicher; Grundlagen, Komponenten, Systeme und Anwendungen, Renningen: Expert Verlag, 2009.
- [23] V. Crastan, Elektrische Energieversorgung 2, Bd. 3. Auflage, Heidelberg: Springer Verlag, 2012.
- [24] "http://www.tvt.kit.edu/21\_984.php," [Online].
- [25] G. Babiel, Elektrische Antriebe in der Fahrzeugtechnik, Bd. 2. Auflage, Wiesbaden: Vieweg + Teubner, 2009.
- [26] R. Groiß und A. Jossen, "Sicherheitsaspekte beim Testen von Lithium-Ionen Batterien," Öllingen, 2010.
- [27] "http://www.manager-magazin.de/unternehmen/autoindustrie/tesla-stellt-ingigafactory-nicht-batteriezellen-vom-typ-18650-her-a-998973.html," [Online].
- [28] U. L. Inc., "Standard for Lithium Batteries," Underwriters Laboratories Inc., 2005.
- [29] G. Trattnig und W. Leitgeb, "Battery Modelling for Crash Safety Simulation," in Automotive Battery Technology, Springer, 2014.
- [30] E. Sahraei, R. Hill und T. Wierzbicki, "Modeling of Lithium-ion Cylindrical Batteries for Mechanical Integrity: Experiments, Calibrations, and Validation," in *Proceedings of 1st Battery Congress*, Ann Arbor, 2011.
- [31] L. Greve und C. Fehrenbach, "Mechanical testing and macro-mechanical finite element simulation of the deformation, fracture, and short circuit initiation of cylindrical Lithium ion battery cells," Journal of Power Sources, 2012.

Literaturverzeichnis

- [32] E. Sahraei, J. Campbell und T. Wierzbicki, "Modeling and short circuit detection of 18650 Li-ion cells under mechanical abuse conditions," Journal of Power Sources, 2012.
- [33] L. S. T. Corporation, "www.lstc.com," [Online].
- [34] L. S. T. Corporation, "LS-DYNA Keyword User Manual Volume 1," LSTC, 2007.
- [35] L. S. T. Corporation, "LS-DYNA Theory Manual," LSTC, 2015.
- [36] L. S. T. Corporation, "LS Dyna Keyword User Manual Volume 2: Material Models," LSTC, 2007.
- [37] M. Shkolnikov, "Honeycomb Modeling for Side Impact Moving Deformable Barrier," in 7. International LS-DYNA User Conference.
- [38] V. S. Institute, "Batterieprüfstand PRESTO 420". 2010.
- [39] K. Reif, Batterien, Bordnetze und Vernetzung, Wiesbaden: Vieweg + Teubner, 2010.
- [40] K. Meier-Engel, "https://prof.hti.bfh.ch/fileadmin/home/mik1/Eigenschaften.pdf," [Online].
- [41] U. K. D. M. S. U. B. Ketterer, "Lithium-Ionen Batterien: Stand der Technik und Anwendungspotential in Hybrid-, Plug-In Hybrid- und Elektrofahrzeugen," Forschungszentrum Karlsruhe, 2009.
- [42] L. S. T. Corporation, "www.lstc.com," [Online].
- [43] "https://www.perl.org/," [Online].
- [44] "http://www.lsoptsupport.com/howtos/splines," [Online].
- [45] ",http://www.lsoptsupport.com/faqs-4/curve-matching-metrics," [Online].
- [46] ",http://www.evrdr.com/ktm-freeride-e-hi-voltage-trail-bike/," [Online].
- [47] "Richtlinie 2007/46/EG des europäischen Parlamentes und des Rates vom 5. Sep. 2007 zur Schaffung eines Rahmens für die Genehmigung von Kraftfahrzeugen und Anhängern sowie von Systemen, Bauteilen und selbstständigen technischen Einheiten für diese Fahrzeuge".
- [48] B. Diekmann und E. Rosenthal, Energie; Physikalische Grundlagen ihrer Erzeugung, Umwandlung und Nutzung, Bd. 3. Auflage, Wiesbaden: Springer Verlag, 2014.
- [49] D. Naunin, Hybrid-, Batterie- und Brennstoffzellen-Elektrofahrzeuge, Bd. 4. Auflage, Renningen: Expert Verlag, 2007.
Literaturverzeichnis

[50] R. R. T. P. K. P.G. Balakrishnan, "Safety mechanisms in lithium-ion batteries," 2006.

- [51] A. Wu, M. Tabaddor, C. Wang und J. Jeevarajan, "Simulation of Internal Short Circuits in Lithium-Ion Cells," Underwriters Laboratories, 2013.
- [52] N. Stander, W. Roux, A. Basudhar, T. Eggleston, T. Goel und K. Craig, LS-OPT User's Manual, Bd. Version 5.0, L. S. T. Corporation, Hrsg., 2013.
- [53] W. Weißbach, Werkstoffkunde Strukturen, Eigenschaften, Prüfung, Bd. 18. Auflage, Wiesbaden: Vieweg + Teubner, 2012.
- [54] "http://www.lsoptsupport.com/howtos-4/splines," [Online].
- [55] ",http://www.itwissen.info/definition/lexikon/Metamodell-meta-model.html," [Online].
- [56] K. Witowski, "Vorstellung von LS-OPT Version 5 und Schnittstelle zu ANSA/META," DYNAmore GmbH, Infotag ANSA - LS-OPT - META, 2014.
- [57] N. Stander und K. Craig, "On the Robustness of a simple domain Reduction Scheme for Simulation-Based Optimization," Livermore Software Technology Corporation, 2003.
- [58] N. Instruments, NI DIAdem, 2012.
- [59] P. Fröhlich, FEM-Anwendungspraxis; Einstieg in die Finite Elemente Analyse, Wiesbaden: Vieweg Verlag, 2005.
- [60] H. Kuchling, Taschenbuch der Physik, München: Carl Hanser Verlag, 2011.

Anhang

# 10 ANHANG



# 10.1 Versuchsauswertung "Crush in X-Richtung" 100 [%] SOC





Abbildung 10. 2: Spannungs-Weg-Verlauf bei der Versuchsanordnung "Crush in X-Richtung" 100 [%] SOC



Abbildung 10. 3: Kraft- und Spannungsverlauf mit Kurzschlussbereich bei der Versuchsanordnung "Crush in X-Richtung" 100 [%] SOC

# 10.2 Versuchsauswertung "Crush in Z-Richtung" 100 [%] SOC



Abbildung 10. 4: Kraft-Weg-Verlauf bei der Versuchsanordnung "Crush in Z-Richtung" 100 [%] SOC



Abbildung 10. 5: Spannungs-Weg-Verlauf bei der Versuchsanordnung "Crush in Z-Richtung" 100 [%] SOC



Abbildung 10. 6: Kraft- und Spannungsverlauf mit Kurzschlussbereich bei der Versuchsanordnung "Crush in Z-Richtung" 100 [%] SOC





## 10.3 Versuchsauswertung "Crush Penetration" 100 [%] SOC





Abbildung 10. 8: Spannungs-Weg-Verlauf bei der Versuchsanordnung "Crush Penetration" 100 [%] SOC





Abbildung 10. 9: Kraft- und Spannungsverlauf mit Kurzschlussbereich bei der Versuchsanordnung "Crush Penetration" 100 [%] SOC

#### 10.4 Versuchsauswertung "Crush 3 Punkt Biegung" 100 [%] SOC



Abbildung 10. 10: Kraft-Weg-Verlauf bei der Versuchsanordnung "Crush 3 Punkt Biegung" 100 [%] SOC



Abbildung 10. 11: Spannungs-Weg-Verlauf bei der Versuchsanordnung "Crush 3 Punkt Biegung" 100 [%] SOC



Abbildung 10. 12: Kraft- und Spannungsverlauf mit Kurzschlussbereich bei der Versuchsanordnung "Crush 3 Punkt Biegung" 100 [%] SOC