

## Marco Raffler

# Entwicklung eines Finite Elemente Modells einer zylindrischen Lithium Batteriezelle mit Fokus auf Minimierung der Rechenzeit

Masterarbeit zur Erlangung des akademischen Grades *Diplom-Ingenieur* im *Masterstudium Maschinenbau* 

Eingereicht an der Technischen Universität Graz

**Betreuer** Univ.-Prof. Dipl.-Ing. Dr.techn. Hermann Steffan

Mitbetreuer Dott. mag. Alessio Sevarin

# 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.

I declare that I have authored this thesis independently, that I have not used other than the declared sources/resources, and that I have explicitly marked all material which has been quoted either literally or by content from the used sources. The text document uploaded to TUGRAZonline is identical to the present master's thesis.

Graz, am 14. März 2016

(Marco Raffler)

# **Danksagung**

An dieser Stelle möchte ich mich bei Dott. Mag. Alessio Sevarin für die ausgezeichnete Betreuung und Unterstützung während meiner Masterarbeit bedanken. Mit seiner motivierenden Art und konstruktiven Kritik hat er einen großen Teil zu diesem Projekt beigetragen. Gleichermaßen danke ich Ass.Prof. Dipl.-Ing. Dr.techn. Wolfang Sinz und Dipl.-Ing. Christian Ellersdorfer für die hervorragenden Ratschläge und Hilfestellungen zur Durchführung dieser Arbeit.

Ebenfalls gilt mein Dank Univ.-Prof. Dipl.-Ing. Dr.techn. Hermann Steffan für die Möglichkeit eine Masterarbeit am Institut für Fahrzeugsicherheit verfassen zu dürfen. Für das angenehme Arbeitsumfeld möchte ich mich bei allen Mitarbeiterinnen und Mitarbeitern des Instituts für Fahrzeugsicherheit bedanken.

Ein besonderer Dank gebührt meiner Familie, die mir das Studium ermöglicht hat und mich zu jeder Zeit voll unterstützte. Nicht zuletzt bedanke ich mich bei meinen Freunden, die mich auf meinem Studienweg begleitet haben und stets einen moralische Stütze waren.

## Danke euch allen!

# **Abstract**

In this research a parameterized beam-element-based modeling approach for cylindrical lithium battery cells was developed. The cylindrical cell shape was approximated by radial beam elements connected to each other in circumferential and longitudinal direction. The discrete beam element formulation is used to define an anisotropic material behavior. Because of the intention to use the cell model in total vehicle crash simulations, the focus of development was on minimizing the computational effort whilst obtaining accurate mechanical behavior at the same time. The example of an 18650 lithium cell model constructed in LS-Dyna is used to show the high degree of automation in adaption of the model parameters to achieve realistic deformation. Therefore the Sequential Response Surface Method (SRSM) is used to create an optimization process to fit the mechanical properties of the model materials. An abuse testing program, consisting of the load cases Crush-X, Crush-Z, Penetration and 3-Point-Bending, was performed to evaluate the mechanical behavior and the onset of an internal short circuit of commercially available 18650 lithium cells. Furthermore a short circuit criteria, in form of maximum engineering strain of the beam elements, was created to predict the onset of electrical failure during mechanical abuse. By reducing the number of strength-related elements to 1600 a fast and yet accurate cell model could be set up.

# Kurzfassung

In der vorliegenden Arbeit wurde ein Modellierungsansatz einer Lithium-Ionen Rundzelle für Finite Elemente Crash-Simulationen von Gesamtfahrzeugen entwickelt. Der Fokus der Entwicklung lag dabei vor allem auf Minimierung der Rechenzeit sowie dem möglichst realitätsnahen Nachbilden des Deformationsverhaltens der Zelle. Das Simulationsmodell basiert auf eindimensionalen Elementen, wobei die zylindrische Form der Zelle durch radial angeordnete Beam-Elemente angenähert wurde, welche in Umfangs- und Längsrichtung miteinander verbunden sind. Da handelsübliche Lithium-Ionen Rundzellen über ein anisotropes Materialverhalten verfügen, wurde für die Definition der eindimensionalen Elemente die Discrete-Beam-Formulierung mit entsprechendem Material verwendet. Mit Lastkurven ist es damit möglich das Materialverhalten für alle Raumrichtungen separat zu definieren. Eine Reihe an Deformationsversuchen, bestehend aus Crush-X, Penetration, Crush-Z und 3-Punkt-Biegung, wurde durchgeführt um das mechanische Verhalten und das elektrische Versagen von handelsüblichen 18650 Zellen zu analysieren. Kraft-Weg-Verläufe sowie Zellspannungen zum Detektieren der Kurzschlüsse wurden während der Tests aufgezeichnet und im Anschluss ausgewertet. Um das Simulationsmodell für verschiedene Zelltypen anpassen zu können wurde ein parametrischer Ansatz gewählt. Am Beispiel eines in LS-Dyna erstellten Finite Elemente Modells einer 18650 Lithium Batterie wird gezeigt, dass ein hoher Automatisierungsgrad der Parameteranpassung erreicht werden konnte. Die Sequential Response Surface Methode (SRSM) wurde angewandt um einen Optimierungsprozess zu erstellen. Die Modellparameter wurden dabei so adaptiert, dass sich ein realistisches mechanisches Verhalten ergibt und die Kraft-Weg-Verläufe denen der Zelltest angenähert werden konnten. Da der Kurzschluss einer Lithium Batterie große Gefahren mit sich bringen kann, wurde ein Kriterium des Zellmodells entwickelt, mit welchem es möglich ist das elektrische Versagen der Batterie vorherzusagen. Zu diesem Zweck wurden mehrere Konzepte erstellt und auf ihre Gültigkeit überprüft. Mit überschreiten einer bestimmten Dehnung der Beam-Elemente konnte letztendlich ein Kriterium entwickelt werden, sodass der Kurzschluss mit guter Genauigkeit vorhergesagt werden kann. Durch die Reduktion der festigkeitsrelevanten eindimensionalen Elemente auf eine Zahl von 1.600 konnte ein schnelles und gleichzeitig genaues Zellmodell erstellt werden.

# **Inhaltsverzeichnis**

1 EINLEITUNG	1
1.1 Entwicklung der Elektromobilität	1
1.1.1 Vorteile des elektrischen Antriebes	2
1.1.2 Nachteile des elektrischen Antriebes	3
1.1.3 Sicherheitsaspekte von Elektrofahrzeugen	4
2 STAND DER TECHNIK	6
2.1 Lithium Ionen Technologie	6
2.1.1 Aufbau von Batteriespeichersystemen für Elektrofahrzeuge	7
2.1.2 Aufbau und Funktionsweise einer Lithium Ionen Zelle	8
2.1.3 Die 18650 Rundzelle	10
2.2 Gefahren von Lithium-Ionen Zellen	11
2.2.1 Mechanisches Risiko	11
2.2.2 Elektrisches Risiko	11
2.2.3 Chemisches Risiko / Freisetzung toxischer Stoffe [14]	11
2.2.4 Thermisches Risiko / Thermal Runaway [14]	12
2.3 Zellversuche	13
2.3.1 Genormte Zellversuche	14
2.3.2 Zellversuche in der Fachliteratur	16
2.4 Finite Elemente Modelle von zylindrischen Lithium-Ionen Zellen	17
2.4.1 Mikroskopisches Modell	18
2.4.2 Makroskopisches Modell	19
2.4.3 Probleme der aktuellen Berechnungsmodelle	23
3 ZIEL DER ARBEIT	25
4 VERÖFFENTLICHUNG	27
4.1 Abstract	27
4.2 Introduction	27

53

54

# VΙ

5.1 Parameter mit Einfluss auf das Deformationsverhalten

Inha	Itsverzeichnis	
5.1	.1 Formulierung von Beam – Elementen und Definition des Achssystems	54
5.1	.2 Einfluss des Massenträgheitsmomentes auf die Deformation	55
5.2	Parameter mit Einfluss auf die Rechenzeit	56
5.2	.1 Masse der Beam Elemente	56
5.2	.2 Däpfungsfaktor des verwendeten Materials	58
6	ENTWICKLUNG DES KURZSCHLUSSKRITERIUMS	59
7	FAZIT	61
8	LITERATURVERZEICHNIS	63

# Abbildungsverzeichnis

Abbildung 1: Weltweite Bestandsentwicklung von Elektroautos von 2012 bis 2015 [24]	1
Abbildung 2: Renault Twizy (links), Tesla Model X (mitte) und KTM Freeride e (rechts) [27] [6] [28]	2
Abbildung 3: Finite Elemente Simulation eines Crahstests und realer Crashtest eines PKW [34]	5
Abbildung 4: Vergleich der Energiedichte verschiedener Akkumulator-Technologien [29]	6
Abbildung 5: Battery Pack eines Elektroautos [9]	7
Abbildung 6: Konfiguration des Antriebsstranges eines Elektrofahrzeuges [23]	8
Abbildung 7: Funktionsweise einer Lithium Ionen Zelle [21]	8
Abbildung 8: Formfaktoren von Lithium Ionen Zellen [30]	9
Abbildung 9: Abmessungen einer 18650 Zelle[22]	10
Abbildung 10: Aufbau einer Rundzelle [33]	10
Abbildung 11: Gängige Normen und zugehörige Tests [15]	14
Abbildung 12: Einteilung von Zelltests nach UL-Norm	15
Abbildung 13: Versuchsanordnungen von Sahraei mit a.) Penetration mit zylindrischem Impaktor, b.) Penetr	ration
mit kugelförmigem Impaktor, c.) 3-Punkt-Biegung und d.) Crush in radialer Richtung [16]	16
Abbildung 14: Versuchsanordnungen von Greve mit a.) Crush in radialer Richtung, b.) Penetration	n mit
zylindrischem Impaktor und c.) 3-Punkt-Biegung [17]	17
Abbildung 15: mikroskopisches Modell einer 18650 Zelle im Vergleich zur realen Zelle [16]	18
Abbildung 16: makroskopisches Modell einer 18650 Zelle [26]	19
Abbildung 17: a.) makroskopisches Modell einer 18650 Zelle nach Sahraei, b.) Ort des Kurzschlusse	es im
deformierten Zustand [16]	20
Abbildung 18: Aufbau des Zellmodells nach Greve [17]	21
Abbildung 19: Vergleich Zelltest und Simulation von Sahraei [16]	23
Abbildung 20: Entwicklung des Zellmodells	53
Abbildung 21: Beamkomponenten des Zellmodells	54
Abbildung 22: Definition des Koordinatensystems bei SCOOR = 2 und SCOOR = 3 [25]	54
Abbildung 23: Vergleich SCOOR für Lastfall 3-Punkt-Biegung (oben) und Crush-X (unten)	55
Abbildung 24: Prinzipskizze eines diskreten Beam Elements [18]	56
Abbildung 25: Vergleich der Kraftverläufe des Lastfall Crush-Z mit verschiedenen Dämpfungsfaktoren	58
Abbildung 26: Vergleich des Lastfalles Penetration von Beam Modell (links) und Solid Model (rechts)	61

# **Tabellenverzeichnis**

Tabelle 1: Beispiele von Gefahrenstoffe, welche durch defekte Lithium Ionen Zelle entstehen können	12
Tabelle 2: Konzepte zur Entwicklung eines Kurzschlusskriteriums	59
Tabelle 3: Vergleich Kurzschlusskriterien	60
Tabelle 4: Vergleich der Berechnungszeit von Solid Modell und Beam Modell für die verschiedenen Lastfälle	62

## 1 EINLEITUNG

## 1.1 Entwicklung der Elektromobilität

Betrachtet man die weltweite Bestandsentwicklung von Elektroautos in den Jahren 2012 bis 2015 in Abbildung 1, lässt sich erkennen, dass Elektroautos auf dem Vormarsch sind und der Trend immer mehr in Richtung Elektrifizierung von Antriebssträngen geht. Seit 2012 ist weltweit eine jährliche Steigerung von elektrischen PKWs um ca. 100% zu verbuchen. Dies lässt sich zum einen auf die Verknappung der fossilen Brennstoffe und die damit einhergehende Preiserhöhung zurückführen, zum anderen spielt das immer größer werdende Bewusstsein der Bevölkerung für den Umweltschutz eine entscheidende Rolle, dass Fahrzeuge mit alternativen Antrieben einen entsprechenden Absatz finden.

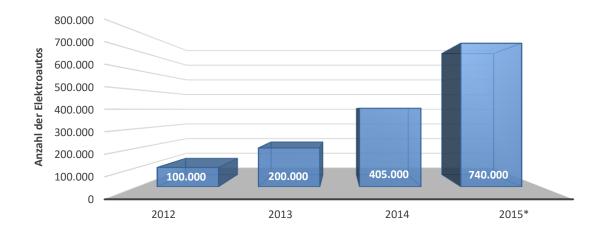


Abbildung 1: Weltweite Bestandsentwicklung von Elektroautos von 2012 bis 2015 [24]

Elektroautos finden sich bereits in allen Fahrzeugsegmenten wieder, angefangen vom kleinen Zweisitzer für den urbanen Verkehr über die Luxuslimousine bis hin zum familientauglichen SUV. Sogar im Fun- und Powersportbereich setzen die Hersteller vermehrt auf den elektrischen Antrieb ihrer Fahrzeuge, wie z.B. E-Bikes oder rein elektrisch angetriebene Motorräder.



Abbildung 2: Renault Twizy (links), Tesla Model X (mitte) und KTM Freeride e (rechts) [27] [6] [28]

Beispiele von aktuellen Elektrofahrzeugen sind in Abbildung 2 dargestellt. Auch das Segment der Hybridfahrzeuge erfreut sich immer größerer Beliebtheit. Hybridautos unterscheiden sich von reinen Elektroautos dadurch, dass Sie über einen zweiten Antrieb in Form eines Verbrennungsmotors verfügen. Die elektrische Speicherkapazität ist bei Hybridfahrzeugen zwar geringer, die eingesetzte Technologie des elektrischen Speichers ist jedoch dieselbe wie bei rein elektrisch angetriebenen Fahrzeugen. [1]

Um zu verdeutlichen warum der Elektroantrieb das Potential hat den Verbrennungsmotor in Zukunft abzulösen, wird Im Folgenden kurz auf die wesentlichen Vor- und Nachteile eingegangen.

#### 1.1.1 Vorteile des elektrischen Antriebes

In einem Artikel von Marx [2], der einen Wirkungsgrad-Vergleich zwischen Elektroautos und Fahrzeugen mit Verbrennungsmotor zeigt, werden folgende Vorteile aufgezeigt:

#### Hoher Wirkungsgrad

Mit einem modernen Elektroauto lässt sich ein Gesamtwirkungsgrad von ca. 81% erreichen, wohingegen mit Benzinmotoren nur Wirkungsgrade von ca. 18% erreicht werden. Dadurch ist ein viel effizienterer und somit umweltschonender Fahrbetrieb (Tank to Wheel) möglich. Natürlich sollte auch die Bereitstellung der elektrischen Energie, mit welcher die Fahrzeuge betrieben werden, möglichst ressourcenschonend und nachhaltig erfolgen.

#### • Kostengünstiger Betrieb

Vergleicht man die Treibstoffkosten eines Mittelklassewagens mit Verbrennungsmotor für 100 km mit den Stromkosten eines elektrisch angetriebenen Mittelklassewagens für dieselbe Reichweite, so kann das Elektrofahrzeug mit ca. 30% der Kosten eines konventionellen PKWs betrieben werden.

#### Abgasfreier Betrieb

Ein Abgas-Ausstoß im Fahrbetrieb (Tank to Wheel) ist bei Elektroautos nicht vorhanden. Dadurch ergibt sich die Möglichkeit die Luftverschmutzung in Städten und Ballungszentren, die durch den Verkehr verursacht werden, erheblich zu senken.

#### • geringe Geräuschemissionen

Durch Elektromotoren können Fahrzeuge deutlich geräuschärmer betrieben werden, was ebenfalls dazu beitragen kann die störenden Umwelteinflüsse des Verkehrs zu minimieren.

#### Wartungsarm

Der einfache und robuste Aufbau von Elektromotoren ermöglicht hohe Lebensdauer, geringen Wartungsaufwand und somit niedrige Wartungskosten für den Verbraucher.

#### 1.1.2 Nachteile des elektrischen Antriebes

Als Nachteilig im Vergleich zur Verbrennungskraftmaschine führt unter anderem Marx [2] folgende Punkte auf:

#### Versorgungslücke

Die flächendeckende Stromversorgung stellt zurzeit noch eine der größten Hürden für Elektrofahrzeuge dar. Um eine ähnliche Akzeptanz des Elektroantriebes zu schaffen wie für den konventionellem Antrieb, muss das Netz an Ladestationen noch besser ausgebaut werden. Aktuellen Prognosen zufolge soll es im Jahr 2020 aber bereits 12,7 Millionen Ladestationen weltweit geben. Im Jahr 2014 waren es noch ca. 1 Million Ladestationen für Elektrofahrzeuge. [3]

#### Reichweite

Die durchschnittliche Reichweite aktueller Elektroautos liegt zurzeit bei ca. 210 km, was von vielen Endverbrauchern als zu wenig erachtet wird. Durch ständige Weiterentwicklung der eingesetzten Technologien wird sich die Durchschnittsreichweite aktuellen Prognosen zufolge im Jahr 2020 auf 400 km erhöht haben. [4] Betrachtet man des Weiteren die durchschnittliche Fahrstrecke im städtischen Bereich von 40 km, so lässt sich erkennen, dass bereits die aktuellen Reichweiten von Elektroautos für viele Menschen ausreichend wären.

#### • Ladezeiten

Eine ebenfalls abschreckende Wirkung auf den Konsumenten hat die Ladezeit des Energiespeichers. Zurzeit dauert es noch mehrere Stunden bis die Batterien eines elektrischen Mittelklassewagens wieder vollständig geladen sind. Beispielsweise benötigt ein VW e-Golf an einer 3,6 kW Ladestation eine Dauer von 8 Stunden um die Akkus vollständig zu laden [5]. Da Autos im Mittel 23 Stunden am Tag in geparktem Zustand verbringen, steht in den meisten Fällen aber genügend Zeit zur Verfügung um den PKW mindestens einmal täglich vollständig zu laden. Des Weiteren ermöglichen neu entwickelte Technologien, die jedoch vorwiegend in Fahrzeugen der Luxusklasse zum Einsatz kommen, bereits heute sehr kurze Ladezeiten. Als Beispiel kann hier die von der Firma Tesla verwendete "Supercharger-Technik" genannt werden. Dabei ist es möglich sein Fahrzeug innerhalb von 40 Minuten zu 80 % aufzuladen. [6]

#### Anschaffungskosten

Die Anschaffungskosten aktueller Elektrofahrzeuge liegen derzeit noch deutlich über dem Kaufpreis vergleichbarer Dieselfahrzeuge. Beispielsweise kostet ein VW e-Golf ca. 9.000 € mehr als ein Diesel-Golf mit gleicher Ausstattung und ähnlichen Fahrleistungen [5]. Geht man von einer Haltedauer von 4 Jahren aus, müssen Besitzer eines elektrischen Mittelklassefahrzeuges eine Jahresfahrleistung von mindesten 35.000 km zurücklegen um eine Gesamtkosteneinsparung gegenüber einem konventionellen Dieselfahrzeug zu erzielen. Durch den ständig sinkenden Preis der elektrischen Energiespeicher und die Weiterentwicklung der eingesetzten Technologie werden die Anschaffungskosten für Elektroautos in den nächsten Jahren jedoch sinken [7].

#### 1.1.3 Sicherheitsaspekte von Elektrofahrzeugen

Laut verschiedenen Experten [8] werden sich Elektrofahrzeuge in Zukunft weiter verbreiten, weshalb es wichtig ist die sicherheitstechnischen Aspekte der Elektromobilität genauer zu betrachten. Da die eingesetzten Akkumulatoren in Elektrofahrzeugen ein gewisses Gefahrenpotential mit sich bringen (siehe Kapitel 2.2), müssen neue Anforderungen an die Verkehrssicherheit gestellt werden.

Besonders ein elektrischer Kurzschluss, welcher beispielsweise durch große Deformationen der Batteriezellen auftreten kann, stellt ein großes Risiko dar. Stark exotherme Reaktionen und explosionsartige Vorgänge können die Folge eines elektrischen Versagens sein.

Mit Crash Simulationen und durchgeführten Tests wird versucht ein genaues Verständnis für die auftretenden Vorgänge im Kurzschluss-Fall zu erlangen und damit die Fahrzeugsicherheit zu erhöhen. Besonders die Finite Elemente Methode hat sich im Fahrzeugsektor durchgesetzt, wie ein Beispiel in Abbildung 3 zeigt. Es lassen sich damit Deformationsvorgänge von quasistatischer bis hochdynamischer Natur mit guter Genauigkeit nachstellen. Des Weiteren sind die Kosten und der Aufwand im Vergleich zu realen Tests meist deutlich geringer und eine Reproduzierbarkeit ist zu jeder Zeit gegeben.



Abbildung 3: Finite Elemente Simulation eines Crahstests und realer Crashtest eines PKW [34]

Die Vorliegende Arbeit beschäftigt sich mit der Entwicklung eines Modellierungsansatzes von zylindrischen Lithium Zellen, welche in Elektroautos verbaut werden. Das entwickelte Modell soll dabei für Finite Elemente Crash Simulationen von Gesamtfahrzeugen zum Einsatz kommen und das Auftreten eines Kurzschlusses im Crash-Fall vorhersagen können.

## 2 STAND DER TECHNIK

Dieses Kapitel soll einen Überblick über den aktuellen Stand der Technik geben. Es wird näher auf die verwendete Zelltechnologie, die durchgeführten Zelltests sowie die eingesetzten Simulationsmodelle eingegangen. Des Weiteren soll aufgezeigt werden, wo die Grenzen der aktuellen Zellmodelle liegen und welche Probleme damit einhergehen.

## 2.1 Lithium Ionen Technologie

Aufgrund ihrer hohen Energiedichte gelten Lithium Ionen Batterien als eine der vielversprechendsten Technologien in der Elektromobilität. Mit einer Lithium Ionen Zelle lässt sich etwa die vierfache Energiedichte eines Blei-Akkus erzielen (siehe Abbildung 4). Um Elektroautos effizient zu machen ist es unabdingbar die Fahrzeuge so leicht wie möglich zu gestalten und dennoch möglichst viel Energie in den Akkumulatoren zu speichern. Aus diesem Grund setzen Automobilhersteller fast ausschließlich auf die Lithium Ionen Technologie bei ihren Elektrofahrzeugen. [9]

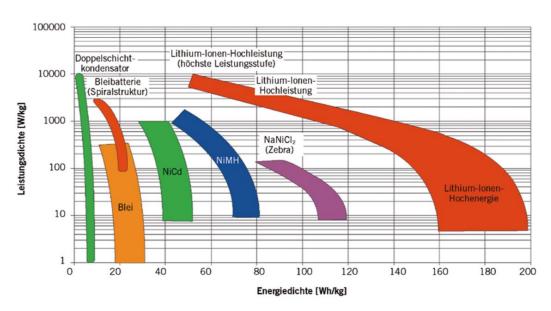


Abbildung 4: Vergleich der Energiedichte verschiedener Akkumulator-Technologien [29]

#### 2.1.1 Aufbau von Batteriespeichersystemen für Elektrofahrzeuge

Moderne Elektroautos verfügen über Betriebsspannungen von bis zu 800 V und einer elektrischen Leistung von bis zu 90 kWh [6] [10]. Um diese Kennwerte erreichen zu können werden mehrere einzelne Batterie Zellen zu Batteriemodulen zusammengeschlossen und in so genannten Battery Packs verbaut. Die einzelnen Module des Battery Packs haben normalerweise eine maximale Spannung von 60 Volt. Dies dient zum einen der Verbesserung der Sicherheit, zum anderen werden die Herstellungskosten gesenkt, da von Gesetzeswegen besondere Vorkehrungen ab einer Spannung von 60 Volt zu treffen sind [11].



**Abbildung 5:** Battery Pack eines Elektroautos [9]

Abbildung 5 zeigt das Beispiel eines Battery Packs, wie es für elektrische Automobile zum Einsatz kommt. Neben den Batterie Modulen besteht das Battery Pack aus einem Metallgehäuse, welches die Zellen vor äußeren Einflüssen schützt, sowie einem Kühlsystem und elektrischen Hochvoltleitungen. Im Aufbau und in der Wahl der verwendeten Materialen können sich die Battery Packs von Hersteller zu Hersteller unterscheiden.

Battery Packs sind im Aufbau des Fahrzeuges untergebracht und können je nach Fahrzeugkonstruktion in verschiedenen Konfigurationen angeordnet sein. Die Aufteilung in mehrere einzelne Packs ist dabei nicht unüblich (siehe Abbildung 6).

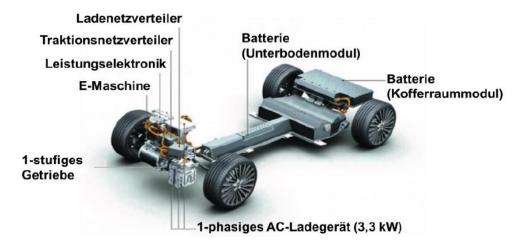


Abbildung 6: Konfiguration des Antriebsstranges eines Elektrofahrzeuges [23]

#### 2.1.2 Aufbau und Funktionsweise einer Lithium Ionen Zelle

Der symbolische Aufbau einer wieder aufladbaren Lithium Ionen Zelle ist in Abbildung 7 dargestellt. Die Zelle verfügt über zwei Elektroden, zwischen denen sich ein ionenleitfähiger Elektrolyt befindet. Die positive Elektrode besteht häufig aus Mischoxiden (z.B. Lithiumcobaltdioxid), während für die negative Elektrode in den meisten Fällen Graphite oder amorphe Kohlenstoffverbindungen zum Einsatz kommen. Eine poröse Membran (Separator) isoliert die beiden Elektroden voneinander, damit ein Kurzschluss vermieden wird.

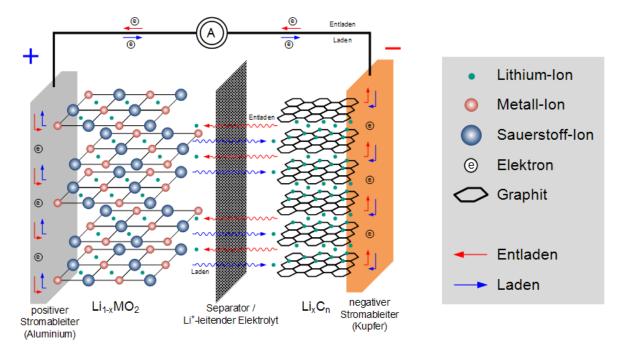


Abbildung 7: Funktionsweise einer Lithium Ionen Zelle [21]

Beim Entladevorgang kommt es zu einer Auslagerung von Lithium aus der negativen Elektrode und gleichzeitigen Abgabe von Elektronen. Die ausgelagerten Lithium Ionen wandern durch den Elektrolyten und den Separator zur positiven Elektrode und werden dort eingelagert. Die abgegebenen Elektronen fließen über eine externe Verbindung zur Positiven Elektrode und können dabei zum Beispiel einen elektrischen Verbraucher betreiben. Beim Aufladen werden die eben beschriebenen Vorgänge umgekehrt und elektrische Energie in der Zelle gespeichert. [12]

Lithium Ionen Zellen werden für unterschiedliche Einsatzzwecke in verschiedenen Formfaktoren hergestellt. Die gängigsten Zellformate stellen die Rundzellen, die prismatischen Zellen und die sogenannten Pouch-Zellen (Folienzellen) dar (siehe Abbildung 8). Für Spezialanwendungen werden auch Lithium Ionen Knopfzellen in geringen Stückzahlen hergestellt.

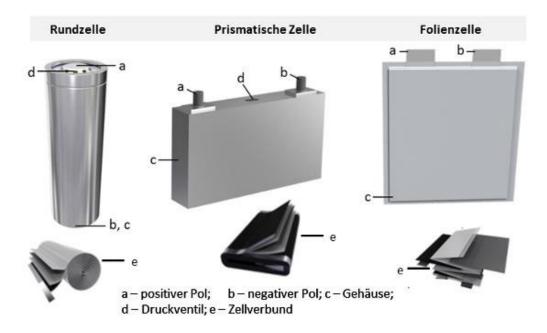


Abbildung 8: Formfaktoren von Lithium Ionen Zellen [30]

Da in der vorliegenden Arbeit ausschließlich Rundzellen betrachtet werden, wird auf diese Bauform im folgenden Abschnitt etwas genauer eingegangen.

#### 2.1.3 Die 18650 Rundzelle

Eine besondere Bauform der zylindrischen Zellen stellt die 18650 Rundzelle dar. 1991 wurde dieser Zelltyp von der Firma Sony eingeführt und ist heute die weitverbreitetste Zelle am Markt. Aufgrund der hohen Stückzahlen ist eine kostengünstigere Produktion als bei anderen Zelltypen möglich. Die Bezeichnung "18650" beschreibt die Abmessungen der Zelle. Wie in Abbildung 9 zu sehen ist, hat die Batterie einen Durchmesser von ca. 18mm und eine Länge von ca. 65mm. Der schematische Aufbau einer Rundzelle ist in Abbildung 10 ersichtlich. Durch ein spiralförmiges Aufrollen von Anode, Kathode und Separator entsteht die sogenannte Jelly Roll, ein schichtweise aufgebauter Zylinder im Inneren der Zelle. Die Jelly Roll weißt durch ihre Struktur ein anisotropes Materialverhalten auf, wodurch sie sich in verschiedenen Belastungsrichtungen unterschiedlich verhält.

Zum Schutz vor äußeren Einflüssen, wie z.B. Feuchtigkeit oder mechanische Belastungen und zur Aufbewahrung des Elektrolyts ist die Zelle von einem Mantel aus Metall umgeben. Diese Hülle wird in der Fachsprache "Metalcan" genannt und ist in den meisten Fällen aus Nickelstahl gefertigt. An den Enden der Metalcan sind Polkappen eingearbeitet, welche den Puls- und Minuspol der Zelle nach außen führen. Die meisten Zellen verfügen noch über ein Sicherheitsventil, das sich beim Überschreiten eines bestimmten Druckniveaus im inneren der Zelle öffnet und somit ein Bersten der Zelle verhindern soll.

Die 18650 Zelle wurde ursprünglich für den Consumer-Markt entwickelt und anfangs hauptsächlich in Notebooks und Elektrowerkzeugen verwendet. Aufgrund des geringen Preises und der hohen Energiedichte fand die Rundzelle auch immer mehr Anwendung in der Automobilbranche und ist heute in vielen Elektro- und Hybridfahrzeugen verbaut [12].



Abbildung 9: Abmessungen einer 18650 Zelle[22]

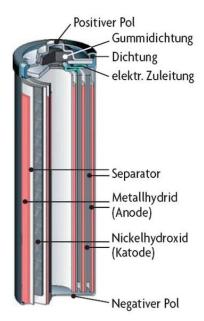


Abbildung 10: Aufbau einer Rundzelle [33]

#### 2.2 Gefahren von Lithium-Ionen Zellen

Die vorhin erwähnte hohe Energiedichte von Lithium Ionen Zellen trägt zwar dazu bei, dass effiziente Elektrofahrzeuge mit hoher Reichweite gebaut werden können, bringt jedoch auch ein gewisses Gefahrenpotential mit sich.

Laut Sinz [13] können die Risiken von Lithium-Ionen Zellen unterteilt werden in mechanisches Risiko, elektrisches Risiko, chemisches Risiko und thermisches Risiko.

#### 2.2.1 Mechanisches Risiko

Durch das hohe Gewicht von Battery Packs, welche in Elektroautos verbaut werden, besteht ein mechanisches Risiko in Form von frei werdenden Kräften. Besonders im Crashfall, wo hohe Beschleunigungen auftreten stellt dies ein bestimmtes Gefahrenpotential dar. Im Vergleich zu den anderen Risiken ist diese Gefahr jedoch gut handhabbar.

#### 2.2.2 Elektrisches Risiko

Aufgrund der hohen Spannung in Elektroautos von bis zu 800 Volt, besteht für den Menschen das Risiko eines gefährlichen elektrischen Schlages. Die Auswirkungen auf den menschlichen Körper hängen dabei von unterschiedlichen Faktoren ab, wie z.B. Art des Stromes (AC, DC), Stromstärke, Strompfad, Dauer, Spannung oder Widerstand des Körpers. Die Folgen eines Stromschlages sind in manchen Fällen erheblich und können bis zu Kammerflimmern oder neurologischen Effekten führen. Aus diesem Grund müssen Elektrofahrzeuge mit besonderen Sicherheitseinrichtungen ausgestatten werden (z.B. Unterbrechung des Stromkreises bei Fehlfunktion). [10]

#### 2.2.3 Chemisches Risiko / Freisetzung toxischer Stoffe [14]

Durch mechanische Einwirkungen oder thermische Belastungen, was in weiterer Folge zu Gasproduktionen in der Zelle und dadurch zum Druckanstieg führen kann, kann es bei Lithium Ionen Batterien zum Aufbrechen der äußeren Metallhülle kommen. Das wiederum führt in den meisten Fällen zum Austritt von Inhaltsstoffen, welche teilweise toxisch sind, oder zu gefährlichen Stoffen reagieren können. Das Lithiumsalz des Elektrolyten (LiPF<sub>6</sub>) reagiert z.B. beim Aufeinandertreffen mit Wasser (Luftfeuchte) zu Fluorwasserstoffsäure, welche äußerst giftig und ätzend ist.

Des Weiteren birgt das Freilegen der inneren Komponenten ein gewisses Risiko in sich. Beispielsweise kann es durch Oxydation an den Elektroden zur Entstehung von leicht entzündlichen Gasen wie Methan (CH<sub>4</sub>) und Wasserstoff (H<sub>2</sub>) kommen.

Tabelle 1 zeigt Beispiele der gefährlichsten Stoffe, welche im Zusammenhang mit Lithium Ionen Zellen entstehen können.

Auch wenn die auftretenden Mengen dieser gefährlichen Stoffe bei einer einzelnen Zelle gering sind, ist zu beachten, dass Elektrofahrzeuge über eine Vielzahl von Zellen verfügen. Außerdem sind teilweise schon kleinste Mengen der kritischen Substanzen für den menschlichen Körper schädlich. Aus diesem Grund sollte ein mechanisches Versagen der Hülle einer Lithium Ionen Zelle möglichst vermieden werden.

Tabelle 1: Beispiele von Gefahrenstoffe, welche durch defekte Lithium Ionen Zellen entstehen können

Stoff	Gefährliche Eigenschaften
Wasserstoff (H <sub>2</sub> )	Hochentzündliches Gas
Methan (CH <sub>4</sub> )	Hochentzündliches Gas
Ethen (C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> )	Hochentzündliches Gas
Fluorethan (C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> F)	Hochentzündliches Gas
Fluorwasserstoffsäure (HF)	Sehr giftige, ätzende Flüssigkeit
Alkylfluorophosphate (OCH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub> )	Hochgiftige Salze

#### 2.2.4 Thermisches Risiko / Thermal Runaway [14]

Wie bereits beschrieben beinhalten Lithium Ionen Zellen hochentzündliche Verbindungen mit niedrigem Flammpunkt [13]. Dies kann zum so genannten "Thermal Runaway" führen, welcher durch Kurzschluss oder thermischer Belastung ausgelöst wird.

Thermal Runaway bezeichnet dabei einen stark exothermen Vorgang in einer Batteriezelle in Folge einer thermischen Kettenreaktion, welche durch das Überschreiten einer bestimmten Temperatur ausgelöst wird. Dabei kann es zu explosionsartigen Verbrennungen kommen, was zur Zerstörung der Zelle führt.

Laut Lisbona [14] kann der Vorgang bei rein thermischer Belastung in drei Stufen eingeteilt werden:

- Bei ca. 90°C startet eine chemische Reaktion an der positiv geladenen Elektrode (Anode). Ab
  ca. 120°C beginnt sich die äußerste Schicht der Anode, welche in Kontakt mit dem Elektrolyt
  steht, aufzulösen. Desweitern startet eine Reduktion des Elektrolyten an der negativ
  geladenen Elektrode (Kathode).
- Die zweite Stufe des Thermal Runaway startet sobald eine Temperatur von ca. 140°C überschritten wird. An der Anode beginnt eine exotherme Reaktion und Sauerstoff wird gebildet.
- Im dritten Schritt wird die positive Elektrode weiter zersetzt. Ab einer Temperatur von ca. 180°C kommt es zur Oxidation des Elektrolyten, was einen hochgradig exothermen Prozess darstellt. Ab diesem Zeitpunkt beginnt die Temperatur in der Zelle um 100°C pro Minute anzusteigen.

Lisbona [14] schreibt jedoch auch, dass der Vorgang eines Thermal Runaway stark von verschiedenen Faktoren abhängig ist, wie z.B. vom Ladezustand der Zelle. Je voller die Batterie geladen ist, desto niedriger ist die Initialtemperatur der thermischen Kettenreaktion.

Ein Thermal Runaway kann wie bereits erwähnt auch durch einen Kurzschluss verursacht werden, wobei zwischen externem Kurzschluss und internem Kurzschluss unterschieden wird. Ein externer Kurzschluss tritt auf wenn Pluspol und Minuspol einer Zell mit einem Leiter verbunden werden. Ein interner Kurzschluss kommt zustande, wenn sich Anode und Kathode im inneren der Zelle direkt berühren. Dies wird im normalen Betrieb durch einen Separator verhindert. Kommt es jedoch durch eine mechanische Belastung, große Deformationen oder durch eine chemische Reaktion zum Versagen des Separators, kann der Kontakt zwischen den beiden Elektroden hergestellt werden und ein Kurzschluss wäre die Folge.

#### 2.3 Zellversuche

Wie im vorigen Abschnitt erörtert wurde, stellt die Verwendung der Lithium-Ionen Technik neue Herausforderungen im Bereich der Fahrzeugsicherheit dar. Da sich Elektrofahrzeuge sowohl im regulären Betrieb als auch im Crashfall als möglichst sicher erweisen sollen, ist wichtig ein detailliertes Verständnis für die eingesetzten Zellen aufzubauen. Aus diesem Grund werden Zellversuche und Simulationen mit Zellmodellen durchgeführt. In diesem Kapitel wird etwas genauer auf die Versuche, die sich in Normen und in der Fachliteratur wiederfinden, eingegangen.

#### 2.3.1 Genormte Zellversuche

Um einheitliche Sicherheitsstandards zu schaffen ist es nötig genormte Zelltests durchzuführen. Die Problematik liegt jedoch darin, dass es kein einheitliches System zur Feststellung der Zellsicherheit gibt. Wie Abbildung 11 zeigt verwenden verschiedene Institutionen unterschiedliche Normen um Belastungstests der elektrischen Energiespeicher durchzuführen. Laut UL [15] können die meisten Tests der Normen in mechanische Tests, Elektrische Tests und Umgebungs-Tests unterteilt werden (siehe Abbildung 12). Zu Gunsten der Übersichtlichkeit werden die englischen Bezeichnungen der Normen übernommen.

		υι					IE	С	ISO
Test Criteria/Standard	UL 1642	UL 1973**	UL 2054*	UL 2271**	UL 2580**	UL 2595	IEC 62133	CDV 62C19	ISO 12405-3
External short circuit	•	•	•	•	•	•	•	•	•
Abnormal charge / Overcharge	•	•	•	•	•	•	•	•	•
Forced discharge / Overdischarge	•	•	•	•	•	•	•	•	•
Crush	•	•		•	•	•	•		•
Impact (cell)	•		•	•	•			•	
Shock	•	•	•	•	•	•	•		•
Vibration	•	•	•	•	•	•	•		•
Heating (cell)	•		•	•	•	•	•	•	
Temperature cycling	•	•	•	•	•	•	•		•
Low pressure (altitude) (cell)	•			•	•	•	•		
Projectile / External fire	•	•	•	•	•				•
Drop		•		•	•		•	•	
Continuous low rate charging							•		
Molded casing heating test		•	•	•	•		•		
Insulation or isolation resistance				•	•		•		•
Internal short circuit test or propagation test		•			•		•	•	

Abbildung 11: Gängige Normen und zugehörige Tests [15]

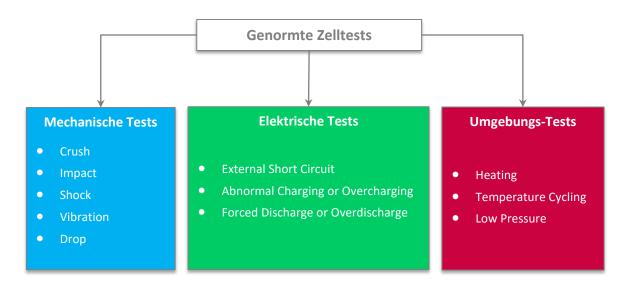


Abbildung 12: Einteilung von Zelltests nach UL-Norm

Nach UL-Norm werden beispielsweise folgende mechanische Testkonfigurationen durchgeführt:

- **Crush Test:** Eine Zelle wird zwischen zwei ebene Platten gelegt, wobei die Platten mit einer genau definierten Kraft (typischerweise 13 kN) gegeneinander gedrückt werden.
- Impact Test: Eine Zelle wird auf eine ebene Platte gelegt. Ein quer zur Zelle angeordneter zylindrischer Prüfkörper drückt mit einer bestimmten Kraft auf die zu prüfende Batterie.
- **Shock Test:** Bei diesem Test wird der Zelle eine vordefinierte Beschleunigung mit einer bestimmten Einwirkdauer aufgeprägt.
- **Vibration Test:** Die Zelle wird einer harmonischen Schwingung mit konstanter Amplitude und variabler Frequenz ausgesetzt. Die Einwirkdauer der Schwindung wird ebenfalls variiert.
- Drop Test: Die Zellen werden wiederholt aus einer vordefinierten Höhe auf einen harten Untergrund fallen gelassen. Durch anschließende Untersuchungen werden die Beschädigungen festgestellt.

Bei all diesen mechanischen Tests darf die getestete Zelle weder Feuer fangen, noch explodieren. Beim "Shock Test" und beim "Vibration Test" wird zusätzlich die Dichtheit der Zelle geprüft. Sollte eines dieser Kriterien verletzt werden, gilt der Zelltest als nicht bestanden.

Für Crash Simulationen sind hauptsächlich die mechanischen Tests von Bedeutung. Besonders interessant sind die Testkonfigurationen Crush und Impact, da es dort, ähnlich wie im Crash-Fall auch zu großen Deformationen kommt. Wie bereits beschrieben, können große Verformungen der Zelle

zum Versagen der Separator-Schicht in der Jelly Roll führen, wodurch es in vielen Fällen zum internen Kurzschluss kommt.

Auf die elektrischen Tests und die Umgebungs-Tests wird an dieser Stelle nicht genauer eingegangen, da sie für die vorliegende Arbeit von vernachlässigbarer Relevanz sind.

#### 2.3.2 Zellversuche in der Fachliteratur

In der Fachliteratur konnten mehrere Arbeiten gefunden werden, die sich mit mechanischen Zellversuchen beschäftigen. Als besonders interessant stellten sich die Arbeiten von Sahraei [16] und Greve [17] heraus, da sich beide Autoren darin hauptsächlich mit den vorhin erwähnten Crush und Impact Tests beschäftigen. Durch die Definition und die Durchführung von Zelltests werden erstellte Finite Elemente Modelle validiert, sowie das elektrische Versagen abgebildet. Das elektrische Versagen stellt dabei ein interner Kurzschluss der getesteten Zelle dar, was durch eine Spannungsmessung an den Polen detektiert wird. Neben der Zellspannung werden die auf den Impaktor wirkende Kraft, der Deformationsweg und die Zelltemperatur gemessen.

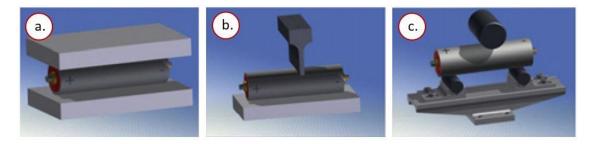
Sahraei [16] führt Zelltests durch, welche aus Penetrationsversuchen mit zylindrischem und kugelförmigem Impaktor, 3-Punkt-Biegung und Crush in radialer Richtung bestehen (siehe Abbildung 13). Besonders hervorgehoben wird der Versuch 3-Punkt-Biegung. Der Prüfling wird dabei auf zwei zylindrische Auflager gelegt. Ein weiterer zylindrischer Körper (Impaktor), welcher quer zur Zelle angeordnet ist, drückt von oben mittig auf die Batterie.

Die Beanspruchung dieses Tests kann dabei als Kombination verschiedener Belastungen betrachtet werden. Zum einen kommt es durch die Biegung der Zelle zu einer globalen Verformung, zum anderen stellt das Eindrücken des Zellmantels in der Mitte eine lokale Deformation dar.

Sahraei [16] geht davon aus, dass ein solches Verformungsbild der Zelle bei einem schweren Crash im Batteriemodul auftreten kann.



**Abbildung 13:** Versuchsanordnungen von Sahraei mit a.) Penetration mit zylindrischem Impaktor, b.) Penetration mit kugelförmigem Impaktor, c.) 3-Punkt-Biegung und d.) Crush in radialer Richtung [16]



**Abbildung 14:** Versuchsanordnungen von Greve mit a.) Crush in radialer Richtung, b.) Penetration mit zylindrischem Impaktor und c.) 3-Punkt-Biegung [17]

Die Versuchsanordnungen von Greve [17] sind in Abbildung 14 zu sehen. Ähnlich wie bei Sahraei werden ein radialer Crush-Versuch, eine Penetration und ein 3-Punkt-Biege-Versuch durchgeführt. Beide Arbeiten behandeln auch Tests mit einzelnen Komponenten der Zellen, wie z.B. Zugversuche mit Proben aus der Metalcan. Da diese Versuche für die vorliegende Arbeit von geringer Bedeutung sind, wird an dieser Stelle auf die jeweilige Literatur [16] [17] verwiesen.

## 2.4 Finite Elemente Modelle von zylindrischen Lithium-Ionen Zellen

Um die Sicherheit von Elektrofahrzeugen weiter zu steigern ist es nötig das Crashverhalten von Batteriemodulen und deren Einzelzellen möglichst früh in den Entwicklungsprozess einfließen zu lassen. Der elektrische Energiespeicher kann auf diese Weise besser in das Fahrzeug integriert und somit vor äußeren Einflüssen geschützt werden. Intelligentes Anordnen der Akku Packs im Chassis, oder Konstruktion von Gehäusen, die genau an den jeweiligen Zelltyp angepasst sind, stellen Möglichkeiten in diesem Zusammenhang dar. Durch frühes einbeziehen der Zelleigenschaften ist es weiters möglich den gesamten Aufbau und die Struktur des Fahrzeuges so abzustimmen, dass die Batterien besonders vor kritischen Belastungsarten geschützt werden.

Moderne Fahrzeuge werden größten Teils am Computer entwickelt, weshalb es nötig ist Finite Elemente Modelle der eingesetzten Akkumulatoren zu verwenden. Ein Finite Elemente Modell ist dabei eine vereinfachte virtuelle Nachbildung von einzelnen Zellen und Zellpaketen, welche die Eigenschaften der realen Zellen möglichst genau wiedergeben soll. Da ein Kurzschluss Auslöser eines Thermal Runaways sein kann, ist es für sicherheitstechnische Bewertungen wichtig das elektrische Versagen der Batterien mit dem Zellmodell nachbilden zu können. Dabei muss ein korrekter Zusammenhang zwischen der Deformation der Zelle und dem Eintreten eines internen Kurzschlusses gefunden werden.

Simulationsmodelle können je nach Anforderungen unterschiedlich aufgebaut werden, wobei grundsätzlich zwischen mikroskopischem und makroskopischem Aufbau unterschieden wird. Beide Modell-Varianten werden im Folgenden etwas genauer beschrieben.

#### 2.4.1 Mikroskopisches Modell

Ein mikroskopisches Modell ist eine komplexe Nachbildung, welche den Aufbau der Zelle in detaillierter Form wiedergibt. Die einzelnen Bauteile werden dabei als eigene Komponenten angenähert. Ein Beispiel eines mikroskopischen Modells einer 18650 Rundzelle ist in Abbildung 15 dargestellt.

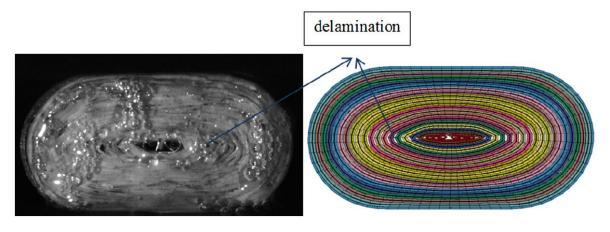


Abbildung 15: mikroskopisches Modell einer 18650 Zelle im Vergleich zur realen Zelle [16]

Sahraei [16] verwendet dieses Modell zur Untersuchung der Delamination in der Jelly Roll während des radialen Crush Versuchs. Bei diesem Vorgang kommt es bei großer Verformung zum Ablösen der einzelnen Schichten von Anode, Kathode und Separator, was zu einem anisotropen Verhalten der Zelle führt. Wie zu erkennen ist, werden die einzelnen Schichten der Jelly Roll mit unterschiedlichen Komponenten modelliert. Eine Vereinfachung wurde in der Hinsicht getroffen, als dass der Kern nicht spiralförmig aufgewickelt wird, sondern aus konzentrischen Schichten besteht.

Durch den hohen Detaillierungsgrad eines mikroskopischen Modells können Deformationsvorgänge mit sehr guter Genauigkeit nachgebildet werden. Des Weiteren ist es möglich die Einflüsse auf die einzelnen Komponenten zu analysieren und beispielsweise das Versagen der Separator-Schicht nachzustellen.

Zwischen Komponenten die sich berühren müssen genaue Kontaktbedingungen definiert werden, wobei auch Faktoren wie z.B. Reibwerte eine große Rolle spielen. Weiters müssen für alle Bauteile die richtigen Materialparameter gefunden werden.

All dies stellt einen großen Aufwand bei der Erstellung eines mikroskopischen Zellmodells dar und ist somit als Nachteil dieser Modellierungsart zu werten. Ein weiteres Problem solch komplexer Aufbauten ist die Limitierung bei der Wahl der Elementgröße durch die geringe Wandstärke der einzelnen Schichten. Da die Elementgröße bei Volumen-Elementen zur Kalkulation des Zeitschrittes herangezogen wird, bedeuten kleine Elemente einen kleinen Zeitschritt und dadurch hohe Berechnungszeiten [18].

Mikroskopische Modelle sind zwar gut für Simulationen und Untersuchungen von Einzelzellen und deren Komponenten geeignet, für die Gesamtfahrzeuganwendung sind sie aufgrund der oben genannten Nachteilen jedoch unzweckmäßig

#### 2.4.2 Makroskopisches Modell

Ein makroskopisches Modell ist eine sehr vereinfachte Abstrahierung der realen Zelle, wobei mehrere Bauteile zu einer Komponente zusammengefasst werden. Ein Beispiel eines makroskopischen Modells einer 18650 Zelle wie es am Institut für Fahrzeugsicherheit der Technischen Universität Graz eingesetzt wird, zeigt Abbildung 16.

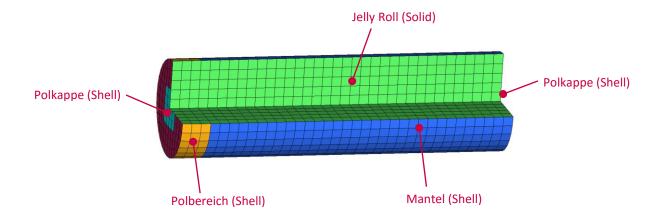
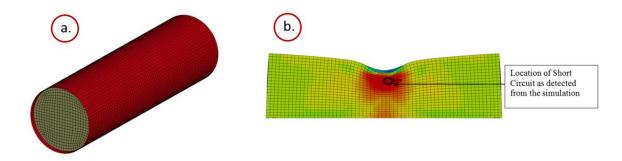


Abbildung 16: makroskopisches Modell einer 18650 Zelle [26]

Mantel, Polbereich und Polkappen wurden aus Schalenelementen modelliert. Um die mechanischen Eigenschaften des Polbereichs nachzubilden, welche durch den Aufbau der Zelle entstehen, wurde dieser als eigene Komponente mit separaten Materialeigenschaften definiert. Die einzelnen Schichten der Jelly Roll wurden in diesem Beispiel zu einer homogenen Komponente vereint. Es ist dadurch möglich größere Volumenelemente (1,8 Millimeter) im Vergleich zu mikroskopischen Modellen zu erstellen, was zur Steigerung des Zeitschrittes führt.

Die Problematik liegt jedoch darin für die homogene Abstrahierung der Jelly Roll ein Material zu finden, welches die heterogenen und anisotropen Eigenschaften der realen Jelly Roll nachbilden kann. Zu diesem Zweck wird die Methode des repräsentativen Volumentelements angewendet. Ein Repräsentatives Volumen Element (RVE) ist dabei ein makroskopisches Volumen, in welchem der Mittelwert einer mikroskopischen Größe realisiert wird. Der Bereich der Mittelung soll dabei groß sein im Vergleich zur mikroskopischen Fluktuation, jedoch klein verglichen mit den makroskopischen Schwankungen aufgrund der Heterogenität des Mediums [19].

Ein weiteres makroskopisches FE-Modell einer 18650 Rundzelle konnte in einer Veröffentlichung von Sahraei [16] gefunden werden (siehe Abbildung 17).



**Abbildung 17:** a.) makroskopisches Modell einer 18650 Zelle nach Sahraei, b.) Ort des Kurzschlusses im deformierten Zustand [16]

Dabei handelt es sich um einen ähnlichen Aufbau, bei dem die Jelly Roll als homogene Komponente aus ca. 0,8 Millimeter großen Volumen-Elementen aufgebaut ist. Der Mantel der Zelle wurde aus Schalen-Elementen modelliert, wobei die Polkappen und der Polbereich vernachlässigt wurde. Sahraei gelang es mit diesem Ansatz ein Kurzschlusskriterium zu entwickeln und den Ort des Kurzschlusses vorherzusagen. Elektrisches Versagen wird dabei durch eine lokale Spitze im Kraft-Weg-Verlauf detektiert und tritt an der Stelle auf, an der die Hauptzugspannung als erstes einen Wert von 10 MPa überschreitet.

Greve hat in einer Arbeit [17] ebenfalls ein makroskopisches Zellmodell einer zylindrischen Lithium Batterie entwickelt. Es handelt sich dabei um eine 602030 Zelle die größere Abmessungen hat als eine 18650 Zelle (Durchmesser 60 mm, Länge 203 mm), im Aufbau aber sehr ähnlich ist. Die Konstruktion des Zellmodells ist in Abbildung 18 zu sehen. Die Jelly Roll wurde als homogene Komponente mit Volumen-Elementen modelliert, wobei der Einfachheit halber ein isotropes Materialverhalten angenommen wurde. Der Mantel und die Polkappen wurden aus Schalen-Elementen aufgebaut.

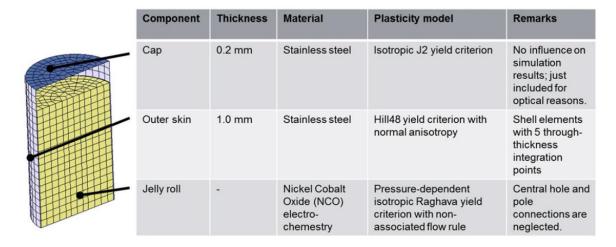


Abbildung 18: Aufbau des Zellmodells nach Greve [17]

Die Netzgröße des Zellmodells beträgt ca. 5 mm. Mit einem spannungsbasiertem Versagenskriterium nach Mohr und Coulomb wurde eine Möglichkeit integriert, mit welchem Ort und Zeitpunkt eines Kurzschlusses vorhergestagt werden kann.

Generell kann gesagt werden, dass die Vorteile eines makroskopischen Modells der niedrige Modellierungsaufwand sowie eine geringe Berechnungszeit sind, weshalb sie sich auch besser für Gesamtfahrzeugsimulationen eignen. Der Vorteil der Rechenzeit ergibt sich dabei aus der Möglichkeit größere Elemente für die Modellierung der Zelle zu verwenden.

Makroskopische Modelle können aus verschiedenen Elementen aufgebaut werden, wobei zwischen Solid-, Shell-, und Beam Elementen unterschieden wird. Bei aufwendigeren Modellen kommen meist Kombinationen aus den verschiedenen Elementtypen zum Einsatz. Im Folgenden werden die einzelnen Elementtypen kurz beschrieben.

## **Bauteile aus Solid Elementen**

Solid-Bauteile sind aus einzelnen 3-dimensionalen Volumenelementen aufgebaut. Da sich damit komplexe Geometrien relativ einfach und mit hoher Genauigkeit modellieren lassen ist diese Variante sehr verbreitet. Solid-Elemente übertragen Normal- und Schubspannungen in allen drei Raumrichtungen und können dadurch beispielsweise für die Abstrahierung der Jelly Roll verwendet werden (siehe Abbildung 16). Solid-Elemente stellen den komplexesten Element-Typ dar und sind aus diesem Grund rechenintesiver als andere Elemente mit derselben Netzgröße.

#### **Bauteile aus Shell Elementen**

Bei diesen Bauteilen kommen lediglich Schalenelemente zum Einsatz, welche im Vergleich zur Länge und Breite eine sehr geringe Dicke haben. Durch spezielle Annahmen der Querschnittsverformung können Schalenelemente als zweidimensionales Kontinuum angesehen werden. Verwendet werden sie normalerweise zur Modellierung dünnwandiger Bauteile wie z.B. Blechkonstruktionen. Shell-Elemente eignen sich deshalb gut zum Aufbau des Mantels und der Polkappen einer Rundzelle (siehe Abbildung 16). Durch die Vereinfachungen, die bei diesen Elementen getroffen werden, kann der Berechnungsaufwand der Modelle erheblich reduziert werden.

#### **Bauteile aus Beam Elementen**

Beam-Elemente sind stark vereinfachte linienförmige Elemente. Durch zahlreiche Annahmen und Idealisierungen, wie z.B. eine konstante Querschnittsfläche besitzen sie den geringsten Rechenaufwand und können zur Annäherungen von stabähnlichen Bauteilen verwendet werden. Die Schwierigkeit bei komplexen Komponenten liegt darin, die Geometrie der Bauteile mit den stark vereinfachten Elementen so anzunähern, dass sich ein ausreichend realistisches Verhalten ergibt. Beam-Elemente werden aus diesem Grund im Allgemeinen für sehr einfache Bauteilstrukturen verwendet. In der Fachliteratur konnten keine Zellmodelle gefunden werden, bei denen Beam-Elemente zum Einsatz kommen. Theoretisch würden sich jedoch aus den vorhin genannten Vereinfachungen erhebliche Vorteile in Bezug auf die Berechnungszeit der Zellmodelle ergeben.

Schlussendlich hängt die Wahl der Elementform von den Anforderungen an das Modell und der geometrischen Struktur des Bauteils ab. Grundlegend kann gesagt werden, dass die Berechnungszeit der Simulation mit der Komplexität der Elemente zunimmt. Für einen geringen Rechenaufwand sollten die Modelle also so einfach wie möglich und nur so komplex wie nötig sein.

#### 2.4.3 Probleme der aktuellen Berechnungsmodelle

Durch eine Literaturrecherche wurde ein Eindruck über die aktuell verwendeten FE-Modelle von zylindrischen Zellen gewonnen. Bei den meisten Arbeiten wird dabei auf einen makroskopischen Aufbau gesetzt, wobei der Mantel aus Shell-Elementen nachgebaut wird und die Jelly Roll aus Solid-Elementen besteht.

Wie zum Beispiel der Vergleich zwischen Zelltest und Simulation von Sahraei in Abbildung 19 zeigt, gelingt es mit diesen Varianten bereits gut das mechanische Verhalten der realen Zellen nachzubilden. Ein Kurzschlusskriterium konnte ebenfalls entwickelt werden um damit Zeitpunkt und Ort des Kurzschlusses zu prognostizieren.



Abbildung 19: Vergleich Zelltest und Simulation von Sahraei [16]

Aktuelle Modelle haben jedoch das Problem, dass sie sich als sehr rechenintensiv heraus stellen und somit für die Gesamtfahrzeugsimulation nur bedingt geeignet sind, was folgendes Rechenbeispiel verdeutliche soll.

Simulationsmodelle von Gesamtfahrzeugen bestehen aus ca. 3 – 8 Millionen Elementen [20]. Die in Abbildung 16 gezeigte Nachbildung einer Zelle besteht aus ca. 4.600 Elementen. Würde man dieses Modell beispielsweise zur Simulation eines Tesla Model S verwenden, welches mit ca. 7.000 Einzelzellen bestückt ist [6], käme man lediglich für die Akkus auf eine Summe von ca. 32 Millionen Elementen.

Ein weiteres Problem der bisherigen Simulationsmodelle kann die geringe Elementgröße sein. Die minimale charakteristische Länge der Elemente wird nämlich zur Berechnung des Zeitschrittes herangezogen. Üblicherweise ist man bestrebt einen großen Zeitschritt zu erhalten, da sich daraus geringere Berechnungszeiten ergeben. Für Crash Simulationen mit Finite Elemente Modellen bewegt sich der Zeitschritt üblicherweise in einem Bereich von  $10^{-7} - 10^{-6}$  Sekunden [20]. Das Zellmodell in Abbildung 16, welches am Institut für Fahrzeugsicherheit der Technischen Universität Graz eingesetzt wird, hat mit seiner Elementgröße von ca. 1,8 mm einen Zeitschritt von 1,56 x  $10^{-7}$  Sekunden. Dieser Zeitschritt befindet sich zwar innerhalb des üblichen Bereichs, liegt jedoch nahe an der unteren Grenze. Berücksichtigt man nun, dass dieses Modell verglichen mit anderen in der Fachliteratur gefundenen Modelle ein verhältnismäßig grobes Netz hat, wir die Problematik der kleinen Elemente ersichtlich.

Die mechanischen Eigenschaften der zylindrischen Lithium Ionen Zellen unterscheiden sich sehr stark von Hersteller zu Hersteller [16]. Durch eine hohe Anzahl von Parametern, die für die Definition von Solid-Elementen nötig ist, ergibt sich ein hoher Aufwand für die Anpassbarkeit der bisherigen Simulationsmodelle auf die verschiedenen Zellen. Für das Modell in Abbildung 16 mussten beispielsweise 41 Parameter mittels Optimierungsprozess angepasst werden um ein realistisches mechanisches Verhalten zu erlangen. Es war dabei nötig plausible Startwerte und Grenzen für jede Variable zu finden. Wird eine Adaption auf eine Zelle mit anderen mechanischen Eigenschaften gefordert, müssen alle Parameter erneut angepasst werden, was einen erheblichen Aufwand darstellt.

## 3 ZIEL DER ARBEIT

Ziel der vorliegenden Arbeit ist es ein makroskopisches Finite Elemente Modell einer 18650 Zelle zu entwickeln. Der Fokus der Entwicklung soll neben dem möglichst genauen Abbilden der mechanischen Zelleigenschaften auf der Minimierung der Berechnungszeit liegen, sodass das neue Modell für Crashsimulationen von Gesamtfahrzeugen verwendet werden kann. Darüber hinaus soll ein Kurzschlusskriterium entwickelt werden, mit dem es möglich ist ein elektrisches Versagen der Zelle unter mechanischen Deformationsbelastungen vorherzusagen. Die Parameter des Zellmodells sollen dabei auf ein Minimum reduziert werden, damit sich eine gute Anpassbarkeit auf verschieden Zelltypen ergibt.

Zum Erreichen dieser Ziele wurde folgende methodische Vorgehensweise gewählt:

- Eine Literaturrecherche wurde durchgeführt um einen Überblick über existierende Modellierungsarten von Lithium Ionen Rundzellen zu erhalten. Außerdem wurden Aufbau und Eigenschaften eines bestehenden Finite Elemente Modells des VSI analysiert.
- Die durch Zelltests gewonnenen Versuchsdaten wurden ausgewertet und das mechanische Verhalten der Prüflinge wurde untersucht. Auf diese Weise konnte eine Validierungsgrundlage für das neue Simulationsmodell gewonnen werden. Des Weiteren wurden die Randbedingungen der Simulation festgelegt.
- Ein neues Zellmodell wurde aufgebaut, mit welchem stabile Simulationen mit kurzen Berechnungszeiten durchgeführt werden können. Durch den Einsatz einfacher diskreter Beam-Elemente wurde der Zeitschritt maximiert und ein anisotropes Materialverhalten erzielt.
- Eine Reduktion der Modellparameter auf ein Minimum wurde durchgeführt, indem die einzelnen Variablen auf ihren Einfluss auf die Ergebnisse überprüft wurden.

- Mit einem erstellten Optimierungsprozess konnten die Materialparameter so festgelegt werden, dass sich ein realistisches Verformungsverhalten der virtuellen Zelle ergab und die Kraft-Weg-Verläufe der Zelltests angenähert werden konnten.
- Durch Kombination von mechanischem und elektrischem Verhalten wurde ein Kriterium erstellt, mit dem das elektrische Versagen der Zelle in einer virtuellen Simulationsumgebung abgebildet werden kann.

Im Zuge dieser Arbeit wurde eine wissenschaftliche Veröffentlichung erstellt. Diese Publikation enthält die wichtigsten Informationen und Daten des Projektes und findet sich in folgendem Kapitel wieder. Die Veröffentlichung wurde in englischer Sprache verfasst und stellt eine eigenständige Arbeit dar. Aus diesem Grund kommt es an manchen Stellen zu Wiederholungen der Dokumentation der Masterarbeit.

# **4 VERÖFFENTLICHUNG**

#### 4.1 Abstract

In this research a parameterized beam-element-based modeling approach for cylindrical lithium battery cells was developed. The cylindrical cell shape was approximated by radial beam elements connected to each other in circumferential and longitudinal direction. The discrete beam element formulation is used to define an anisotropic material behavior. Because of the intention to use the cell model in total vehicle crash simulations, the focus of development was on minimizing the computational effort whilst obtaining accurate mechanical behavior at the same time. The example of an 18650 lithium cell model constructed in LS-Dyna is used to show the high degree of automation in adaption of the model parameters to achieve realistic deformation. Therefore the Sequential Response Surface Method (SRSM) is used to create an optimization process to fit the mechanical properties of the model materials. An abuse testing program, consisting of the load cases Crush-X, Crush-Z, Penetration and 3-Point-Bending, was performed to evaluate the mechanical behavior and the onset of an internal short circuit of commercially available 18650 lithium cells. Furthermore a short circuit criteria, in form of maximum engineering strain of the beam elements, was created to predict the onset of electrical failure during mechanical abuse. By reducing the number of strength-related elements to 1600 a fast and yet accurate cell model could be set up.

### 4.2 Introduction

Lithium-ion batteries are currently the most used battery type for the propulsion of EV and HEV. However due to their high energy, their usage entails high potential levels of risk, inter alia in case of deformation. Under certain circumstances crashes can lead to internal short circuits, which can result in thermal runaways and the release of hazard substances [1]. To ensure and possibly increase the safety of electric vehicles, crash simulations are performed already in the early stages of development. One of the most common techniques is the simulation of a possible crash trough the Finite Element Method (FEM). For this scope finite element models of battery cells can be used [11].

Depending on requirements, battery cells can be modeled as microscopic or macroscopic models. A microscopic model is a very detailed and complex model where every single part of the cell is constructed as separate component e.g. anode, cathode and separator of the jelly roll. The advantage of such a detailed model is the possibility to analyze the interactions of the single components with

each other and the processes taken place in the structure of the model. Furthermore a detailed forecast of mechanical and electrical failure is possible. However, due to their complexity, microscopic models require a high computational effort. For this purpose microscopic models are useful for simulations of single cells and modules, but usually unsuitable for total vehicle crash simulations.

Macroscopic models are simplified models where several components are combined. Because of this simple construction, macroscopic models can be built of less elements with a bigger mesh size, which in turn decreases the computational effort. A bigger mesh size reduces the accuracy of simulation results. Therefore care has to be taken to find the right compromise between accuracy and simulation speed. Compared to microscopic models the maintenance cost as well as the effort of development is significant lower at macroscopic models. A particular structure analyzes however is not possible.

Depending on the particular application, the cell model must meet specific requirements. To perform crash simulations with plausible loads, realistic strength values in the different degrees of freedom are needed. Furthermore the deformation behavior of the cells should be recreated as accurate as possible.

Due to the high electrical capacity of up to 90 kWh [16], electric cars require a great number of single battery cells. To model these cells an even higher number of finite elements is necessary. To minimize the computational effort, a specific objective should be to create a model as simple as possible.

The mechanical behavior of commercially available cylindrical battery cells vary from one manufacturer to another because of the use of different materials [3]. Therefore an easy adaption of the model parameters is desirable.

For hazard assessments under mechanical abuse conditions a criteria to predict the onset of an internal short circuit should be defined. Therefore a specific property of the cell model with a correlation between deformation and electrical failure must be found.

In the actual State of the Art, several finite element models were found. Most of them use macroscopic designs consisting of solid and shell elements. However a cell model for total vehicle crash simulations which meets all the listed requirements could not be found. This paper focuses on the development of an innovative finite element model of an 18650 lithium ion cell not consisting of solid elements.

### 4.3 State of the Art

In this chapter existing finite element models of cylindrical lithium-ion cells are described. Moreover a closer look at the actual abuse tests for lithium-ion cells, as well as a resume of the element definition in a Finite Element Analysis (FEA), will be provided.

#### 4.3.1 Construction of an 18650 lithium-ion battery

An 18650 cell is approximately 18 mm in diameter and 65 mm in length. In broad terms the battery consists of a jelly roll, a casing and poles (see Fig. 1). The jelly roll is made of thin sheets of anode, cathode and separator which are rolled in a spiral shape. The casing is made of metal sheets and protects the cell from external influences. The positive pole includes different components such as gasket, safety vent and cathode cover. The negative pole contains the anode cover and an insulator. For this reason the poles have different mechanical properties then the jelly roll, which has to be considered at the construction of the finite element model.

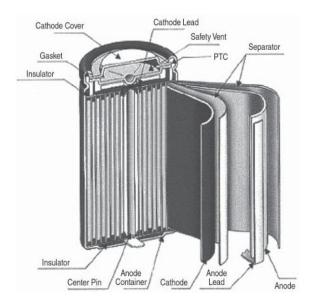


Fig. 1. Construction of a cylindrical lithium ion battery cell [9]

#### 4.3.2 Element types in FE simulations

In finite element programs the user can choose from a range of different element types. In order to highlight the theoretical advantage of a beam element model, the theory of element types in finite element simulations will be described more in detail.

According to Fröhlich [5] the elements can basically be classified in line, surface and volume elements as shown in Fig. 3. Furthermore every group has different types and numerous special elements.

Line elements consist of two nodes and they are represented as lines, as the name suggests. They are commonly used for creating framework structures and they are very simplified elements where many assumptions have been made. A distinction can be made between rod and beam elements. The nodes of rod elements have translational degrees of freedom (DOF) only. This means that rod elements can

only transfer forces but not moments and the nodes automatically act as joints. Beam elements provide rotational DOF as well and also transfer bending and torque.

Surface elements are represented as triangles or quadrilaterals and consist of three or four nodes. They are commonly used for modelling thin-walled parts like sheet metal or castings. The thickness of surface elements is very small compared to length and width. Tension in thickness direction is not considered and simplifications regarding cross section properties are made. [6] Similar to line elements, surface elements can be distinguished in membrane elements (moments are not transferred) and shell elements (moments are transferred).

Volume elements have four, six or eight nodes and can be used for all kinds of components. Because of a high amount of element layers, solid models have minimal nodal rotations. Therefore nodes of volume elements usually only have translational degrees of freedom. This saves a lot of computational effort by getting comparatively good results. Solid models require the smallest effort of geometrical preparation and because of this they are increasingly used. The choice of element type depends on the requirements of the simulation, but it can be said that the simpler the elements are, the lower the computational effort is. This means normally volume elements have the highest computational effort of the element groups. For example, experience has shown that a shell model is about eight times faster in calculation then an equivalent solid model [7]. Complex simulation models consisting of beam elements are laborious to build, but theoretically they should be very fast in calculation compared to the other element types.

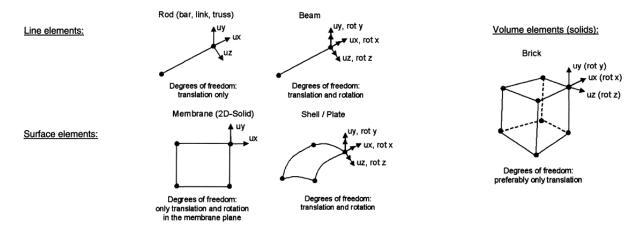


Fig. 2. Groups of finite elements [5]

### 4.3.3 FE-models of cylindrical battery cells

A publication by Greve [2] could be found, where the author built a macroscopic finite element crash simulation model of a cylindrical HP 602030 lithium ion battery cell. This cell type has bigger dimensions then the 18650 cell (60mm diameter, 200mm length) but is similar in construction. In this model the housing was built by approximately 5x5 mm shell elements and the jelly roll was modeled as a homogeneous part consisting of approximately 5x5x5 mm solid elements. For every cell component a modular user material model (MMM), developed by Volkswagen Group Research, has been used. Greve [2] discovered that short circuit is caused by fracture of the jelly roll in all load cases he investigated. For this purpose he added a stress-based criterion after Mohr and Coulomb to the model. With this criterion the onset as well as the location of a short circuit can be predicted.

A similar macro-mechanical model has been developed by Sahraei [3], which is shown in Fig. 2. The cell housing was modeled by 4-node fully integrated shell elements and the jelly roll was built by fully integrated solid elements, whereby the mesh size is about 0,8mm. For the shell elements the material piecewise linear plasticity of LS-Dyna was used. The jelly roll consists of the material crushable foam from the library of materials of LS-Dyna. For this material different properties in tension and compression can be defined, which is necessary because of the anisotropic behavior of the jelly roll. All in all the model has 11.167 shell elements and 29.106 solid elements. Sahraei [3] detects the onset of a short circuit at the element that reaches and maintains a principal tensile stress of 10 MPa.

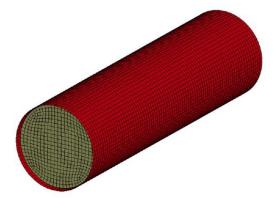


Fig. 3. FE model of the jelly roll and shell casing [3]

#### 4.3.4 Abuse tests

In some publications typical tests for the mechanical behavior of cylindrical lithium ion cells can be found. There are various test configurations for different investigations. Greve [2] performed several tests to analyze the onset of a short circuit and to identify the parameters of the used material models (see Fig. 4). The tests were performed with discharged cells at a state of charge (SoC) slightly above 0%. Cell temperature and cell voltage were measured during the tests as well as punch displacement and punch force. As the cell voltage reached the value of 0, a short circuit was detected and the mechanical test was interrupted. Greve [2] noticed a reduction of the force value just before the onset of the internal short circuit. Computer tomography analysis has shown that the jelly roll ruptures at this point of deformation. To identify the parameters of the cell housing, tensile tests were performed on specimen from flattened housing sheets as well as tube bending tests with the empty casing of the cell.



Fig. 4. Cell test configurations [2]

Sahraei [3] also performed tensile tests on specimen of the cell casing of 18650 lithium ion cells to identify the material parameters of his shell elements. She mentioned that, some amount of anisotropic properties were introduced in the casing material by manufacturing process, but in steels the small amount is negligible. Therefore the tests were only performed in one direction and the material was taken as being isotropic. The strain was measured by digital image correlation (DIC) and displacements and loads were recorded by an MTS 200 kN Universal Test Machine. Sahraei [3] also performed lateral indentation tests, three-point-bending tests and radial crush tests similar to Greve [2]. In addition, a lateral indentation test with a hemispherical punch was performed. The tested 18650 cells were discharged (SoC at about 10%) and force, displacement, voltage and cell-surface temperature were measured. At the radial crush test Sahraei [3] noticed, that delamination of the jelly roll leads to an anisotropic behavior of the cell. Furthermore she concluded that a local peak in the resisting force of the cell tests indicates the onset of a short circuit.

In a publication of Lamb [4] different tests of cylindrical lithium ion cells could be found. In this work blunt rod indentation and puncture tests were performed. Therefore a stainless steel blunt rod with a diameter of 3 mm was mounted to a hydraulically driven actuator and the tested 18650 cells were punctured both radial and lengthwise. The load was applied until the rod penetrated the cell completely or a voltage drop was observed. Also tests with a sharp nail, instead of the blunt rod were performed. Force, displacement, voltage and cell surface temperature were the measured outputs of all tests. Lamb [4] noticed that every single puncture of the cells lead to internal short circuit.

SAE J2464 is a recommended practice for electric vehicle battery abuse testing by the Society of Automotive Engineers [15]. The test program includes a variety of different mechanical, thermal and electrical abuse tests. For the present paper the controlled crush and the penetration is of interest. The controlled crush is a test where the cells are compressed between a flat and a textured platen. The textured platen have semicircular intruders that are arranged 30 mm apart and have a radius of 75 mm. During the penetration test the cells were punctured by a mild steel pointed rod with a diameter of 3 mm. This test is similar to the puncture test of Lamb [4].

#### 4.4 Performed cell tests

To analyze the mechanical behavior of the battery cells as well as to determine the onset of an internal short circuit during mechanical abuse, cell tests were performed as well in the present work. To validate the properties four different test configurations have been defined. The tests are oriented to the SAE-J2464 standards as well as to cell tests found in technical literature. The test program consists of the tests Crush-X, Penetration, Crush-Z and 3-Point-Bending as shown in Fig. 5. Five Commercially available 18650 battery cells with a state of charge of 100% were tested for each load case. Force, displacement and ambient temperature has been measured during the tests and videos with a framerate of 60 frames per seconds were captured. To detect the onset of an internal short circuit, cell voltage was recorded for every test. The minimum displacement for the respective abuse test was defined as 50% of the cell dimension in load direction.

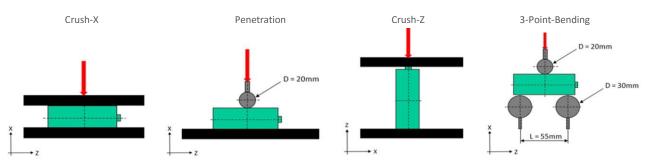


Fig. 5. Test configurations for validation of the cell model [12]

#### 4.4.1 Crush-X

As shown in Fig. 6 the cells were crushed between two flat metal plates in radial direction. To avoid external short circuits, insulating plates of fiber composite where applied between the cell and the metal plates. The load was applied with a constant velocity of 1 mm/s until a displacement of approximately 13 mm. This test configuration is well suited for observing the lateral strength of the cell.

#### 4.4.2 Penetration

The performed Penetration test is also shown in Fig. 6. A cylindrical rod with one insulation layer was mounted to the press. The impactor is 20 mm in diameter and is positioned centrically across the cell. The supporting surface was insulated by a 3 mm plate of fiber composite. Cell deformation was about 10 mm with a constant velocity of 1 mm/s. With this test configuration the behavior of the cell during a local lateral deformation can be analyzed.

#### 4.4.3 Crush-Z

As shown in Fig. 6 the cells were arranged between two flat metal plates with a 3 mm layer of insulating fiber composite in axial direction. The maximum displacement for this test configuration was about 40 mm. The force was applied with a constant velocity of 1 mm/s. Global axial strength of the cells can be evaluated with this test configuration.

#### 4.4.4 3-Point-Bending

The cells were put on two supporting cylinders with a diameter of 30 mm (see Fig. 6). The same cylindrical impactor was used as for the penetration test. The cells were deformed with a constant velocity of 1 mm/s until a displacement of about 20 mm. With this test configuration a combination of local lateral deformation and global bending deformation can be analyzed and validated.



Fig. 6. Simulation model of the test configurations [12]

#### 4.5 Finite element model of the 18650 cell

In this chapter the creation of the finite element model, consisting of beam and shell elements is described. The FE model was built by using LS-Dyna and HyperWorks.

#### 4.5.1 Geometric construction

The created finite element model of the battery cell is shown in Fig. 7. The cylindrical lithium-ion cell was divided into several equidistant layers along the axial direction. Care was taken to find the right distance between the single layers. The distance should be as high as possible to create a low amount of elements, but for realistic deformation a minimum number of elements is needed. The number of layers was varied and the deformation pattern of the model was compared to the results of a solid element model. With a layer distance of 2.031 mm a deformation with sufficient accuracy can be reached.

Every layer has 16 beam elements which are arranged in radial direction with a 22.5 degree angle. To detect this angle the same procedure was used as for the layer distance. On the outside surface of the cell this radial beam elements are connected with circumferential beam elements. Every node of a layer (corner nodes and center node) is connected to the related node of the adjacent layer by longitudinal beam elements.

In order to receive realistic cell behavior, the beam elements are divided into different components. The radial beam elements and the circumferential beam elements are summarized to a component called "layer beams" (LB).

The longitudinal beam elements at the poles are modeled as separate component and called "pole beams" (PB). Remaining longitudinal beam elements are defined as the "axial beams" component (AB).

Every component, consisting of beam elements, has the same element properties but different material characteristics. The beam elements of the component LB use a local element coordinate system (see Fig. 10) and are arranged so as the orientation of the beams is rotationally symmetrical. For PB and AB beams a global cell coordinate system (x, y, z) is defined as shown in Fig. 7. The casing of the battery is formed out of shell elements with a mesh size predefined by the beam elements. The shell elements are only on the outside surface of the model.

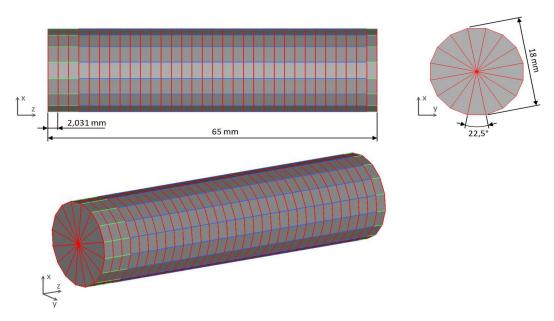


Fig. 7. Construction of the finite element model

#### 4.5.2 Elements of the cell model

The model consists of 1600 beam elements and 544 shell elements. In Fig. 8 the LS-Dyna section card of the beam elements is shown. The element form 6 (discrete beam) is used, which is necessary for the subsequently described material. For quadrature rule the default value of 2.0 (2 x 2 Gauss quadrature) is maintained. The SCOOR factor affects the formulation of a discrete beam and also influences the update of the local coordinate system.

```
*SECTION_BEAM

$
$...>...1...>...2...>...3....>...4...>...5...>...6
$ sid elform shrf qr/irid cst scoor
100000 6 2.0 3.0

$
$
$ vol
3.4
```

Fig. 8. Section card of the beam elements

For true beam-like behavior LS-Dyna [10] recommends a value of 2.0 or 3.0. With a SCOOR factor of 2.0 an implausible shrinking of the model was detected at some load cases. The most realistic deformation could be achieved with a SCOOR factor of 3.0. VOL defines the volume of discrete beams and is used in mass calculation. With the material properties that will be discussed later in this paper and a VOL value of 3.4 the cell model has an appropriate mass of 45 grams.

To define the shell elements, the Hughes-Liu formulation (ELEFORM = 1) is used with a number of through thickness integration points (NIP) of 3 (see Fig. 9). Every shell element has a uniform thickness of 0.1 mm (T1, T2, T3, and T4).

```
*SECTION_SHELL

$
$...>...1...>...2...>...3...>...4...>...5...>...6

$ sid elform shrf nip propt qr/irid
    100001 1 3

$
$
$
$ t1 t2 t3 t4 nloc
    0.1 0.1 0.1 0.1
```

Fig. 9. Section card of the shell elements

#### 4.5.3 Materials of the cell model

The shell elements are added for contact definitions only and have no mechanical properties. Therefore the material MAT\_009 (MAT\_NULL) from the LS-Dyna library is used. With this material the equations of state can be considered without computing deviatoric stresses [10]. Because the mass of null shell elements is computed, a reasonable density of 7800 kg/m³ is determined.

For the components consisting of beam elements, the material MAT\_119 (MAT\_GENERAL\_NONLINEAR\_6DOF\_ DISCRETE\_BEAM) is applied. This material is a general spring/damper model where load curves in every degree of freedom can be set [10]. To define the directions the local r-s-t-coordinate system of every beam is used (see Fig. 10).

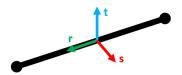


Fig. 10. Coordinate system of a beam element

```
*MAT_GENERAL_NONLINEAR_6DOF_DISCRETE_BEAM

$
$...>...1...>...2...>...3...>...4...>...5...>...6...>...7

$ mid ro kt kr iunld offset dampf
100000 7.8E-09 0 1

$
$ lcidtr lcidts lcidtt
100 101 101
```

Fig. 11. Material card of the beam elements

Fig. 11 shows the material card of MAT\_119 of the LB component. For every beam-component a density of 7800 kg/m³ is defined. IUNLD describes the unloading option of MAT\_119 and is set to 0. A value of 0 means that loading as well as unloading follows the loading curve. The damping factor (DAMPF) effects the size of the time step and the quality of calculated force profiles. With an increasing damping factor, the time step decreases and the force profiles get smoother. LS-Dyna [10] recommends values in the neighborhood of unity. For the components LB and AB a value of 1 is sufficient for smooth force profiles, but for the component PB a higher damping factor of 2.5 is necessary to avoid oscillation. The load curves of the beam elements are symmetric in tension and compression and are defined by translational force resultant along a local axis versus relative translational displacement.

 Table 1
 Load curves of beam components

Table 1 Load carves of beam components				
	LCIDTR	LCIDTS	LCIDTT	
Component LB	100	101	101	
Component AB	102	103	103	
Component PB	104	103	103	

Table 1 shows which curve is assigned to which component in which direction. Due to rotational symmetry of a beam element, the same load curves are used in directions s and t. Fig. 12 shows the definition of the load curve 100 in LS-Dyna code. For the optimization process, which will be described later in detail, the values on the ordinate are variable. In order to simplify the optimization and due to the possibility to adopt a load curve by adjusting the force values only, the points on the abscissa are fixed. Therefore the maximum displacement of the beams has been estimated and divided into several intervals. During optimization these interval has been adjusted in an iterative process. Because of the primary axial deformation of a beam element, load curves in r-direction have the most influence on simulation results. Therefore load curves in axial directions are defined more in detail than those in radial directions. The component LB has the largest axial deformation in the performed simulations. Because of this, load curve 100 (Fig. 12) has 15 grid points, while load curve 102 and 104 have 11 points. Curves 101 and 103 are radial load curves and have the least influence on simulation results. In order to keep the number of variables as low as possible, radial curves are defined by 7 grid points only.

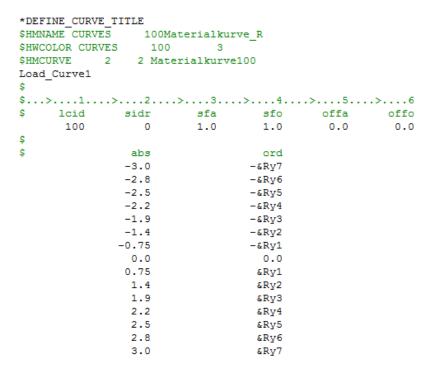


Fig. 12. Load curve 100 in LS-Dyna

## 4.5.4 Simulation set-up

For every load case a separate main file of the finite element simulation has been recreated with the new cell model (see Fig. 13). Therefore the peripheral components where modeled as rigid parts with solid elements. Contacts are defined by CONTACT\_SURFACE\_TO\_SURFACE\_SMOOTH\_ID option in LSDyna. A plausible static coefficient of friction of 0.15 is used for the model. The motion of the particular impactor is defined by prescribed motion (BOUNDARY\_PRESCRIBED\_MOTION\_RIGID) with a constant velocity. The output of the simulations, which is necessary for optimization process, is the resultant interface force (RCFORC) and the displacement of the impactor (NODOUT).

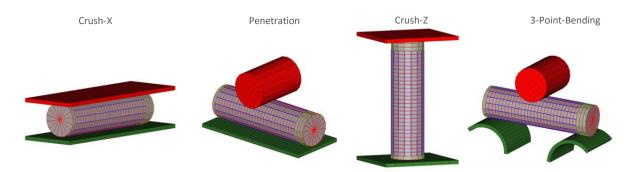


Fig. 13. Simulation model of the test configurations

## 4.6 Optimization

The materials of the components consisting of beam elements were adapted by using LS-Opt Version 5.0 (Revision 92967). The software, a simulation-based Multidisciplinary optimization program, includes Multi-Objective optimization as well as reliability-based optimization. LS-Opt works with LS-Dyna and other third party solvers [13]. Aim of the optimization was to match the force-displacement-curves from simulation and cell tests for the four load cases by adjusting the variable ordinate values of the load curves. The setup for the optimization in LS-Opt is shown in Fig. 14.

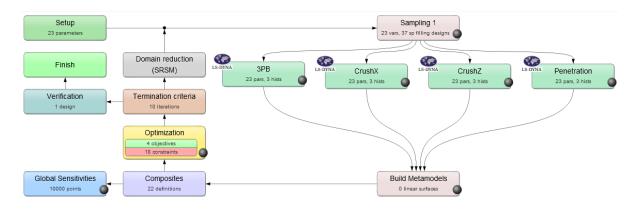


Fig. 14. Setup of the optimization process in LS-Opt

### 4.6.1 Method of the optimization

For the optimization process a metamodel based optimization is used. With this method multiobjective optimizations can be performed faster than using direct optimizations [14]. The optimum or the Pareto optimal front (for multi objectives) can be found by creating an approximate and inexpensive surrogate of the actual design [10]. Because only the final optimal point of the parameter optimization is important, the sequential strategy with domain reduction (SRSM) is selected, which will be described in detail in the next section. To identify the importance of the different variables, the global sensitivity analysis is activated. The number of Monte-Carlo integration points is set to the default value of 10000.

#### 4.6.2 Sequential Response Surface Method (SRSM)

The Sequential Response Surface method (SRSM) is an approach that adds sampling points sequentially in an adaptive subregion, which is reduced after every iteration in order to accelerate convergence [10]. Stander [14] says that for every variable that has to be optimized a range is chosen to determine the initial size of the region. The new region of interest with a reduced size is created with the center point on each successive optimum. The first region is created at the starting point  $x^{(0)}$  with the upper and lower bounds ( $x_i^{rR0}$ ,  $x_i^{rL0}$ ) calculated with the initial range  $r_i^{(0)}$  so that

$$x_i^{rL,0} = x_i^{(0)} - 0.5r_i^{(0)}$$
 and  $x_i^{rU,0} = x_i^{(0)} + 0.5r_i^{(0)}; i = 1,...,n$  (1)

with the number of design variables n. The ranges of the next iteration depends on the accuracy of the current optimum and the oscillatory nature of the solution. For oscillation a contraction parameter  $\gamma$  is determined.  $\gamma$  depends on whether the previous and the next designs are on the same or the opposite side of the region of interest. Therefore an oscillation indicator c is determined in iteration k as

$$c_i^{(k)} = d_i^{(k)} d_i^{(k-1)} \tag{2}$$

where

$$d_i^{(k)} = 2\Delta x_i^{(k)} / r_i^{(k)}; \ \Delta x_i^{(k)} = x_i^{(k)} - x_i^{(k-1)}; d_i^{(k)} \in [-1;1] \ . \tag{3}$$

With a normalized indicator c'

$$\hat{c} = \sqrt{|c|} sign(c) \tag{4}$$

γ is calculated as

$$\gamma = 0.5(\gamma_{pan}(1+\hat{c}) + \gamma_{osc}(1-\hat{c})) \ . \tag{5}$$

With  $\gamma$  a contraction rate  $\lambda i$  can be calculated as

$$\lambda_i = \eta + \left| d_i^{(k)} \right| (\gamma - \eta) \tag{6}$$

where  $\eta$  represents the pure zooming parameter. The range  $r_i^{(k+1)}$  for the (k+1)-th subregion is then determined by

$$r_i^{(k+1)} = \lambda_i r_i^{(k)}; i = 1,...,n; k = 0,...,niter$$
 (7)

If the estimated optimum is beyond the region a new subregion is created with the center on the bound of the previous region with no change in size. This is called panning. If the solution is coincident with the previous point, the subregion is stationary and only reduced in size. This is called zooming. Fig. 15 shows the first region at the starting point  $x^{(0)}$  and the adaption of the subregion after the first iteration.

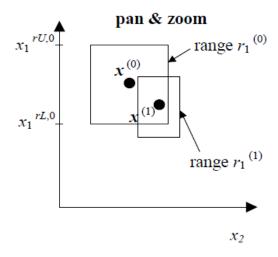


Fig. 15. Adaption of subregion in SRSM [10]

### 4.6.3 Stage definition and parameter setup

The main files of the different load cases have been integrated in four stages (3PB, Crush-X, Crush-Z and Penetration). For every stage a crossplot with displacement of the impactor (NODOUT) on the abscissa and contact force (RCFORC) on the ordinate has been defined in the History panel (see Fig. 16). For every load case an arithmetic mean curve has been calculated from the measured force-displacement progressions of the cell tests by averaging the force values. The mean curves have been deposited as file histories in the stage boxes. Therefore text files with coordinate pairs of the measuring points were created. 23 parameters arise from the different load curves and where set as continuous variable type in the parameter setup box. Plausible start values between 1 N and 1000 N were chosen for the parameters. The used material (MAT\_119) does not allow zero or negative slopes for the load curves, which has to be considered at this point. The design space of the continuous variables was defined by a minimum of 0.1 N and a maximum of 2000 N for the first optimization run.

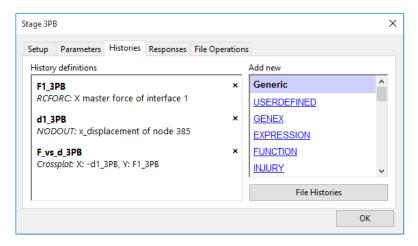


Fig. 16. Definition of Histories for the load case 3PB in LS-Opt

#### 4.6.4 Metamodel and constraints

The polynomial response surface method (RSM) is chosen for the metamodel type, which is the default choice in LS-Opt for the used optimization strategy (SRSM). With this method polynomial response surfaces were created matching the results at the data points [10]. With a linear approximation order the force curves could be adapted with sufficient accuracy. LS-Opt [10] recommends the D-optimal criterion as experimental design method (pointselection) for the polynomial RSM, where 37 simulation points were created per iteration per case for the present optimization.

To avoid error termination during the optimization process 18 constraints have been created to guarantee positive load curve slopes. Between every two points of the load curves an inequality has been defined so that the following point has a higher force then the previous one. Fig. 17 shows an example of a constraint between the parameters Ry1 and Ry2.

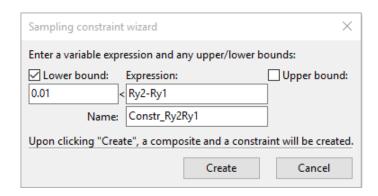


Fig. 17. Definition of a constraint for positive load curve slopes in LS-Opt

### 4.6.5 Composites and objectives

For every load case a curve matching composite is created, where force-displacement curves from the cell tests are compared with the curves extracted from simulation runs. The used curve mapping option maps one curve onto the second curve and computes the area between these two curves. A fixed number of 50 equidistant interpolated regression points is used for the comparison.

The objectives of the optimization are to minimize the area between the compared curves by adapting the parameters. Every objective is weighted with a factor of 1. The default optimization algorithm for metamodel-base optimization (Hybrid Simulated Annealing) is selected, where the Leapfrog Optimizer (LFOP) is used to sharpen the solution after an approximate global optimum is found by Adaptive Simulated Annealing (ASA) [10].

#### 4.7 Results

To evaluate the results of the optimization process the load-displacement curves as well deformation of the simulation model were compared to the results of the cell tests. The simulations of the load cases Crush-X, Penetration and Crush-Z were performed until the lower limit of the average critical displacement, which is described in chapter 4.8. The 3-Point-Bending test has an exceptional nature and will be discussed later in this paper.

#### 4.7.1 Results Crush-X

Fig. 18 shows the measured results for the Crush-X cell tests. The peak forces are in a range between 53000 N and 80000 N. The critical displacement (onset of a short circuit) is between 5.5 mm and 7.5 mm. It can be observed that the force drops rapidly at the onset of a short circuit. This direct correlation between force and critical displacement makes it possible to detect an electrical failure without the measurement of cell voltage.

After the optimization process accurate deformation can be achieved with the created cell model as shown in Fig. 19. A symmetrically lateral compression can be observed without any anomalies. The diagram shows the comparison of the force-displacement curve from simulation and arithmetic mean curve from cell tests. Simulation was performed until a displacement of 6.2 mm. The computed curve closely follows the measured curve.

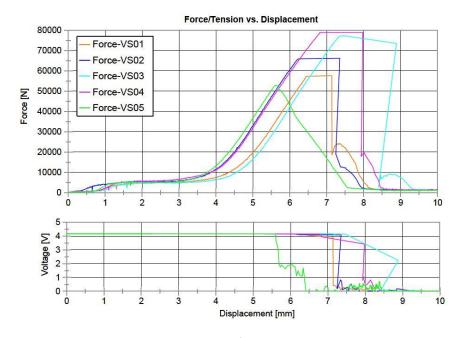


Fig. 18. Cell test results of the load case Crush-X

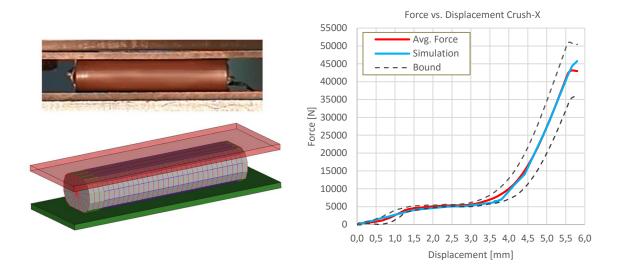


Fig. 19. Optimization results of the load case Crush-X

#### 4.7.2 Results Penetration

The measurands of the Penetration tests are shown in the diagram in Fig. 20. The peak values of the forces are in a range between 8700 N and 16300 N and significant lower compared to the Crush-X tests. Internal short circuit occurs between a displacement of 5.75 mm and 7.5 mm. As on the Crush-X tests an immediate force drop can be observed at the onset of a short circuit. For the load case Penetration a very accurate and plausible deformation can be achieved with the created cell model. As shown in Fig. 21 the local compression in the middle of the cell as well as the global rotation of the endcaps were predicted correctly. No peculiar behavior in deformation could be observed. The simulation was performed until a deformation of 6.5 mm. The force-displacement curve progression was computed with good approximation as shown in the diagram in Fig. 20. Slightly too high force values were calculated from the simulation model between a displacement of 0.3 mm and 4.8 mm. The biggest deviation in this area is about 800 N.

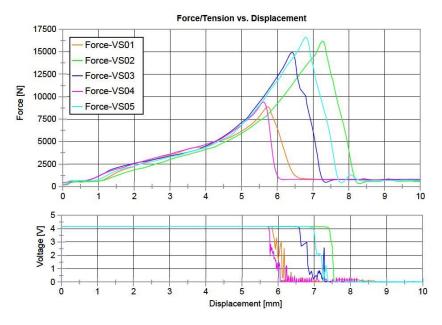


Fig. 20. Cell test results of the load case Penetration

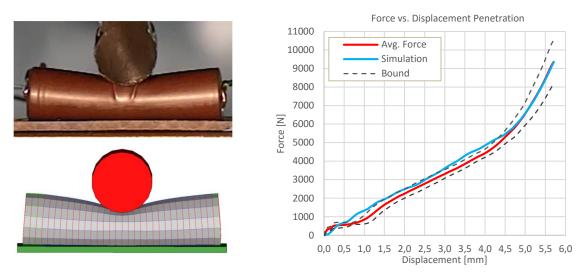


Fig. 21. Optimization results of the load case Penetration

### 4.7.3 Results Crush-Z

The results of the performed Crush-Z cell tests are shown in Fig. 22. The maximal force levels are between 8400 N and 10200 N and in proximity to the force values of the Penetration test. Electrical failure appears in a range of 3.4 mm to 4.2 mm of displacement. It is conspicuous that short circuit occurs at an early stage of displacement compared to the other load cases. Furthermore cell voltage decreases slower during Crush-Z tests. Again a direct correlation between the force values and the

onset of an internal short circuit can be detected. Deformation in axial direction of a cell and the cell model can be seen in Fig. 23. It is noticeable that the cell is deformed at the poles only and that lager deformation occurs at the positive pol of the cell. By defining a separate component for the longitudinal beam elements at the pol areas an accurate deformation can be achieved. Force-displacement comparison between simulation and cell tests is shown in the diagram in Fig. 23. The Simulation is performed until a displacement of 3.45 mm. The predicted force-displacement relation fits the test curve almost exactly until a displacement of 3.3 mm. At larger deformations the calculated curve is higher than the reference curve. The biggest deviation occurs on the end of the simulation and is about 450 N.

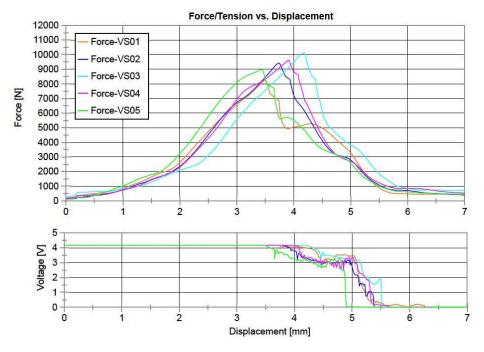


Fig. 22. Cell test results of the load case Crush-Z

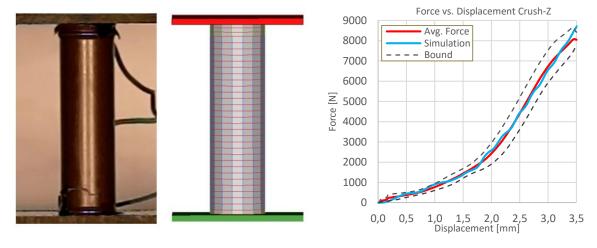


Fig. 23. Optimization results of the load case Crush-Z

#### 4.7.4 Results 3-Point-Bending

Test results of the 3-Point-Bending tests can be seen in Fig. 24. It is conspicuous that two peaks appear at every force-displacement curve. At a displacement of about 6 mm a force drop occurs, which can be attributed to fracture of the jelly roll in the inside of the cell. This appearance has already been investigated by Sahraei [2]. At a deformation of about 11 mm the force level increases again until the second peak, which describes the onset of an internal short circuit. It is noticed that the force-displacement curves from test 1 and test 2 clearly differ at large deformation for the other tests. This is due to different isolation layers on the supporting cylinders during the tests. With the created cell model it is currently not possible to model any fracture of the cell and therefore a force drop cannot be reproduced. For this reason the simulation is perform until the first force peak only. The comparison of the deformation can be seen in Fig. 25. A good approximation of the local deformation as well as the global bending can be achieved after the optimization process. The computed force-displacement curve closely follows the mean curve from cell tests. The largest deviation of about 250 N can be seen a displacement of about 0.5 mm.

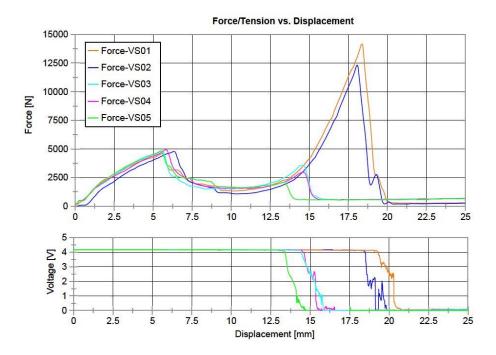


Fig. 24. Cell test results of the load case 3-Point-Bending

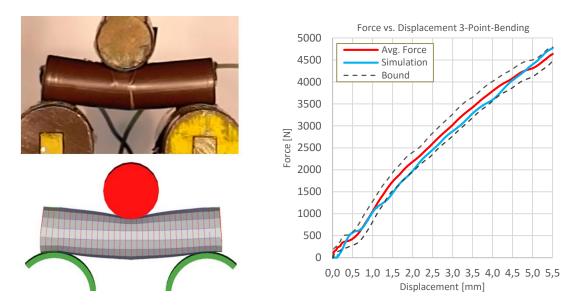


Fig. 25. Optimization results of the load case 3-Point-Bending

### 4.8 Short circuit criterion

Due to the absent of the possibility to reproduce the results of the 3-Point-Bending until the onset of a short circuit, only Crush-X, Penetration and Crush-Z will be considered for the development of a short circuit criteria. For the three load cases the arithmetic mean and the standard deviation of the critical displacement has been calculated from the tested cells. For security reasons to avoid a late short circuit prediction the lower limit of the critical displacement, which is calculated as subtraction of the standard deviation from the arithmetic mean, is used for the observation.

To develop a criterion for the prediction of an internal short circuit different simulation outputs of the beam elements has been investigated with the software LS-PrePost. A correlation between the maximum engineering strain of all beam elements at the critical displacement and the onset of an internal short circuit could be found. Engineering strain is calculated as ratio of total axial deformation to the initial length of the respective beam element.

To obtain the axial deformation as output of the simulations DATABASE\_DISBOUT was activated in LS-Dyna. With this option force resultants, relative displacements and rotations of discrete beam elements are written in a separate output file.

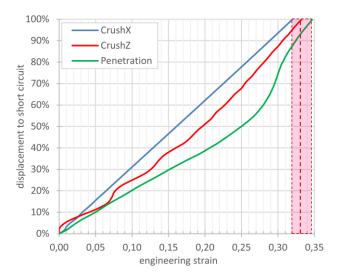


Fig. 26. Correlation between engineering strain and short circuit

Fig. 26 shows a diagram of the relation between the engineering strain and onset of a short circuit. On the ordinate the ratio of impactor displacement to critical displacement (onset of a short circuit in %) is applied. The values of the maximum calculated engineering strain are plotted on the abscissa for the respective load cases. At the point of electrical failure the arithmetic mean of engineering strain is 0.334 which is defined as the short circuit criteria. Table 2 shows the maximum engineering strain of the different load cases at the critical displacement. The maximum deviation of the short circuit criteria is 4.5 %.

Table 2 engineering strain and deviation to short circuit criteria

	Crush X	Crush Z	Penetration
max. eng. strain	0.320	0.332	0.349
deviation	4.2%	0.3%	4.5%

## 4.9 Conclusion and further work

A finite element model was developed with beam and shell elements only. Due to the optimization process the material parameters were adapted so that a very realistic mechanical behavior of the cell model could be achieved. A short circuit criteria was defined to predict the onset of an internal short circuit with good accuracy.

For the abuse tests only five cells per load case were provided. For a better statistical analysis a wide range of the same cell type should be tested.

The actual cell model does not support any fracture of elements and therefore it is not possible to recreate the complex force-displacement curve of the 3-Point-Bending test. For this reason the short circuit criteria could be defined by considering the tests Crush-X, Penetration and Crush-Z only. Further developments should include a better statistical analysis of the mechanical abuse tests. Furthermore a possible fracture option should be included in the cell model and the validity of the short circuit criteria should be review for other abuse test configurations.

## 4.10 Acknowledgement

The author(s) would like to acknowledge the use of HPC resources of iCluster/dCluster provided by the ZID of Graz University of Technology.

## 4.11 References

- [1] D. Lisbona, T. Snee, A review of hazards associated with primary lithium and lithium-ion batteries, 2011 Elsevier
- [2] L. Greve, C. Fehrenbach, Mechanical testing and macro-mechanical finite element simulation of the deformation, fracture, and short circuit initiation of cylindrical Lithium ion battery cells, 2012 Elsevier
- [3] E. Sahraei, J. Campbell, T. Wierzbicki, Modeling and short circuit detection of 18650 Li-ion cells under mechanical abuse conditions, 2012 Elsevier
- [4] J. Lamb, C. J. Orendorff, Evaluation of mechanical abuse techniques in lithium ion batteries, 2014 Elsevier
- [5] P. Fröhlich, FEM-Anwendungspraxis, 2005 Vieweg
- [6] L. Nasdala, FEM-Formelsammlung Statik und Dynamik, 2015 Springer Vieweg
- [7] B. Klein, FEM Grundlagen und Anwendungen der Finite-Element-Methode im Maschinen- und Fahrzeugbau, 2011 Springer Vieweg
- [8] "MILLED" [Online], Available: http://milled.com/sparkfun/yFaLO\_ASAs1IcawL. [January 18th 2016].
- [9] "TMS" [Online], Available: http://www.tms.org/pubs/journals/JOM/0809/fig3b.jpg. [February 4th 2016].
- [10] N. Stander, et. al., LS-Dyna® Keyword User's Manual Volume I, 2014 R7.1 Livermore Software Technology Corporation (LSTC)
- [11] H. Braess, U. Seiffert, Vieweg Handbuch Kraftfahrzeugtechnik, 2013 Springer Vieweg
- [12] VSI, Vehicle Safety Institute, Graz University of Technology 2015
- [13] N. Stander, A. Basudhar, LS-OPT: New Developments and Outlook, 2014 Livermore Software Technology Corporation (LSTC)
- [14] N. Stander, An Adaptive Surrogate-Assisted Strategy for Multi-Objective Optimization, 2013 Livermore Software Technology Corporation (LSTC)
- [15] D. H. Doughty, C. C. Crafts, FreedomCAR Electrical Energy Storage System Abuse Test Manual for Electric and Hybrid Electric Vehicle Applications, 2006 Sandia National Laboratories
- [16] Tesla Motors Inc., https://www.teslamotors.com/de\_AT/modelx, 02.03.2016

## 5 ENTWICKLUNG DES ZELLMODELLS

Die Elementgröße eines Finite Elemente Modells spielt eine entscheidende Rolle für die Rechenzeit und die Genauigkeit mit der reale Deformationsvorgänge nachgebildet werden können. Um ein möglichst schnelles und dennoch genaues Simulationsmodell der 18650 Zelle zu erstellen wurde eine Iterative Herangehensweise gewählt. Zunächst wurde ein sehr stark vereinfachtes Modell mit lediglich drei Ebenen und jeweils 12 radialen Beam Elementen erstellt. Der Vergleich mit einem bestehenden Solid Modell hat gezeigt, dass die Lastfälle Crush-X und Crush-Z bereits gut angenähert werden konnten, für die Konfigurationen 3-Punkt-Biegung und Penetration jedoch ein detaillierteres Modell benötigt wird. Durch ständiges verfeinern des Netzes konnte schließlich ein Modell konstruiert werden, welches das reale Deformationsverhalten der Zelle mit der nötigen Genauigkeit nachbilden kann (siehe Abbildung 20).

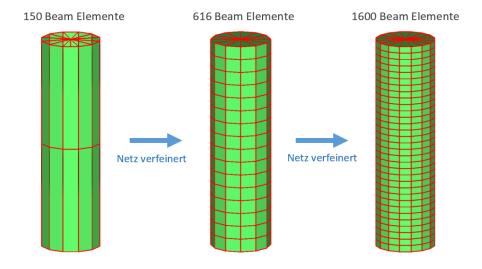


Abbildung 20: Entwicklung des Zellmodells

Mit 33 Ebenen und 16 radialen Beams pro Ebene ergeben sich 1600 Beam Elemente und 544 Shell Elemente. Bei der Unterteilung der Beam Elemente in einzelne Komponenten wurde eine ähnliche iterative Vorgehensweise gewählt. Da mit einer einzige Komponente und denselben Materialeigenschaften für alle Beam Elemente keine realistischen Kraftverläufe erzielt werden konnten, erfolgte schlussendlich eine Aufgliederung in Ebenen Beams, Längs Beams und Pol Beams, wie in Abbildung 21 zu sehen ist. Jede aus Beam Elementen bestehende Komponente wurde mit denselben Element-Eigenschaften versehen, verfügt jedoch über ein separates Material.

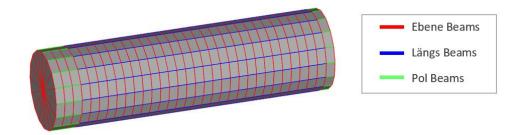


Abbildung 21: Beamkomponenten des Zellmodells

## 5.1 Parameter mit Einfluss auf das Deformationsverhalten

In diesem Abschnitt wird auf Kenngrößen und Einstellungen des Zellmodells eingegangen, welche neben den Materialkurven entscheidenden Einfluss auf das Deformationsverhalten haben. Des Weiteren werden Probleme beschrieben, welche während der Erstellung der Simulation im Zusammenhang mit diesen Einflussgrößen auftraten.

#### 5.1.1 Formulierung von Beam Elementen und Definition des Achssystems

Eine wesentliche Herausforderung stellt das Nachbilden komplexer Deformationsvorgänge mit diskreten Beam Elementen dar. Um ein realistisches physikalisches Verhalten zu generieren, kann mit der SCOOR Option in den Element-Eigenschaften die Beam Formulierung und die Definition des Achsensystems von diskreten Beam Elementen entscheidend verändern werden. Für ein balkenähnliches Verhalten empfiehlt LS-Dyna [18] die SCOOR-Werte 2 oder 3 (siehe Abbildung 22).

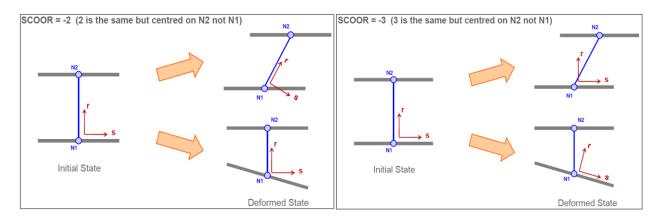


Abbildung 22: Definition des Koordinatensystems bei SCOOR = 2 und SCOOR = 3 [25]

Für das entwickelte Zellmodell wurden alle zur Verfügung stehenden SCOOR Optionen getestet, wobei lediglich mit SCOOR = 3 ein realistisches Verformungsverhalten erzielt werden konnte. Abbildung 23 gibt einen Überblick der Deformationsbilder mit unterschiedlichen SCOOR-Werten für die Lastfälle 3-Punkt-Biegung und Crush-X. SCOOR = 0 und SCOOR = 1 brachten zwar eine plausible Deformation der Zelle bei Crush-X, führten jedoch zu einem Modell, welches zu biegesteif war. Mit dem Wert 2 konnte ein unrealistisches radiales Schrumpfen der Zelle im Lastfall Crush-X beobachtet werden und für die 3-Punkt-Biegung ergab sich ein Verhalten, welches einem schubweichen Balken ähnelte. Wie bereits erwähnt brachte SCOOR = 3 ein sehr realitätsnahes Deformationsbild für alle Lastfälle. Zu erwähnen ist an dieser Stelle noch, dass das Vorzeichen keine Rolle für die Ergebnisse des entwickelten Zellmodells spielt.

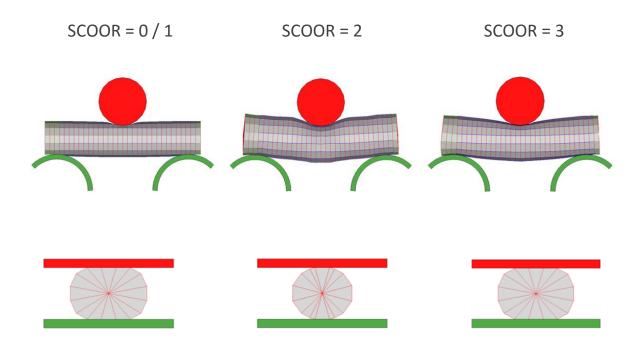


Abbildung 23: Vergleich SCOOR für Lastfall 3-Punkt-Biegung (oben) und Crush-X (unten)

### 5.1.2 Einfluss des Massenträgheitsmomentes auf die Deformation

Im Bereich der Eigenschaften von Beam-Elementen (\*SECTION\_BEAM) lässt sich ein Massenträgheitsmoment definieren (INER), mit welchem das Verformungsbild des Zellmodells und somit die Kraftverläufe bei dynamischen Vorgängen beeinflusst werden können. Laut LS-Dyna [18] wird für das Massenträgheitsmoment ein Wert empfohlen der von Null verschieden ist um Instabilitäten während des Simulationsvorganges vorzubeugen.

Für das vorliegende Zellmodell gelang es jedoch weder durch Aufstellen eines Optimierungsprozesses, noch durch Abschätzen vernünftiger Größenordnungen einen Wert zu finden, mit welchem ein reales Deformationsverhalten erzielbar war. Lediglich durch ein deaktivieren der INER-Option konnten plausible Ergebnisse gewonnen werden. Die Stabilität des Simulationsmodelles konnte trotz deaktiviertem Massenträgheitsmoment sichergestellt werden.

### 5.2 Parameter mit Einfluss auf die Rechenzeit

Während der Entwicklung des Zellmodells konnte festgestellt werden, dass neben der Netzgröße weitere Faktoren eine wichtige Rolle für die Höhe der Rechenzeit spielen. Im Folgenden werden die Kennwerte mit dem größten Einfluss beschrieben und die gefundenen Optima aufgeführt. Hier ist anzumerken, dass die gefundenen Werte keine allgemeine Gültigkeit haben, sondern nur für das vorliegende Zellmodell überprüft wurden.

#### 5.2.1 Masse der Beam Elemente

Mit der Option VOL in den Elementeigenschaften kann das Volumen der diskreten Beam Elemente in LS-Dyna definiert werden. Durch Multiplikation des Volumens mit der Dichte wird die Masse der Beams bestimmt. Die Prinzipskizze eines diskreten Beam Elements ist in Abbildung 24 dargestellt. Die Masse des Beams wird dabei auf die beiden Knoten aufgeteilt (m<sub>1</sub> und m<sub>2</sub>). Die Verbindung der beiden Knoten wird durch eine Feder mit der Federsteifigkeit k abstrahiert.

$$m_1 = 0.5 M_1 ; M_1 = \text{nodal mass}$$

$$m_2 = 0.5 M_2 ; M_2 = \text{nodal mass}$$

Abbildung 24: Prinzipskizze eines diskreten Beam Elements [18]

Für die Berechnung des Zeitschrittes wird der Ansatz einer freien Schwingung gewählt, wobei die Massen und die Federsteifigkeit k eine entscheidende Rolle spielen. Das Eigenwert Problem für die freie Schwingung lautet:

$$\begin{bmatrix} k & -k \\ -k & k \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \end{bmatrix} - \omega^2 \begin{bmatrix} m_1 & 0 \\ 0 & m_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$
(5.1)

Da die Determinante der charakteristischen Gleichung Null sein muss, kann das Maximum des Eigenwertes berechnet werden zu:

$$\det\begin{bmatrix} k - \omega^2 m_1 & -k \\ -k & k - \omega^2 m_2 \end{bmatrix} = 0 \quad \to \quad \omega_{\text{max}}^2 = \frac{k \left( m_1 + m_2 \right)}{m_1 \cdot m_2}$$
(5.2)

Der kritische Zeitschritt eines Standard Beams (nach Hughes-Liu) wird berechnet mit:

$$\frac{\Delta t \le \frac{\ell}{c}}{\omega_{\text{max}}} \ge \frac{\Delta t \le \frac{2}{\omega_{\text{max}}}}{\omega_{\text{max}}}$$
(5.3)

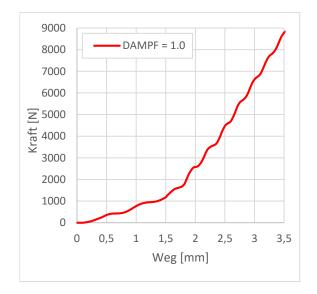
Somit ergibt sich der Zeitschritt eines diskreten Beam-Elements zu:

$$\Delta t = 2\sqrt{\frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \frac{1}{k}} \tag{5.4}$$

Aus dieser Beziehung lässt sich erkennen, dass der Zeitschritt durch eine größere Masse gesteigert wird, was in weiterer Folge eine gereingere Berechnungszeit der Simulation bedeutet. Es muss jedoch berücksichtigt werden, dass die Qualität der Resultate mit steigendem Zeitschritt abnimmt und die Stabilität des Modells beeinflusst werden kann [18]. Da das entwickelte Zellmodell für hochdynamische Crashsimulationen von Gesamtfahrzeugen verwendet werden soll, ist es erforderlich die Masse der realen Einzelzelle von 45 g nachzubilden. Dies konnte mit einer Volumeneinstellung von VOL = 3,4 und einer Dichte von Stahl (7.800 kg/m³) erreicht werden. Wird das Modell für quasistatische Zelltests verwendet, bei denen die Masse eine vernachlässigbare Rolle spielt, kann der Zeitschritt durch Modifikation des Volumens oder der Dichte entsprechend angepasst werden.

#### 5.2.2 Däpfungsfaktor des verwendeten Materials

Bei Verwendung des Materials 119 kann ein Dämpfungsfaktor (DAMPF) bestimmt werden, welcher das Auftreten von Schwingungen verhindert und somit zur Glättung der Kraft-Weg Kurven beiträgt. Es konnte jedoch festgestellt werden, dass die Berechnungszeit der Simulation mit zunehmendem Dämpfungsfaktor steigt. Somit galt es einen Kompromiss zwischen Minimierung der Rechenzeit und Qualität der Kraftverläufe zu finden. Der empfohlene Dämpfungs-Wert von 1 [18] stellte sich für die Ebenen-Beams als ausreichend dar. Für die Längs-Beams und die Pol-Beams musste der Faktor gesteigert werden. Abbildung 25 zeigt den Vergleich von zwei Kraftverläufen für den Lastfall Crush-Z mit verschiedenen Dämpfungsfaktoren. Im linken Diagramm (Fall A) wurde für alle Komponenten ein Dämpfungsfaktor von 1.0 gewählt, im rechten Diagramm (Fall B) wurde die Dämpfung für die Längs-Beams sowie für die Pol-Beams auf 2,5 erhöht. Die Berechnungszeit im Fall A ist zwar um 10% geringer als jene im Fall B, es ist jedoch ersichtlich, dass bei Fall A ein deutlicher Schwingungsanteil im Kraftverlauf aufritt. Im Fall B ist noch immer ein geringer Schwingungsanteil erkennbar, für den Optimierungsprozess stellte sich der Kraftverlauf aber als ausreichend genau dar.



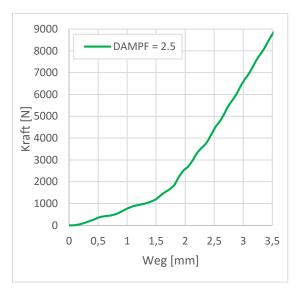


Abbildung 25: Vergleich der Kraftverläufe des Lastfall Crush-Z mit verschiedenen Dämpfungsfaktoren

## 6 ENTWICKLUNG DES KURZSCHLUSSKRITERIUMS

Um das elektrische Versagen der Zellen in Finite Elemente Crashsimulationen von Gesamtfahrzeugen nachstellen zu können muss ein Kriterium entwickelt werden, welches die Deformation des Zellmodells mit dem Zeitpunkt des Auftretens eines internen Kurzschlusses in Verbindung setzt. Zu diesem Zweck wurden die gewonnen Erkenntnisse der Zellversuche genutzt um den Kurzschluss für die einzelnen Lastfälle abzuleiten. Wie in Kapitel 4.8 beschrieben, wird der Lastfall 3-Punkt-Biegung für die Entwicklung eines Kurzschlusskriteriums nicht berücksichtigt. Mit einem phänomenologischen Ansatz wurde im Anschluss eine Eigenschaft des Zellmodells gesucht, mit der Kurzschluss abgebildet werden kann. Für die Entwicklung des Kriteriums wurden verschiedene Konzepte erstellt und untersucht (siehe Tabelle 2).

Tabelle 2: Konzepte zur Entwicklung eines Kurzschlusskriteriums

Konzept	Abstraktion	Beschreibung	Aufwand
Axialkraft	Fa	Bei Überschreiten einer bestimmten Axialkraft eines Beam Elements wird Kurzschluss detektiert. Die Kraft kann direkt mit der Funktion DISBOUT ausgegeben werden	1
Längen- änderung	AL AL	Bei Überschreiten einer bestimmten Längenänderung eines Beam Elements wird Kurzschluss detektiert Die Längenänderung kann ebenfalls mit der Funktion DISBOUT ausgegeben werden	1
Dehnung	Lo	Bei Überschreiten einer bestimmten Dehnung eines Beam Elements wird Kurzschluss detektiert. Die Dehnung kann nicht direkt ausgegeben werden sondern muss durch Division mit der Ausgangslänge berechnet werden	2
Fläche eines Shell Elements	Amin	Bei Unterschreiten eines bestimmten Minimums, oder einer Änderung (ΔA) des Flächeninhaltes eines Schalen Elements wird Kurzschluss detektiert. Der Flächeninhalt kann nicht direkt ausgegeben werden und muss aus dem Volumen eines Elements berechnet werden.	2
Abstand von 2 Knoten	dmin	Bei Unterschreiten eines bestimmten Mindestabstandes zweier Knoten wird Kurzschluss detektiert. Der Abstand kann nicht direkt ausgegeben werden sondern muss aus den Koordinaten der Punkte berechnet werden (x, y, z)	3

Das Auswerten dieser Konzepte für die verschiedenen Lastfälle zeigte, ob ein direkter Zusammenhang zum internen Kurzschluss besteht. Jedes Konzept wurde nach Aufwand der Realisierung bewertet, wobei 1 einen geringen Aufwand und 3 einen hohen Aufwand darstellt. Die Konzepte wurden im Anschluss der Reihe nach überprüft, bis ein Kriterium mit hinreichender Genauigkeit definiert werden konnte. Die Ergebnisse für Axialkraft, Längenänderung und Dehnung, sind in Tabelle 3 ersichtlich.

Tabelle 3: Vergleich Kurzschlusskriterien

	Crush-X	Crush-Z	Penetration	Kurzschlusskriterium (MW der Maxima)
Max. Axialkraft	590 N	516 N	939 N	681,6 N
Abweichung	13,4%	24,3%	37,7%	
Max. Längenänderung	2,88 mm	0,676 mm	3,14 mm	2,23 mm
Abweichung	29,0%	69,7%	40,7%	
Max. Dehnung	0,32	0,332	0,349	0,334
Abweichung	4,2%	0,3%	4,5%	

Es werden dabei für jeden berücksichtigten Lastfall (Crush-X, Crush-Z und Penetration) die Maximalwerte des Zellmodells zum Zeitpunkt des Kurzschlusses der jeweiligen Größe (Axialkraft, Längenänderung und Dehnung) dargestellt. Des Weiteren sind die einzelnen Kurzschlusskriterien zu sehen, die durch den jeweiligen Mittelwert (MW) der Maxima der drei Lastfälle festgelegt wurden. Die Abweichung vom jeweiligen Kriterium ist in Prozent dargestellt und ist ein Indikator für die Gültigkeit des Konzepts.

Wie zu erkennen ist konnte zwischen der Axialkraft der Beam Elemente und dem Eintreten eines internen Kurzschlusses kein direkter Zusammenhang gefunden werden, da der größte Fehler zwischen Kriterium und Maximalwert 37,7% beträgt. Auch die Längenänderung der einzelnen Elemente war mit einer maximalen Abweichung von 69,7% zu unterschiedlich um ein Kriterium daraus ableiten zu können. Wie in Kapitel 4 beschrieben, konnte mit der Dehnung der Beams ein Kriterium mit sehr guter Genauigkeit gefunden werden. Die größte Abweichung beträgt dabei 4,5%, was bedeutet, dass der Kurzschluss für die Lastfälle Crush-X, Crush-Z und Penetration mit einem maximalen Fehler des Deformationsweges von 0,26 mm vorhergesagt werden kann.

Eine Überprüfung der restlichen Konzepte war somit nicht mehr erforderlich.

## 7 FAZIT

In der vorliegenden Arbeit konnte erfolgreich ein Simulationsmodell einer 18650 Lithium Rundzelle bestehend aus Balken- und Schalen Elementen entwickelt werden. Das Deformationsbild der Zellen sowie die gemessenen Kraftverläufe der Zelltests konnten mit sehr guter Genauigkeit in der Simulationsumgebung nachgebildet werden. Da das Zellmodell für Crashsimulationen von Gesamtfahrzeugen verwendet werden soll, wurde der Fokus der Entwicklung auf die Minimierung der Berechnungszeit gelegt. Der Vergleich mit einem Modell, welches aus Volumen- und Schalen Elementen aufgebaut ist und am Institut für Fahrzeugsicherheit der Technischen Universität Graz zum Einsatz kommt, hat gezeigt, dass die Rechenzeit erheblich reduziert werden konnte. Den Vergleich der Simulationsergebnisse des Lastfalls Penetration von Beam Modell und Solid Modell zeigt Abbildung 26.

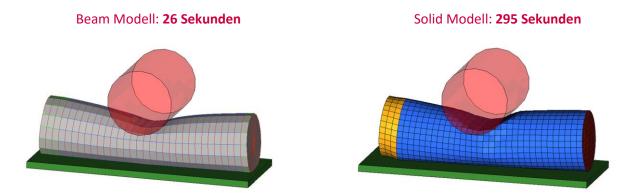


Abbildung 26: Vergleich des Lastfalles Penetration von Beam Modell (links) und Solid Model (rechts)

Für beide Simulationen wurden exakt dieselben Randbedingungen definiert und ein Deformationsweg von 6,5 mm festgelegt. Die Berechnung der Simulation wurde mit einem PC mit Intel® Core™ i5-4590S Prozessor und 4,00 GB Arbeitsspeicher durchgeführt. Für das Solid Modell betrug die Berechnungszeit 4 Minuten und 55 Sekunden, wohingegen für das Beam Modell lediglich eine Rechenzeit von 26 Sekunden benötigt wurde. Zusammengefasst bedeutet das eine Reduktion der Rechenzeit um 91,2%. Einen Überblick über den Vergleich aller vier Lastfälle zeigt Tabelle 4. Die Simulationen wurden dabei mit demselben Rechner durchgeführt.

Tabelle 4: Vergleich der Berechnungszeit von Solid Modell und Beam Modell für die verschiedenen Lastfälle

	Deformations- weg	Rechenzeit Solid Modell	Rechenzeit Beam Modell	Reduktion der Rechenzeit
Crush-X	5,8 mm	308 sec.	30 sec.	90,3 %
Penetration	6,5 mm	295 sec.	26 sec.	91,2 %
Crush-Z	3,5 mm	151 sec.	11 sec.	92,7 %
3-Punkt-Biegung	5,6 mm	259 sec.	26 sec.	90 %

Die Anzahl der Parameter konnte im Vergleich zum Solid-Modell von 41 auf 23 reduziert werden. Die Bedatung des Modells erfolgt somit wesentlich schneller und es ist deutlich einfacher das neue Zellmodell auf verschiedene Zelltypen zu adaptieren.

Mit der maximalen Dehnung der Beam Elemente konnte ein Kurzschlusskriterium mit sehr guter Genauigkeit definiert werden. Die größte Abweichung für die einzelnen Lastfälle beträgt dabei 4,5%. Ein Materialversagen wurde in das neue Zellmodel nicht integriert und würde den Rahmen dieser Arbeit sprengen. Das Nachbilden des Kraft-Weg-Verlaufes der 3-Punkt-Biegung bis zum Eintreten des Kurzschlusses konnte daher nicht erfolgen. Stattdessen wurde die Simulation der 3-Punkt-Biegung nur bis zur ersten Kraftspitze durchgeführt und die Festlegung des Kurzschlusskriteriums erfolgte mit den Lastfällen Crush-X, Penetration und Crush-Z.

Theoretisch sollte es auch möglich sein mit dem Kurzschlusskriterium den Ort des Kurzschlusses in der Zelle vorherzusagen. Das Beam Element mit der größten Dehnung stell schließlich auch das Element mit der größten Belastung dar und sollte sich an der Stelle des Materialversagens der realen Zelle befinden. Diese Theorie konnte jedoch noch nicht überprüft werden, kann jedoch als Grundlage für zukünftige Arbeiten angesehen werden.

Weitere Arbeiten könnten sich ebenfalls mit der Implementierung des Materialversagens beschäftigen damit die Kraftabfälle der Zellversuche nachgebildet werden können. Beispielsweise wäre es denkbar, dass Elemente die ein bestimmtes Kraftniveau überschreiten gelöscht werden und somit die Steifigkeit des gesamten Modells vermindert wird. Ebenfalls von Interesse wäre die Definition neuer Zelltestkonfigurationen. Somit wäre es möglich das mechanische Verhalten sowie das Kurzschlusskriterium auf Prognosefähigkeit hin zu überprüfen. Für die in der vorliegenden Arbeit durchgeführten mechanischen Zelltests standen lediglich fünf Batteriezellen pro Lastfall zu Verfügung. Da detaillierte statistische Auswertungen mit so wenigen Versuchen nicht möglich sind, sollte auch eine deutlich größere Anzahl an Prüflingen getestet werden.

## 8 LITERATURVERZEICHNIS

- [1] Peter Hofmann, Hybridfahrzeuge Ein alternatives Antriebssystem für die Zukunft, Springer, 2014.
- [2] Prof. Dr.-Ing. Peter Marx, "Wirkungsgrad-Vergleich zwischen Fahrzeugen mit Verbrennungsmotor und Fahrzeugen mit Elektromotor," DER ELEKTRO-FACHMANN, Nr. 1-2/15, 2015.
- [3] IHS Automotive, "Statista.com," [Online]. Available: http://de.statista.com/statistik/daten/studie/431317/umfrage/ladestationen-fuer-elektroautos-weltweit/. [Zugriff am 15 Januar 2016].
- [4] Horváth & Partners, "Fakten-Check Mobilität 3.0," 2015. [Online].
- [5] Volkswagen, Preise Ausstattungen Technische Daten Der e-Golf, 2016.
- [6] Tesla Motors, [Online]. Available: https://www.teslamotors.com/de\_AT/supercharger. [Zugriff am 15 Januar 2015].
- [7] IKT für Elektromobilität, Wirtschaft lichkeit von Elektromobilität in gewerblichen Anwendungen, 2015.
- [8] Marcus Keichel, Oliver Schwedes, Das Elektroaute Mobilität im Umbruch, Springer Vieweg, 2013.
- [9] Cornel Stan, Alternative Antriebe für Automobile, Springer Vieweg, 2015.
- [10] Holger Hirsch, "Achtung, Elektroauto!," Unikate / Universität Duisburg-Essen, Nr. 39, 2011.
- [11] P. Keil, P. Bruda, Development of a lithium-ion battery system, 2012.
- [12] Reiner Korthauer, Handbuch Lithium-Ionen-Batterien, Springer Vieweg, 2013.
- [13] Wolfgang Sinz et al., Concepts for Mechanical Abuse Testing of High-Voltage Batteries, SAE International, 2012.
- [14] Diego Lisbona, "A review of hazards associated with primary lithium and," *Process Safety and Environmental Protection*, Nr. PSEP-217, 2011.
- [15] UL LLC, "Safety Issues for Lithium-Ion Batteries," 2013.
- [16] Elham Sahraei, John Campbell, Tomasz Wierzbicki, Modeling and short circuit detection of 18650 Li-ion cells under mechanical abuse conditions, Journal of Power Sources, 2012.
- [17] Lars Greve, Clemens 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.

- [18] LIVERMORE SOFTWARE TECHNOLOGY CORPORATION (LSTC), LS-DYNA KEYWORD USER'S MANUAL VOLUME I, 2014.
- [19] Etienne Guyon et al., Hydrodynamik, Springer Vieweg, 2013.
- [20] Ulrich Franz et al., Integrale Sicherheit von Kraftfahrzeugen, Springer Fachmedien, 2013.
- [21] Karlsruhe Institute of Technology, [Online]. Available: http://www.tvt.kit.edu/21\_984.php. [Zugriff am 15 Januar 2016].
- [22] "MILLED," [Online]. Available: http://milled.com/sparkfun/yFaLO\_ASAs1IcawL. [Zugriff am 18 Januar 2016].
- [23] Dr. Jochen Mähliß, "Lithium-Ionen-Batterien Gefahrenpotential und Umgang," batteryuniversity.eu GmbH, 2013.
- [24] Statista, [Online]. Available: http://de.statista.com/statistik/daten/studie/168350/umfrage/bestandsentwicklung-von-elektrofahrzeugen/. [Zugriff am 25 Januar 2005].
- [25] Arup, Discrete Beam Axis System, Oasys LS-Dyna Environment, 2010.
- [26] VSI, Institut für Fahrzeugsicherheit der Technischen Universität Graz.
- [27] Renault, [Online]. Available: http://www.renault.at/neuwagen/ze-elektrofahrzeuge/twizy/twizy-ph2/die-zukunft-beginnt-jetzt.jsp. [Zugriff am 12 Februar 2016].
- [28] KTM, [Online]. Available: http://www.ktm.com/e-ride/. [Zugriff am 03 März 2016].
- [29] DR. Kai-Christian Möller, Zukunft der Akkutechnologien, ATZ elektronik, 2011.
- [30] "mf.tu-berlin," [Online]. Available: https://www.mf.tu-berlin.de/menue/forschung/protrak/. [Zugriff am 03 März 2016].
- [31] René Groiß, Andreas Jossen, Sicherheit beim Testen von Lithium-Ionen Batterien, BaSyTec Gmbh, 2010.
- [32] TÜV SÜD, Designing Meaningful Lithium-ion Abuse Tests, 2013.
- [33] Andrea Gillhuber , "elektroniknet.de," [Online]. Available: http://www.elektroniknet.de/automotive/sonstiges/artikel/1386/1/. [Zugriff am 04 März 2016].
- [34] Researcher and Engineer of R&D department of Islamic Republic of Iran Broadcasting, [Online]. Available: http://alum.sharif.ir/~m ebrahimi/experience.html. [Zugriff am 12 März 2016].