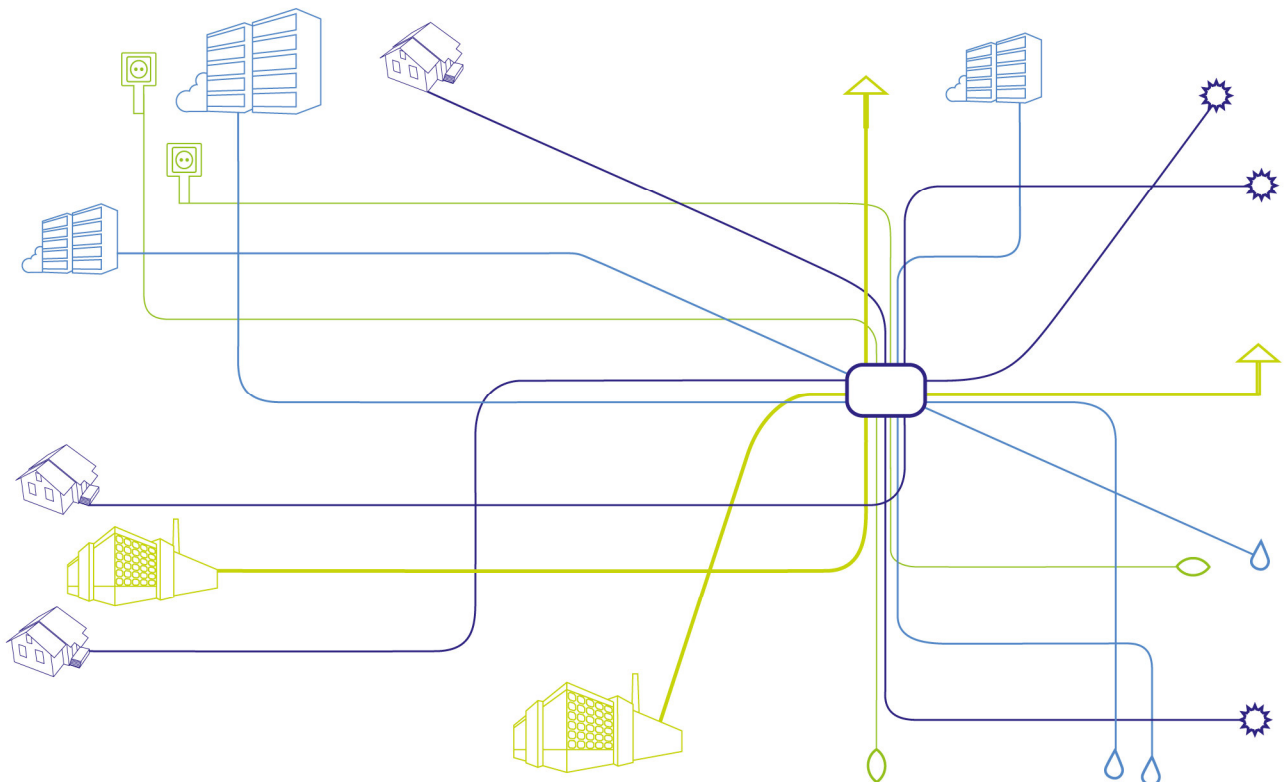




ELTOBATT

Methodenentwicklung zur Optimierung von Batteriemodellen (elektrochemisch + thermisch) unter Verwendung von Modellreduktion und „Space Mapping“ Techniken



VORWORT

Die Publikationsreihe **BLUE GLOBE REPORT** macht die Kompetenz und Vielfalt, mit der die österreichische Industrie und Forschung für die Lösung der zentralen Zukunftsaufgaben arbeiten, sichtbar. Strategie des Klima- und Energiefonds ist, mit langfristig ausgerichteten Förderprogrammen gezielt Impulse zu setzen. Impulse, die heimischen Unternehmen und Institutionen im internationalen Wettbewerb eine ausgezeichnete Ausgangsposition verschaffen.

Jährlich stehen dem Klima- und Energiefonds bis zu 150 Mio. Euro für die Förderung von nachhaltigen Energie- und Verkehrsprojekten im Sinne des Klimaschutzes zur Verfügung. Mit diesem Geld unterstützt der Klima- und Energiefonds Ideen, Konzepte und Projekte in den Bereichen Forschung, Mobilität und Marktdurchdringung.

Mit dem **BLUE GLOBE REPORT** informiert der Klima- und Energiefonds über Projektergebnisse und unterstützt so die Anwendungen von Innovation in der Praxis. Neben technologischen Innovationen im Energie- und Verkehrsbereich werden gesellschaftliche Fragestellung und wissenschaftliche Grundlagen für politische Planungsprozesse präsentiert. Der **BLUE GLOBE REPORT** wird der interessierten Öffentlichkeit über die Homepage www.klimafonds.gv.at zugänglich gemacht und lädt zur kritischen Diskussion ein.

Der vorliegende Bericht dokumentiert die Ergebnisse eines Projekts aus dem Forschungs- und Technologieprogramm „Neue Energien 2020“. Mit diesem Programm verfolgt der Klima- und Energiefonds das Ziel, durch Innovationen und technischen Fortschritt den Übergang zu einem nachhaltigen Energiesystem voranzutreiben.

Wer die nachhaltige Zukunft mitgestalten will, ist bei uns richtig: Der Klima- und Energiefonds fördert innovative Lösungen für die Zukunft!

A stylized, handwritten signature in black ink, consisting of several fluid, overlapping strokes.

Ingmar Höbarth
Geschäftsführer, Klima- und Energiefonds

A handwritten signature in black ink that reads 'Theresia Vogel' in a cursive script.

Theresia Vogel
Geschäftsführerin, Klima- und Energiefonds

Einleitung

Ausgangssituation/Motivation des Projektes

Der immer mehr in den Vordergrund kommende Umweltschutzgedanke sowie gesundheitsgefährdender Schadstoffausstoß von herkömmlichen Verbrennungsmotoren führt zur Entwicklung alternativer Antriebe. Hier unterscheidet man neben anderen alternativen Antrieben prinzipiell zwischen rein batteriebetriebenen Fahrzeugen und hybriden Varianten meist in Kombination mit einem Verbrennungsmotor. Beide Typen benötigen entsprechend Hochleistungs- oder Hochenergiebatterien um die Energie für die Fortbewegung und für die Versorgung der Fahrzeugfunktionen speichern und bereitstellen zu können.

In diesem Projekt beschäftigt man sich mit der Modellierung von Batterien und darauf aufbauend mit der Optimierung selbiger, z.B. bezüglich der Geometrie, Kapazität, etc.

Existierende Modelle, die kalendarische Alterung und thermische Effekte abbilden, sind äußerst komplex. Die Optimierung auf Batterieebene (Parameteridentifikation) und auf Antriebsstrangebene (Simulation von Elektromaschine, Leistungselektronik, Batterie und ggf. Verbrennungsmotor) für einfache statische oder quasistatische Modelle kann ebenfalls nur so exakt sein wie die Modelle selbst. Aussagen über Kraftstoffeinsparung, thermisches Management oder Leistungsfluß sind direkt von Modellgüte und Modellgenauigkeit abhängig.

Aufgabenstellung des Projektes/ Schwerpunkt

Ziel dieses Projektes ist es vorhandene elektrochemische Batteriemodelle in Hinblick auf thermisches Verhalten zu erweitern.

Weiters ist es Zielsetzung eine Optimierungsmethode für Batterien von Elektro- und Hybridfahrzeugen zu entwickeln um sie für vorgegeben Lastzyklen (Fahrweisen und -zyklen) auszulegen.

Einordnung in das Programm

Die Batterie ist eine wesentliche Fahrzeugkomponente für Elektro- und Hybridfahrzeuge. Die entwickelte Optimierungsmethode für Batterien kann als Basis dienen, um eine Reduktion von Kosten und Gewicht zu erreichen und damit die Energieeffizienz zu steigern.

Aufbau und Methodik des Projektes

Das Projekt gliederte sich in sieben Arbeitspakete (AP), wobei AP 1 bis AP 5 hauptsächlich am ViF abgearbeitet wurden. Das AP 6 beinhaltete die Beiträge der Projektpartner AVL und GAIA. In AP 7 wurden relevante mathematische Aspekte des Projekts durch die Universität Konstanz behandelt. Das Projektmanagement und die Koordination des Projekts lag am ViF und wurde durch AP 1 gewährleistet.

Der erste zu behandelnde Aspekt in diesem Projekt war die Modellierung der Batterie. Aktuelle State-of-the-Art Modelle wurden mit weiteren physikalischen Verhalten erweitert. Konkret wurde hier das elektro-chemische Modell mit partiellen Differentialgleichungen (PDEs) erweitert, die das thermische Verhalten der Batterie während der Betriebs und bestimmter Lastzyklen beschreiben. Dieses Batteriemodell wurde dann in einer freien Programmiersprache und einem kommerziellen Finite Elemente Löser implementiert und gelöst. Dabei wurde auf Messergebnisse der Industriepartner zum Parameterabgleich und für die Validierung des Modells zurückgegriffen. Da mit einem System von gekoppelten nichtlinearen PDEs zu rechnen war, war auch hier die Unterstützung von Prof. Dr. Volkwein notwendig um mit iterativen Verfahren und oder Modellreduktion eine Lösung zu finden.

Im Anschluss wurde das Batteriemodell vereinfacht um als leichter/schneller zu berechnendes Modell für die Surrogate Model Optimierung zu fungieren.

Weiters wurde an der Universität Konstanz (UKN) die Surrogate Model Optimierung für die dann vorliegenden beiden Modelle adaptiert (Verwendung und Adaption der Space Mapping Technik, Adaption von Quasi-Newton Verfahren, Schrittweitensteuerung, Trust Region Verfahren) um sie für die von den Projektpartnern gelieferten Lastzyklen anzuwenden.

Am Ende des Projekts wurden Untersuchungen unternommen um den weiteren Einsatz der erforschten Methoden für komplexere Batteriemodelle aber auch andere Modelle und Disziplinen zu ergründen.

1. Inhaltliche Darstellung Batteriemodell Theoretisch & Implementierung

Das Ziel dieses Arbeitspaketes bestand in der Entwicklung eines dreidimensionalen, elektrischen und thermischen Batteriemodells, das auch implementiert und getestet werden sollte. Hierzu wurde der Ansatz gewählt ein bestehendes eindimensionales, elektrochemisches Batteriemodell zu modifizieren und um eine Wärmequelle zu ergänzen. Dieses Batteriemodell wird dann mittels Co-Simulation in ein dreidimensionales, elektrisches und thermisches Batteriemodell eingekoppelt. Im Folgenden wird erst dieses dreidimensionale Modell beschrieben und dann das eindimensionale Batteriemodell. Dabei wird in beiden Fällen auf das Modell, die Lösungsverfahren, die verwendete Software, die Implementierung und deren Testung eingegangen.

3D Elektro-thermisches Simulationsmodell: Modellierungsmethode

Ziel ist es, das elektrische und thermische Verhalten von Zellen in einem dreidimensionalen Modellaufbau zu untersuchen. Der inaktive Teil der Zelle (bestehend aus Aluminium- bzw. Kupferfolie, den Ableiterbahnen etc.) lässt sich im Wesentlichen durch das gekoppelte Differentialgleichungssystem

$$\rho C \frac{\partial T}{\partial t} - \nabla \cdot (\lambda \nabla T) = \dot{q}, \quad (1)$$

$$-\nabla \cdot \left(\epsilon \nabla \frac{\partial \Phi}{\partial t} \right) - \nabla \cdot (\sigma \nabla \Phi) = 0 \quad (2)$$

beschreiben.

Die Kopplung dieses Differentialgleichungssystems besteht durch die Wärmeentwicklung infolge des elektrischen Stroms bzw. der Temperaturabhängigkeiten der Materialparameter. Eine Möglichkeit der Lösung von Systemen dieser Art die im Rahmen des Projektes verwendet werden soll ist die Anwendung der Methode der Finiten Elemente (siehe z.B. [1,2,3]).

Der weitaus aufwändigere Teil besteht in der Beschreibung des aktiven Zellmaterials, also dem Material zwischen positiver und negativer Ableiterfolie (siehe Abbildung 1)

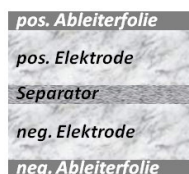


Abbildung 1. Schematische Darstellung des Aufbaus einer Zelle

Um das Verhalten des Aktivmaterials in der Simulation berücksichtigen zu können, bestehen mehrere Umsetzungsmöglichkeiten. Entweder werden die das Aktivmaterial beschreibenden Gleichungen im Finite-Elemente Löser direkt implementiert, oder mittels geeigneter Kopplungsverfahren (Co-Simulation) integriert. Aufgrund der flexibleren Umsetzungsmöglichkeiten, vor allem

der einfachen Austauschbarkeit von verschiedenen Typen von Batteriemodellen, wurde der Weg über die Co-Simulation gewählt.

3D Elektro-thermisches Simulationsmodell: allgemeiner Ansatz

Den Ausgangspunkt der Arbeiten bildete eine (fiktive) Zelle mit sehr einfacher Geometrie. Abbildung 2 zeigt die Zelle ohne Aktivmaterial, welche mit Hilfe der Finite-Elemente Software ANSYS® konstruiert wurde. Die benötigten „Kopplungselemente“ zwischen den Ableiterfolien, die das charakteristische Verhalten der Zelle widergeben, sind durch gelbe Pfeile angedeutet.

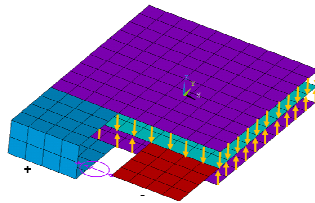


Abbildung 2.: Pouch-Zelle

Jedem Kopplungselement kann nun ein 1D-Batterieelement zugeordnet werden, welches mit den jeweils vorherrschenden Randbedingungen aus dem FE-Modell ausgewertet werden muss.

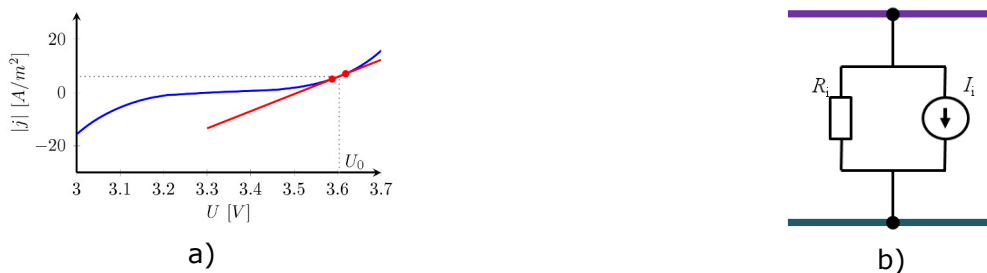


Abbildung 3.: Funktionsweise des Kopplungselements

Um nun die Ergebnisse der einzelnen 1D-Batterieelemente in die FE-Simulation zu integrieren, wird eine Linearisierung des Stromdichte-Spannungszusammenhangs durchgeführt:

$$|j(U)| \approx \underbrace{|j(0)|}_{d=I/A} + \underbrace{\frac{\partial |j(U)|}{\partial U}}_{k=1/AR} \bigg|_{U_0} U \quad (3)$$

Das auf diese Weise linearisierte Verhalten der 1D-Batterieelemente kann in der FE-Rechnung durch die Verwendung von Netzwerkelementen (siehe Abbildung 3) als Kopplung zwischen positiver und negativer Ableiterfolie berücksichtigt werden [4]. Es gilt: $I_i = A \cdot d_i$ für die Konstantstromquelle und $R_i = (A \cdot k_i)^{-1}$ für den Widerstand im Ersatzschaltkreis. Die Skalierung auf die Referenzfläche in der FE-Rechnung erfolgt über Gewichtungsfaktoren A. Um auch das thermische Verhalten korrekt zu erfassen werden Wärmequellen aus dem 1D-Batteriemodellen in das FE-Modell eingekoppelt.

Voraussetzung für einen robusten Ablauf der gekoppelten Simulation ist eine iterative Berechnung für jeden einzelnen Zeitschritt.

3D Elektro-thermisches Simulationsmodell: Umsetzung in ANSYS

Der kommerzielle FE-Löser ANSYS® verfügt zusätzlich zu typischen FE-Elementen (Schalen, Solids,...) auch über eine Bibliothek aus Netzwerkelementen. Diese werden – wie oben beschrieben – zur Kopplung von FE-Modell und 1D-Batteriemodellen benötigt.

Der iterative Ablauf der Simulation ist in Abbildung 4 dargestellt. Für einen Zeitschritt wird der äußere Strom der Batterie vorgegeben. Der FE-Löser ermittelt dazu eine Spannungs- bzw. Temperaturverteilung, welche als Randwerte für die 1D-Batteriemodelle verwendet werden. Aus den

Lösungen der einzelnen 1D-Batteriemodelle werden die Parameter R_i und I_i der Ersatzschaltkreise in ANSYS® ermittelt und zusammen mit den Wärmequellen eine neue Lösung des Gesamtsystems berechnet. Über diesem Ablauf wird nun so lange iteriert bis die Änderung der Potentialverteilung zwischen aufeinanderfolgenden Schritten unter einem festgelegten Schwellwert liegt.

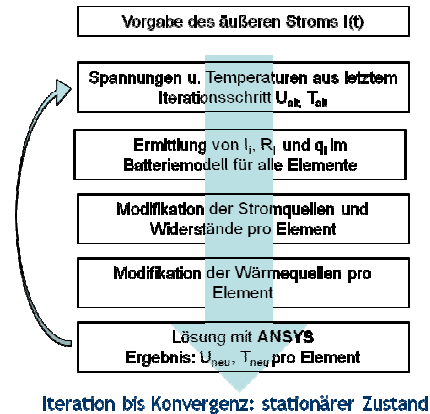


Abbildung 4: Schematische Darstellung des iterativen Simulationsablaufs.

Dieser Ablauf, welcher am Beginn der ersten Simulationen stand, lässt sich auf einfache Weise in ANSYS® mittels „Load-Steps“ realisieren. Eine enorme Einschränkung dieser Vorgehensweise ist, dass auf diese Weise nur eine Folge von stationären Zuständen berechnet werden kann. Der Grund dafür ist eine Einschränkung bei der gekoppelten thermo-elektrischen Simulation in ANSYS®, die keinen korrekten Neustart der Simulation mit den zuletzt errechneten Temperaturen als Anfangswerte zulässt [5]. Stattdessen werden die Temperaturen im Modell auf einen Standardwert(!) initialisiert.

Um trotzdem eine vollständig transiente Simulation zu ermöglichen wurde in der zweiten Phase ein spezieller Ansatz in ANSYS® implementiert. Vor jedem Iterationsschritt muss das Modell manuell in den korrekten Ausgangszustand gebracht werden (Laden des Modells, laden von Ausgangstemperaturen, setzen der Anfangsbedingungen und aller relevanten Randbedingungen). Nach Erfüllen des Konvergenzkriteriums der Iterationsvorschrift müssen die Ergebnisse für die Berechnung des neuen Zeitschritts (=Neustart der Simulation) gespeichert werden. Diese Vorgehensweise stellt eine aufwändige Methode dar, ist aber für einen robusten (=iterativen) Simulationsablauf unumgänglich.

Abschließend wurde noch die numerische Stabilität des Simulationsmodells untersucht. Hier wurde das Hauptaugenmerk auf das Verhalten für unterschiedliche zeitliche und örtliche Diskretisierung gelegt. Dabei wurden die Lösungen der betrachteten Modelle in geeigneter Weise interpoliert und eine maximale Abweichung berechnet (siehe [4]). Als kritisch bzgl. der Ergebnisqualität stellte sich für das gekoppelte System die maximal zulässige Zeitschrittweite heraus. Im Gegensatz dazu ist die Verschlechterung der Ergebnisse mit zunehmend gröberer Elementdiskretisierung gering.

1D Zellmodell: elektrochemische Modellierung

Um die zellinternen dynamischen Prozesse in einer Batteriezelle abbilden zu können, wurde ein mechanistisches elektrochemisches Modell einer Lithium-Ionen-Zelle als nichtlineares System gekoppelter partieller Differenzialgleichungen in einer Dimension realisiert. Das umgesetzte Modell ähnelt dem weit verbreiteten Ansatz von [6], erweitert um zusätzliche Aspekte, z.B. aus [7]. Zur Modellierung wurde eine Zelle betrachtet und die unterschiedlichen Gebiete der Gleichungen wurden entsprechend Abb. 5 definiert.

Dabei wurde das Hauptaugenmerk auf die Beschreibung der wesentlichen elektrochemischen Effekte im Inneren einer Zelle gerichtet, wie z.B. Diffusion, Migration und elektrische Potenziale. Damit

ergibt sich das Gleichungssystem (4), das als Unbekannte das Potenzial im Festkörper φ_s und in der Flüssigkeit φ_ℓ , sowie die Konzentrationen im Festkörper c_s und in der Flüssigkeit c_ℓ enthält.

$$\begin{aligned}
 -\nabla \left(\kappa_\ell(c_\ell) \left(\nabla \varphi_\ell + \frac{RT}{zF} t_\ell^+ f_{DH}(c_\ell) \frac{1}{c_\ell} \nabla c_\ell \right) \right) &= A_{is} j_{BV} & (x,t) \in \Omega \times (0,T) \\
 -\nabla \sigma_s \nabla \varphi_s &= -A_{is} j_{BV} & (x,t) \in \Omega' \times (0,T) \\
 \varepsilon_\ell \frac{\partial}{\partial t} c_\ell - \nabla \left(D_\ell \left(\nabla c_\ell + \frac{zF}{RT} \mu_\ell c_\ell \nabla \varphi_\ell \right) \right) &= \frac{A_{is}}{zF} j_{BV} & (x,t) \in \Omega \times (0,T) \\
 \frac{\partial}{\partial t} c_{si} - \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 D_{si} f_{RK}(c_{si}) \frac{\partial}{\partial r} c_{si} \right) &= 0 & (x,r,t) \in \Lambda_i \times (0,T)
 \end{aligned} \tag{4}$$

$$j_{BV} = \begin{cases} zFk \left(\frac{c_\ell}{c_{\ell,0}} \right)^b \left(\frac{c_s - c_{s,\min}}{c_{s,\max} - c_{s,\min}} \right)^c \left(\frac{c_{s,\max} - c_s}{c_{s,\max} - c_{s,\min}} \right)^d \left(\exp \left(\alpha \frac{zF}{RT} (\varphi_s - \varphi_\ell - U(c_{si})) \right) \right) + \\ - \exp \left(- (1 - \alpha) \frac{zF}{RT} (\varphi_s - \varphi_\ell - U(c_{si})) \right) + C_{dl} \frac{\partial (\varphi_s - \varphi_\ell)}{\partial t} & (x,t) \in \Omega' \times (0,T) \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

Für die Konzentrationen gelten die Anfangsbedingungen:

$$\begin{aligned}
 c_\ell(x,0) &= c_{\ell,0} & x \in \Omega \\
 c_{si}(x,r,0) &= c_{si,0} & (x,r) \in \Lambda_i
 \end{aligned} \tag{5}$$

D.h. die Zelle befindet sich zum Zeitpunkt $t = 0$ in Ruhe.

An den Rändern gelten homogene Neumann-Randbedingungen mit Ausnahme von:

$$\begin{aligned}
 \varphi_s &= 0 & (x,t) \in \Gamma_a \times (0,T) \\
 -\sigma \nabla \varphi_s &= -i(t) \text{ bzw. } \varphi_s = u(t) & (x,t) \in \Gamma_c \times (0,T) \\
 -D_s \frac{\partial}{\partial r} c_{si} &= \frac{1}{zF} j_{BV} & (x,t) \in (\Gamma_{Ro,a} \cup \Gamma_{Ro,c}) \times (0,T)
 \end{aligned} \tag{6}$$

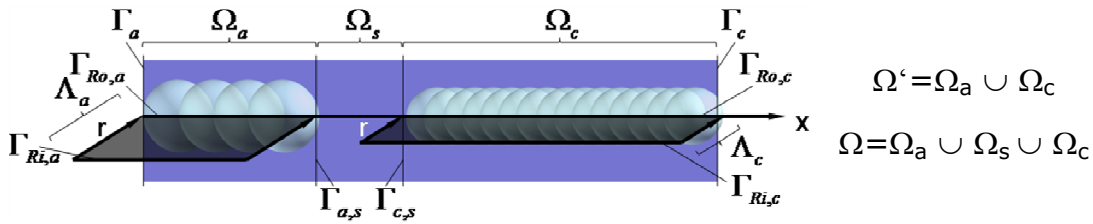


Abb. 5: Darstellung der Gebiete, eingeteilt in anodische (a), Separator (s) und kathodische (c) Regionen, sowie Festkörper (Ω') und Flüssigkeit (Ω) in x-Richtung. Für Festkörper-Partikel wurden Gebiete in (x,r)-Richtung – anoden- (Λ_a) und kathodenseitig (Λ_c) – definiert.

Die Potenziale werden bei $t = 0$ durch die Bedingungen $\nabla \varphi_s = 0$ und $j(x,0) = 0$ initialisiert.

Die Lösung dieses Systems von vier nichtlinear gekoppelten, partiellen Differentialgleichungen erfolgte zunächst getrennt durch *Modellseparation* in einen potenzial- und mehrere konzentrationsbezogene Teile. Dadurch können sowohl die Komplexität als auch die Laufzeit der Lösungsroutinen durch Einsatz von effizienten Lösungsmethoden enorm reduziert werden. Im

Verlauf der Untersuchung hat sich jedoch herausgestellt, dass der mögliche Parameterraum bedingt durch numerische Oszillationen stark eingeschränkt wird [8].

Die Lösung eines Systems – dem System (4) sehr ähnlich – erfolgt dabei durch die Finite-Elemente-Methode mit linearen Ansatzfunktionen zur örtlichen Diskretisierung und Rückwärts-Euler-Methode als zeitliche Integrationsmethode. Die Lösung der Nichtlinearität erfolgt durch eine gedämpfte Newton-Methode. Für Details dazu siehe [9]. Dabei zeigte sich numerisch deutlich stabileres Verhalten und eine Erweiterung des möglichen Parameterraums. Die Numerik wurde übernommen und die Implementierung stark überarbeitet. Im Speziellen wurde der Gleichungssatz mehrmals überarbeitet, die spätere Adaption und Wiederverwendbarkeit in Richtung Modellreduktion (Linearisierung, Proper Orthogonal Decomposition) und Space Mapping ermöglicht, sowie die Kopplung zur thermischen Simulation vorgesehen.

In Hinblick auf die Kopplung in die thermische Simulation war es noch notwendig, die Wärmequellen resultierend aus den Stoff- und Elektronentransportphänomenen nach außen hin verfügbar zu machen. Um die Wärmediffusionsgleichung

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} = \lambda \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \dot{q} \quad (7)$$

für viele Batteriemodelle mittels eines externen Löses lösen zu können, werden die Anteile der Wärmequellen in (7) für eine Ersatz-Volumsquelle berechnet:

$$\dot{q} = \frac{1}{L} \int_0^L (\dot{q}_{BV}(x) + \dot{q}_l(x) + \dot{q}_s(x)) dx \quad (8)$$

Die einzelnen Teile in (8) errechnen sich orts aufgelöst auf das Modell angewandt analog zu [10]:

$$\begin{aligned} \dot{q}_{BV}(x) &= A_{is} j_{BV} \eta + A_{is} \left(j_{BV} T \frac{\partial U_{OCV}}{\partial T} \right) \\ \dot{q}_l(x) &= \kappa_{eff} (\nabla \phi_L)^2 - \kappa_{eff} t_L^+ \frac{RT}{zF} f_{DH}(c_L) \frac{1}{c_L} \nabla c_L \nabla \phi_L \\ \dot{q}_s(x) &= \sigma_{eff} (\nabla \phi_S)^2 \end{aligned} \quad (9)$$

Dabei wird der explizit temperaturabhängige Teil – rot in (9) – nicht mit modelliert, d.h. $\frac{\partial U_{OCV}}{\partial T} = 0$.

Optimierungsmethode

Die Optimierung von nichtlinearen und komplexen Modellen ist sehr aufwändig. Deswegen wurde eine Optimierungsmethode entwickelt, die die Surrogate Model Optimierung unter Verwendung des Space-Mapping Verfahrens und Modellreduktionsmethoden nutzt. Das Space-Mapping Verfahren im Allgemeinen und seine Anwendung auf das 1D Batteriemodell sind im Folgenden beschrieben. Durch die Anwendung der Modellreduktion mittels „Proper Orthogonal Decomposition“ (POD) konnte eine weitere Beschleunigung des 1D Batteriemodells erzielt werden. Anschließend werden die Anwendung von Modellreduktion und Space-Mapping auf das 3D elektrisch und thermisch gekoppelte Batteriemodell beschrieben, ebenso wie die nötigen Adaptionen des Modells.

1D Zellmodell: Space Mapping

Das in (4) dargestellte System enthält sehr viele Parameter, die nicht direkt gemessen werden können und die einen großen Einfluss auf das Systemverhalten haben. Diese zu interessierenden Parameter seien nachfolgend mit μ aus $P_{ad} \subset \mathbb{R}^m$ bezeichnet. Um einen optimalen Parametersatz μ^* bezüglich eines Optimierungsziels, z.B. der Identifikation von Parametern oder die minimale Temperatur an der Oberfläche, zu finden, wird das folgende Optimierungsproblem formuliert:

$$\mu^* = \arg \min_{\mu \in P_{ad}} H(f(\mu)) = \arg \min_{\mu \in P_{ad}} \sum_{i=1}^n w_i (y(t_i; \mu) - \hat{y}(t_i))^2 \quad (10)$$

welches die Differenz zwischen gemessenen Batteriespannungen, $\hat{y}$, und errechneten Spannungen aus (4), $f(\mu) = y(\cdot; \mu) = \varphi_s(d, t_i) - \varphi_s(a, t_i)$, zu vorgegebenen Zeitpunkten t_i minimiert. Unterschiedliche Zeitschrittweiten werden durch die Gewichte w_i berücksichtigt. Eine klassische Optimierung mit diesem Zielfunktional führt jedoch zu inakzeptablen Antwortzeiten, da nicht nur die Lösung des Systems (4) berechnet, sondern auch noch der Gradient für jede Variable aus μ numerisch bestimmt werden muss.

Eine Beschleunigung und bessere Handhabung der Optimierung wird durch die Anwendung der Space-Mapping-Methode erreicht, die ursprünglich in [12] eingeführt wurde. Dabei werden Auswertungen des komplexen „feinen“ Originalmodells $u = F(\mu)$ durch Auswertungen eines schnelleren, stark vereinfachten „groben“ Modells $v = C(\lambda)$ („surrogate model“) mit λ aus $L_{ad} \subset \mathbb{R}^m$ ersetzt. Die Übertragung der Ergebnisse zwischen den Modellen erfolgt durch eine *Mapping-Funktion* $p: P_{ad} \rightarrow L_{ad}$, sodass $f(\mu) \approx c(p(\mu))$ eine gute Schätzung ergibt. Da ein direktes Anschreiben der *Mapping-Funktion* nicht möglich ist, erfolgt die Auswertung von $p(\mu)$ durch die Lösung eines weiteren Optimierungsproblems. Der hohe Aufwand der Auswertung der Mapping-Funktion kann durch die Verwendung des Broyden-Verfahrens – [13][15] – deutlich reduziert werden. Dabei wird die *Mapping-Funktion* in unmittelbarer Umgebung linearisiert und sukzessive verbessert. Für eine Visualisierung des Ablaufs s. Abb. 6.

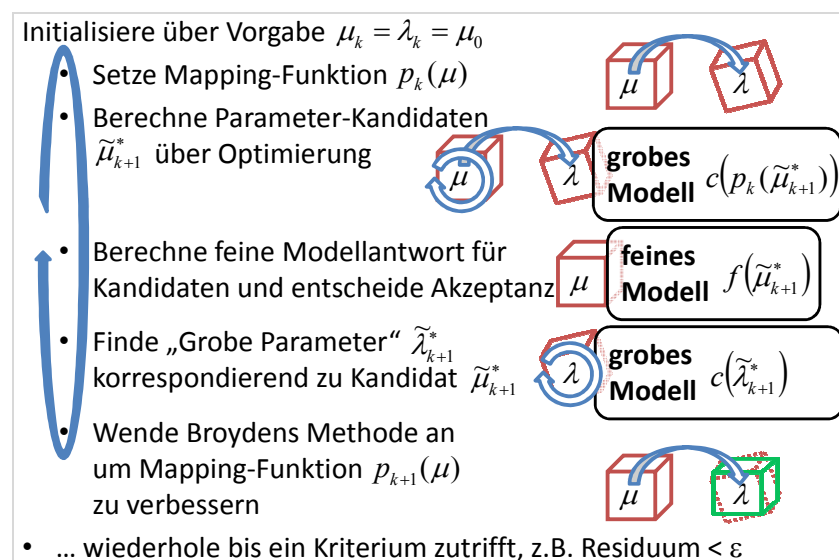


Abb. 6: Schematische Darstellung des Optimierungsablaufs mittels Space-Mapping.

Das Verfahren an sich wurde verbessert und am Batteriemodell getestet. Dabei wurden für unterschiedliche Dimensionszahlen beispielhaft Optimierungsszenarien entwickelt und gelöst – s. Abb. 7. Zusätzlich konnten Möglichkeiten aufgezeigt werden, wie mit reduzierter Zahl an Gleichungssystem-Adaptionen auf einfache Weise deutlich bessere Laufzeiten erzielt werden können [18], sowie unter Entwicklung des sog. adjungierten Systems die Optimierung des groben Modells deutlich verbessert werden kann – s. [19].

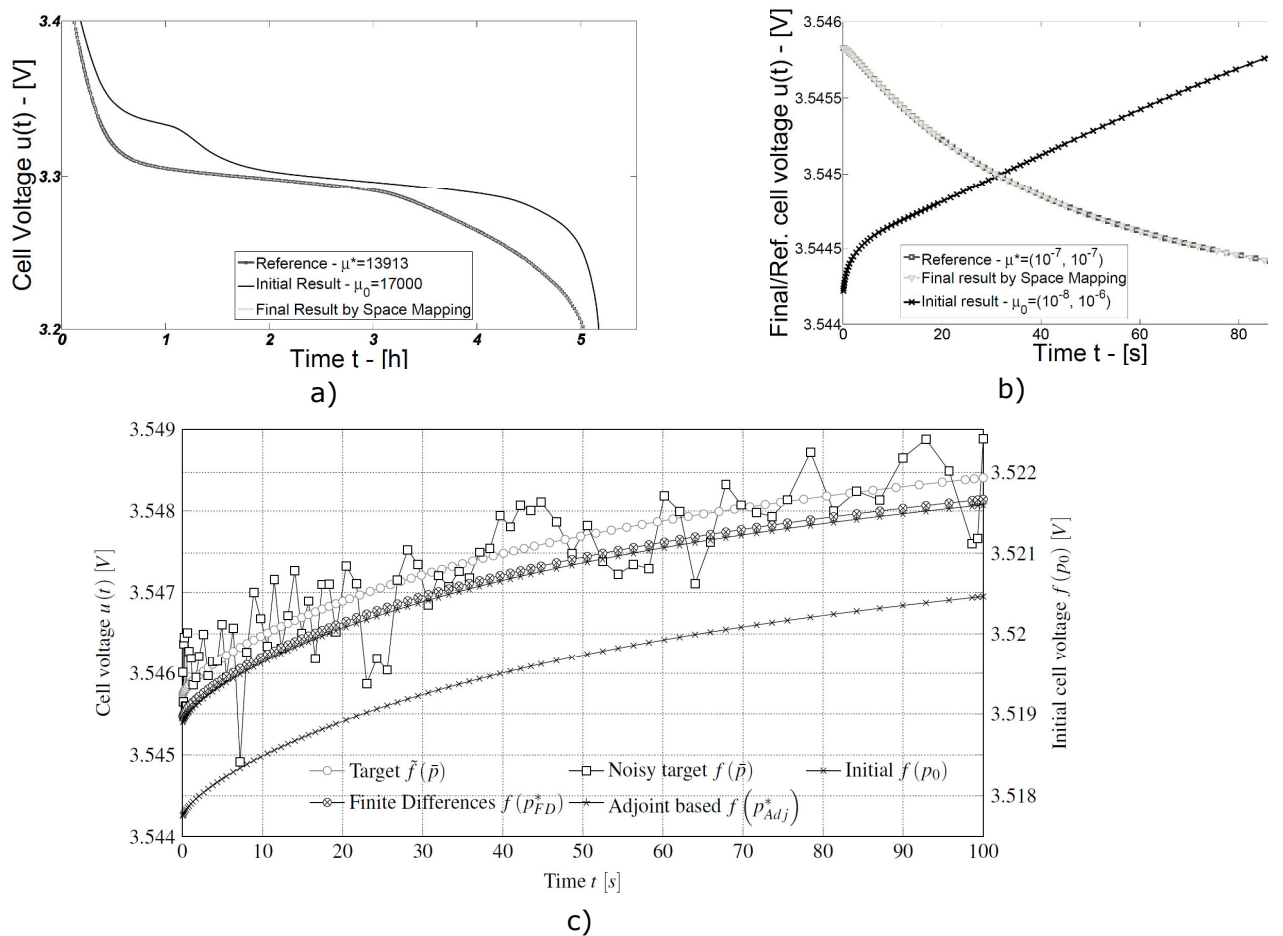


Abb. 7: Ergebnisse der Space-Mapping Optimierung für einen a), zwei b) und drei Parameter c) [17], [18], [19]. Dargestellt sind jeweils die Zellspannungsverläufe der Zielgrößen, der Initialparameter und der optimalen Endwerte. Ergebnisse der Zielgrößen und Endwerte überdecken sich in a) und b) sehr gut. In c) können die Zielgrößen schon aufgrund des eingeführt Rauschens nicht genau erreicht werden, dennoch liegen die Endwerte sehr nahe bei den Zielgrößen.

1D Zellmodell: Proper Orthogonal Decomposition

Zur Beschleunigung der Berechnung von linearen Systemen ist es wiederum möglich, die sehr allgemeine Finite-Elemente-Basis durch eine spezialisierte, reduzierte Basis zu ersetzen. Dabei wird mittels der *Proper Orthogonal Decomposition* (POD) aus bereits errechneten Lösungen (= „snapshots“) eine neue Basis geschaffen, die dann in der Anzahl ihrer Dimensionen einfach reduziert werden kann. Dadurch wird ein hochdimensionales Modell in ein Modell reduzierter Ordnung (ROM) übergeführt, dass effizienter gelöst werden kann. Je kleiner die Dimension l des ROM, desto größer ist der entstehende Approximationsfehler ε_{POD} .

Die Anwendung der POD-Methode und der POD-Basis-Berechnung wurde für einen allgemeineren Fall in einem anderen Projekt¹ am Kompetenzzentrum entwickelt. In diesem Projekt wurde die POD-Methode auf das linearisierte Batteriemodell (siehe Anhang) angewandt.

Für Details zur POD Methode im Allgemeinen siehe [29]. Im Zusammenhang mit dem Space Mapping wurde das Laufzeitverhalten untersucht bei der Lösung des ROM-Systems gegenüber der

¹ Projekt ProgoBatt - Prognosesicheres Batteriemodell für Elektro- und Hybridfahrzeuge (gefördert durch den Zukunftsfonds Steiermark, Projektnummern: 5069)

Lösung des linearen Systems, s. Tab. 1. Eine Beschleunigung um Faktor drei gegenüber dem linearen Modell bzw. Faktor sechs gegenüber dem nichtlinearen Modell erscheint realistisch.

Simulation	Bruttozeit = Ende - Beginn	Nettozeit = nur Assemblieren und Lösen
Nichtlinear (4)²	318,04s	274,43s
Nichtlinear (4)³	184,51s	167,65s
Linear³	69,29s (100%)	49,57s (100%)
POD^{3,4}	56,51s (81,6%)	33,14s (66,9%)
POD^{3,5}	55,5s (80,1%)	34,85s (70,3%)
POD^{3,5,6}	54,31s (78,4%)	33,18s (66,9%)
POD^{3,5,7}	34,46s (49,7%)	14,29s (28,8%)

Tab. 1: Brutto- und Nettolaufzeiten unterschiedlicher Varianten des ROM-Systems inkl. Prozentangabe der Laufzeit gegenüber dem linearen System.

3D Elektro-thermisches Simulationsmodell: Parametergesteuerter Modellaufbau in ANSYS: Vorarbeit für Geometrieoptimierung und Space-Mapping

Hinsichtlich der Verwendung des entwickelten Ansatzes zur Batterieoptimierung ist die Möglichkeit des parametergesteuerten, automatisierten Modellaufbaues hervorzuheben. Dazu wird die ANSYS-spezifische Skriptsprache APDL® genutzt. Alle im Projekt erstellten 3D-Modelle sind in ihren geometrischen Abmessungen nahezu frei parametrisierbar.

Neben der sehr einfach aufgebauten Pouch-Zelle (Abbildung 2) wurden zwei weitere, häufig verwendete Zellgeometrien untersucht (siehe Abbildung 8):

Prismatisch gestapelte Zelle: positive und negative Ableiterfolien sind in abwechselnder Reihenfolge übereinandergelegt. Die anoden- bzw. kathodenseitig überstehende Ableiterflächen sind auf der linken bzw. rechten Seite der Zelle zusammengefasst und mit den ausgeführten Ableiterfläche verbunden. Das zwischen den Ableiterfolien befindliche Aktivmaterial wird elektrisch durch den oben dargestellten Ansatz integriert und thermisch durch 3D Elemente abgebildet. Dieser Zelltyp ist vor allem aus messtechnischer Sicht für weitere Untersuchungen bestens geeignet, da Temperatursensoren direkt auf der Zelloberfläche angebracht werden können. Außerdem wird auf Grund der schlechten Wärmeleitfähigkeit der Zelloberfläche (Pouch-Folie) eine inhomogene Temperaturverteilung auf der Zelloberfläche erwartet.

Zylindrisch gewickelte Zelle: je eine positive und eine negative Ableiterfolie wird hier auf einem Wickeldorn (im Zentrum der Zelle) aufgerollt. Die Anzahl der Wicklungen wird durch die äußeren Abmessungen des Metallgehäuses bestimmt. Das Aktivmaterial kann analog zur prismatisch gestapelten Zelle elektrisch und thermisch modelliert werden. Die Ableiterflächen sind hier nach oben bzw. unten ausgeführt und mit dem jeweiligen Zelldeckel verbunden. Im Gegensatz zur gestapelten Zelle ist die innere Zelloberfläche nicht direkt mit Messtechnik zugänglich und die relativ hohe Wärmeleitfähigkeit der Metallhülle führt zu einer homogenen Temperaturverteilung.

² mit Zeitschrittwertenregelung, d.h. Zeitschrittwerten werden adaptiv für jeden Zeitschritt neu bestimmt

³ ohne Zeitschrittwertenregelung, d.h. Zeitschrittwerten werden von ² wiederverwendet

⁴ mit Erstellung der POD-Basen

⁵ ohne Basiserstellung, d.h. POD-Basen werden von ⁴ wiederverwendet

⁶ mit Sicherung der Lösungssysteme je Zeitschritt

⁷ mit Wiederverwendung der von ⁶ je Zeitschritt gesicherten Systeme

In beiden Modellen können neben den äußeren Abmessungen (Länge, Höhe, Breite bzw. Durchmesser) auch weitere, zellspezifische Parameter eingestellt werden:

Prismatisch gestapelte Zelle	Zylindrisch gewickelte Zelle
Dicke der neg. bzw. pos. Ableiterfolie	Dicke der neg. bzw. pos. Ableiterfolie
Dicke des Aktivmaterials	Dicke des Aktivmaterials
Dicke der Pouch-Folie	Dicke des Zellgehäuses u. d. Isolationsschicht
Thermische und elektrische Materialdaten	Thermische und elektrische Materialdaten
Anzahl der gestapelten Anoden	Anzahl der Wicklungen
	Anzahl und Position der Ableiterfahnen
	Durchmesser des Wickeldorns

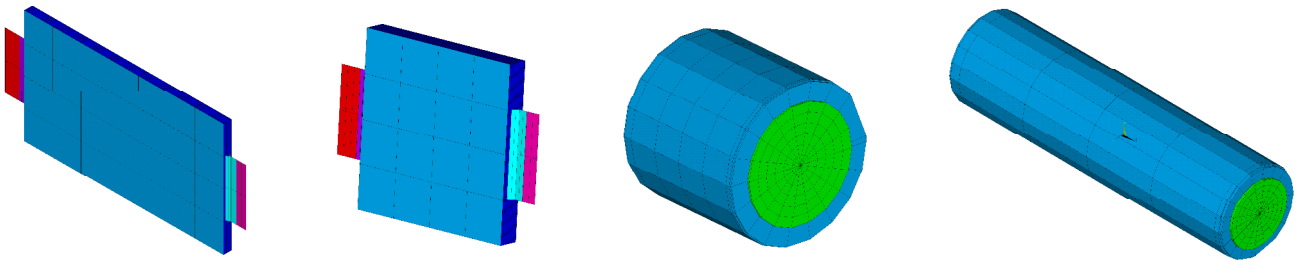


Abbildung 8: Automatisch erzeugte prismatische und zylindrisch gewickelte Zellgeometrien.

3D Elektro-thermisches Simulationsmodell: Modellreduktion und Space-Mapping

Das oben dargestellte 3D Batteriemodell, bestehend aus der 3D-FE Simulation in ANSYS® und den 1D Batteriemodellen, soll beschleunigt werden. Um eine Beschleunigung des Gesamtsystems zu erreichen können an beiden Teilsystemen Schritte gesetzt werden, um die Auswertezeit zu reduzieren, ohne die Qualität der Simulation maßgeblich zu verschlechtern.

Eine Modellreduktion kann nun auf beiden Ebenen ansetzen:

Modellreduktion in der 3D-FE Simulation in ANSYS®

mathematische Modellreduktion: Die für die mathematische Modellreduktion benötigten Systemmatrizen können für den FE-Löser ANSYS® nicht gelesen werden. Zwar sind ab Release 13 Funktionen verfügbar, welche den Zugriff auf die bereits assemblierten Systemmatrizen ermöglichen, allerdings gelingt dies im vorliegenden Fall des gekoppelten transienten, elektrisch-thermischen Modells nicht. Eine direkt in ANSYS® implementierte Methode zur Modellreduktion ist wiederum nur auf gekoppelte mechanisch-elektrostatische Probleme anwendbar (siehe „Reduced Order Modeling“ in [20]).

„physikalische“ Modellreduktion: Da für die Anwendung der mathematischen Modellreduktion die benötigten Systemgrößen nicht zugänglich waren, wurde ein alternativer Modellreduktionsansatz basierend auf physikalischen Überlegungen erarbeitet. Für die gestapelte Zelle lässt sich der Rechenaufwand beispielsweise durch „Homogenisierung“ von (geometrischen) Zellbereichen erreichen. Der sich wiederholende Ablauf von Anode, Aktivmaterial und Kathode kann in ein Material mit homogenisierten thermischen Materialparametern übergeführt werden.

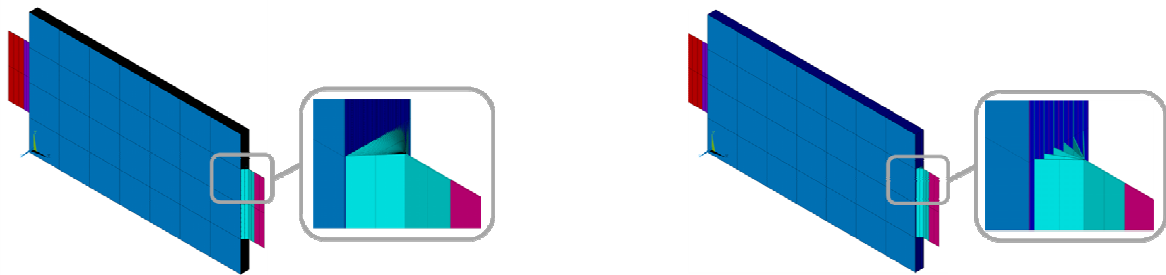


Abb. 9: 3D-Batteriemodell (links) und reduziertes 3D-Batteriemodell (rechts).

Der Rechenaufwand für die 3D-FE Rechnung kann mit diesem Ansatz stark reduziert werden, wobei die Abweichung der Zelltemperatur zwischen Originalmodell und reduziertem Modell für den oben dargestellten Fall unterhalb von 0.05K liegt. Als wesentlicher Faktor für die erfolgreiche Reduktion im Fall der prismatischen Zelle ist deren symmetrischer Aufbau zu nennen.

Eine weitere Möglichkeit der Reduktion des Berechnungsaufwandes besteht auf Grund der Symmetrie im 3D-Modellaufbau der prismatischen Zelle. Ein Viertel des Simulationsmodells enthält dabei die gesamte Information über das Modell. 1D-Batteriemodelle müssen also nur für dieses Teilmodell ausgewertet werden. Durch Ausnutzen der Symmetriebedingungen können die benötigten Daten für das Gesamtmodell bereitgestellt werden. Grundvoraussetzung ist hier natürlich eine Symmetrie bzgl. der thermischen Randbedingung (Konvektion).

Modellreduktion mittels Clustering der 1D-Batteriemodelle:

Die verwendeten 1D Batteriemodelle verfügen über einen inneren Zustand und werden für bestimmte Randbedingungen (Spannungen bzw. Temperaturen aus der 3D FE-Rechnung) ausgewertet. Die Tatsache, dass die Spannungsverhältnisse auf Grund der hohen elektrischen Leitfähigkeiten der verwendeten Materialien nur geringe räumliche Änderungen zeigen, legt den Ansatz nahe, im 3D-Batteriemodell Bereiche mit ähnlichen Potentialen zusammenzufassen. Auch in der Temperaturverteilung können Bereiche vergleichbarer Temperatur identifiziert werden (siehe z.B. Abb. 10a).



Abb. 10: Bereiche vergleichbarer Randbedingungen für 1D Batteriemodelle in der gestapelten Zelle: (a) Temperaturverteilung, (b) Spannungsverteilung

Ein vollkommen allgemeiner Ansatz zur Reduktion von Auswertungen von 1D-Batteriemodellen basiert auf der Verwendung des KMeans-Algorithmus (siehe z.B. [21]). Im vorliegenden Fall kann der Standardalgorithmus auf Grund der Zeitabhängigkeit des Problems nicht ohne Modifikationen angewendet werden.

Da der Zustand der Batteriemodelle in den Vorgang mit einbezogen werden muss ist es außerdem zweckmäßig, das Verfahren außerhalb des 3D-FE Modells zu implementieren.

Nach der Lösung des FE-Modells wird zunächst ein voller Zeitschritt (mit $|I| > 0$) berechnet, um eine Spannungs- bzw. Temperaturverteilung der betrachteten Zelle zu erhalten. Es werden alle 1D-Batteriemodelle ausgewertet, damit ein konsistenter Ausgangszustand vorliegt. Erst im darauffolgenden Zeitschritt wird der Clustering-Algorithmus auf die 1D Batteriemodelle angewendet.

Auf Basis des vorliegenden Ausgangszustandes werden die 1D Batteriemodelle in Gruppen (=Cluster) unterteilt. Elemente eines Clusters „ähneln“ sich in ihren Eigenschaften, im Fall der 1D-Batteriemodelle verfügen sie z.B. über vergleichbare Potentialverhältnisse. Als Maß für die Ähnlichkeit der Elemente wird in der aktuellen Implementierung die euklidische Distanz zwischen zwei 1D-Batteriemodellen im Parameterraum herangezogen.

Nach einer Gruppierung von 1D-Batteriemodellen bietet sich eine effiziente Möglichkeit der Modellreduktion: Da vorausgesetzt werden kann, dass alle Elemente eines Clusters bei einer Änderung der Randbedingungen (Spannung bzw. Temperatur aus der FE-Rechnung) vergleichbare Antworten liefern ist es ausreichend, jeweils nur ein Element stellvertretend für alle Elemente des Clusters auszuwerten. Die Antwort des stellvertretenden Elements kann dann an alle Mitglieder des Clusters weiterverteilt werden. Durch diese Vorgehensweise lässt sich die zeitaufwändige Auswertung von 1D-Batteriemodellen deutlich reduzieren. Um diesen Mechanismus in konsistenter Weise auch auf transiente Simulationen anwenden zu können werden die Mittelpunkte der Cluster für jeden Iterationsschritt an die geänderten Randbedingungen bzw. an die Veränderungen in den einzelnen Clustern angepasst. Die Clustermittelpunkte werden als Startwerte für den neuen Clustering-Schritt verwendet. Damit wird eine kontinuierliche Änderung der Cluster – und damit verbunden auch der stellvertretenden 1D Batterieelemente – über die Zeit erreicht.

Space-Mapping

Zur Optimierung des 3D-Batteriemodells wird der weiter oben dargestellte Space-Mapping Ansatz verwendet in der konkreten Form von [13]. Dazu wurde der für das 1D Zellmodell entwickelte Algorithmus weiter abstrahiert und von der konkreten Anwendung entkoppelt. Die grundsätzlich zu lösende Struktur der lösbaren Probleme wurde dabei jedoch beibehalten, d.h. es wurde weiterhin für quadratische Probleme auf die besondere Form von (10) hin optimiert. Zusätzlich wurden zwei umschaltbare Betriebsmodi eingeführt, die die Berücksichtigung von abhängigen, linearisierten Modellen, als auch unabhängige Lösungsansätze als „grobe Modelle“ ermöglichten. Im Zusammenhang mit dem 3D-Modell wurde die Methode mit unabhängigem groben Modell angewandt.

Potentialüberprüfung, Validierung und Optimierungsergebnis

In diesem Arbeitspaket wurde die entwickelte Optimierungsmethode getestet und mit dem vorher validierten Modell wurden Optimierungsläufe durchgeführt. In diesem Bericht werden zuerst die Validierung und die dabei auftretenden Probleme beschrieben. Dann folgt die Demonstration des Optimierungsbeispiels. Schließlich werden die Ergebnisse der Potentialüberprüfung beschrieben.

Elektrische Validierung

Zur Validierung wurden Messdaten des Projektpartners AVL herangezogen. Die Messdaten erfassten dabei die angelegten Ströme die resultierenden Spannungen und Temperaturen über die Zeit. Die Messprofile wurden analysiert und geeignet aufbereitet und als Zyklisierprogramm nachgebildet.

Hier wurden exemplarisch zwei Lastfälle betrachtet:

- a) Das quasi-stationäre Verhalten in Lade-/Entladezyklen, sowie
- b) Das dynamische Verhalten in kürzeren Pulsen betrachtet.

Dabei wurde auf Basis einer langsamen Entladung zu Beginn die U_{OCV} -Kurve zwischen den Spannungsgrenzen soweit angepasst, dass sie dem vorliegenden Batterietyp möglichst weitgehend entspricht. Im Anschluss wurde versucht, kleinere, durch dynamische Effekte bedingte, Abweichungen zu kompensieren, indem eine Skalierung des eingebrachten Stroms durchgeführt wurde. Dies entspricht auch bei realen Batterie-Systemen der gängigen Praxis, da die zyklisierbare Ladung zwischen zwei Spannungsgrenzen aus produktionstechnischen und phänomenologischen Gründen nicht exakt der Nominalkapazität entsprechen kann. Es wurde festgestellt, dass bei Vorgabe des Stromprofils entsprechend der Messdaten aufgrund der – zwangsläufig – von der Realität abweichenden Bedatung des Modells über die Zeit zu einer Drift im Ladezustand kommt.

Dementsprechend wurde das Profil in einzelne Blöcke geteilt, sodass alternierend von einer vollen bzw. leeren Zelle gestartet wird. Damit wurde der reale Ladezustand wesentlich besser getroffen, allerdings war zu bemerken, dass Konstantspannungsschritte der Messung durch Stromvorgabe in der Simulation nicht nachzubilden sind.

Das Verhalten der Zellspannung konnte im quasi-stationären Fall durch eine zusätzliche Anpassung der Stromskalierung und durch Vorgabe von Konstantströmen als auch –spannungen sehr gut wiedergeben werden. Aufgrund der hohen Komplexität der dynamischen Parameterbestimmung war es jedoch noch nicht möglich, alle Abklingvorgänge sowie höherstromige Entladungen exakt abzubilden.

Das Verhalten bei Vorgabe von Strompulsen mit höherer Dynamik zeigt eine qualitativ ähnliche Wiedergabe der Spannungsauslenkung der Messung, jedoch unterschätzt die Simulation die Reaktion der realen Zelle, was wiederum durch die nur näherungsweise durchgeführte Anpassung der Materialparameter an die reale Zelle erklärbar ist.

Ergebnisse der thermischen Validierung

Nach Prüfung des elektrischen Verhaltens wurde auch das thermische Verhalten des Batteriemodells einem Vergleich mit Messdaten unterzogen. Das zugrundeliegende Stromprofil wurde analog zur elektrischen Validierung in Teilzyklen zerlegt, um eine Drift der Spannung zu vermeiden und einen möglichst realitätsnahen Spannungsbereich der Zelle ausnutzen zu können.

Die mittels Simulation ermittelten Temperaturverläufe geben qualitativ das Verhalten der realen Zelle gut wieder. So kann z.B. der stromrichtungsabhängige Temperaturanstieg qualitativ gut dargestellt werden.

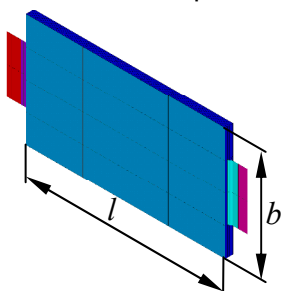
Hauptgrund für die beobachteten Abweichungen zwischen den absoluten Temperaturwerten aus Simulation und Messung ist eine zu geringe Wärmeproduktion in der aktiven Schicht der Zelle. Eine Ursache dafür liegt in der bereits dargestellten Abweichung im elektrischen Verhalten der Zelle. Dafür spricht auch, dass sich abhängig von der Stromstärke eine unterschiedlich starke Abweichung im Temperaturverlauf zeigt. So wurden z.B. größere Abweichung bei geringen C-Raten beobachtet.

Da im dynamische Profil fast ausschließlich niedrige C-Raten vorkommen fällt hier auch die simulierte Temperatur während des gesamten Zyklus zu niedrig aus. *Eine bessere Übereinstimmung zwischen Simulation und Messung könnte mit einem von der C-Rate abhängigen Korrekturfaktor erzielt werden.*

Darüber hinaus spielen auch die verwendeten thermischen Materialparameter für die Simulation eine nicht unwesentliche Rolle. Diese sind jedoch für die einzelnen Komponenten der Zelle mit gängigen Messverfahren schwer zugänglich. Zusammen mit der idealisierten Abbildung der Umgebung lassen sich damit die beobachteten Abweichungen im simulierten Aufwärmverhalten der Zelle erklären.

Optimierungsergebnisse

Für eine exemplarische Optimierung wurde eine sinnvolle Optimierungsaufgabe definiert:



Es sollen die äußeren Abmessungen l bzw. b einer Zelle, vgl. Abb. 15, bei gleichbleibender Kapazität derart verändert werden, sodass die auftretende Maximaltemperatur der Zelle minimiert wird.

Diese Aufgabe wurde wieder an die besondere Struktur von (10) gebracht, d.h. das Optimierungsproblem wurde wiederum definiert als:

$$\mu^* = \arg \min_{\mu \in P_{ad}} H(f(\mu)) = \arg \min_{\mu \in P_{ad}} \sum_{i=1}^n w_i (y(t_i; \mu))^2 \quad (11)$$

Abb. 11: Zu optimierende Zelle

Der zu interessierende Parameter wurde gewählt zu $\mu = \{b\}$. Der optimale Parametersatz μ^* resultiert dann in der Zellbreite, die die minimale Temperatur an der Oberfläche ergibt. Zur Optimierung wurde der zeitliche Verlauf der Temperatur aus der Simulation verwendet:

$$f(\mu) = y(\cdot; \mu) = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} T(\mathbf{x}, t_i; \mu) d\mathbf{x} \quad (12)$$

Als Eingabeprofil wurde eine 3C-Konstantstrom-Entladung gewählt, die für $t=1223s$ angelegt wurde. Betrachtet wurde die Temperaturänderung gegenüber einer Umgebungstemperatur von $20,5^\circ C$. Simuliert wurde eine gestapelte Zelle, wobei das in AP4 entwickelte 3D Elektro-thermische Simulationsmodell eingesetzt wurde, inklusive der vorgestellten Methode zur Modellreduktion. Die Rechenzeit für das Modell betrug dabei etwas mehr als vier Stunden, wobei die eingekoppelten EC-Modelle auf drei Clusterknoten mit jeweils 8 Quad-Core AMD Opteron Prozessoren und 32GB Arbeitsspeicher möglichst parallel gerechnet wurden.

Der Startwert wurde für die Optimierung auf $\mu=167mm$ gesetzt. Bei dieser Problemstellung ist davon auszugehen, dass die optimale Lösung in unendlicher Breite liegt. Um eine Entartung der Lösung dieser Gestalt zu vermeiden, wurde die obere Grenze auf $\mu^{max}=334mm$ die untere Grenze auf $\mu^{min}=83,5mm$ gesetzt.

Als grobes Modell wurde ein sehr einfaches, grob parametrisiertes Äquivalenz-Widerstandsnetzwerkmodell eingesetzt. Dieses Modell konnte für den interessierenden Parameterbereich in jeweils $4min\ 24s \pm 27s$ ausgewertet werden, was einer ca. 60fachen Beschleunigung gegenüber dem feinen Modell entspricht.

Zur Berechnung des Gradienten wurde in diesem Fall aufgrund der Komplexität des Problems kein adjungiertes System aufgesetzt. Die Berechnung der Ableitung von (12) erfolgte über die Berechnung von finiten Differenzen, wie sie in *Python SciPy* vorgesehen ist.

Die Optimierung wurde in 12h 13min 37s durchgeführt. Dabei wurden drei Rechnungen des feinen Modells verwendet und die Ergebnisse von 67 Rechnungen des groben Modells. Die Progression der Optimierten Werte ist in Abb. 13 dargestellt. Tatsächlich wurden eine Auswertung des feinen Modells sowie 16 Auswertungen des groben Modells aufgrund der Archivierung und Wiederverwendung der Ergebnisse eingespart.

Wie erwartet lag das Ergebnis mit $\mu^*=333,59mm$ sehr nahe bei der vorgegebenen Obergrenze. Die Broydenmatrix – als zentralem Element der Mapping-Approximation – wurde dabei zu 0,996 berechnet, d.h. das grobe Modell überschätzte den Effekt des feinen Modells minimal.

Eine Referenz-Optimierung des feinen Modells wurde aufgrund der enormen zeitlichen Anforderungen nicht durchgeführt. Es ist jedoch davon auszugehen, dass eine solche zu Laufzeiten sehr viel größer als 12h geführt hätte, da in dieser Zeit nur die Initialauswertung, eine Ableitungsrechnung und ein erster Schritt hätten durchgeführt werden können.

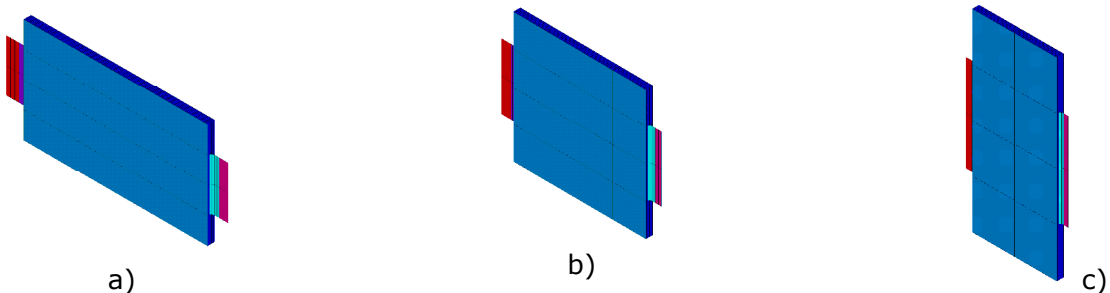


Abb. 12: 3D-Modelle während des Optimierungsablaufs mittels Space-Mapping. a) Zu Beginn, b) Mittlerer Bereich, c) finale Lösung

Insgesamt hat sich der Einsatz eines stark vereinfachten „groben Modells“ über die Space-Mapping-Technik als sehr hilfreich und enorm zeitsparend erwiesen.

Die dargestellte Methode weist einen breiten Anwendungsbereich auf - so ist es neben der Geometrieoptimierung z.B. möglich, die Ableiterfolien (Aluminium bzw. Kupfer) bzw. die Dicke der aktiven Zwischenschicht bzgl. einer vorgegebenen Nebenbedingung zu optimieren. Abgesehen von der im Beispiel verwendeten Maximaltemperatur im gesamten Zellgebiet können auch auftretende Temperaturen an einem festgelegten Punkt der Zelle bzw. maximale Temperaturgradienten herangezogen werden.

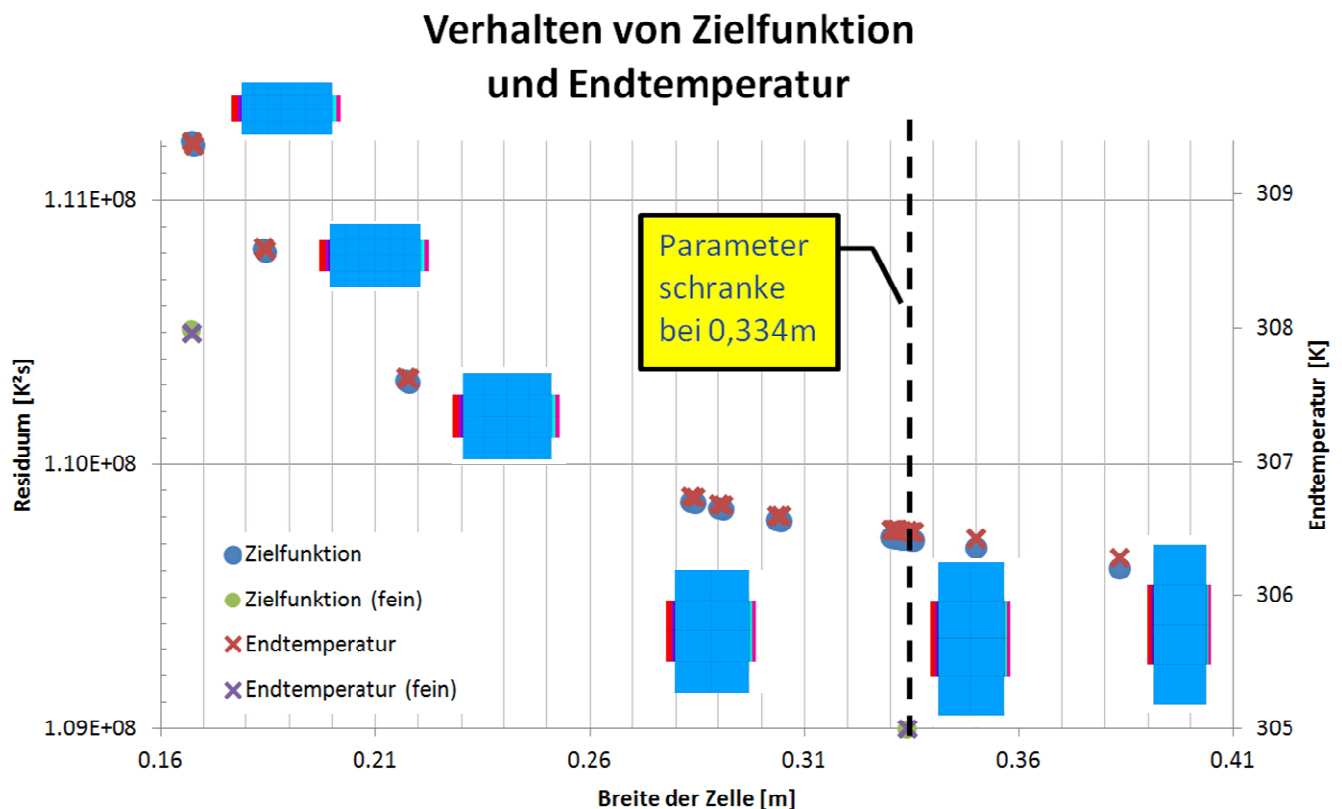


Abb. 13: Verhalten der Zielfunktion und Endtemperatur der Modelle während des Optimierungsablaufs mittels Space-Mapping

Neben den im 3D Modell vorkommenden Parametern kann mit diesem Ansatz auch eine Optimierung von Parametern des elektrochemischen Batteriemodells durchgeführt werden, bei der die Auswirkungen auf Zellebene (=1D Modell) in die Betrachtung mit einbezogen werden können.

Potentialüberprüfung

Die Potentialabschätzung als Betrachtung möglicher weiterer Verwendungsfelder und Voraussetzungen / Einschränkungen für die entwickelten Methoden wurde durchgeführt.

Die verwendeten Lösungsverfahren für PDEs (FE Methode, implizites Eulerverfahren, gedämpfte Newton Methode), können für Gleichungen oder Systeme gleichen Typs verwendet werden (sofern eine Lösung existiert und das Problem nicht zu schlecht konditioniert ist). Die gleichen Voraussetzungen gelten für die Modellreduktion durch POD. Zusätzlich kommt es hier häufiger zu Problemen bei Gleichungen, die einen Transportterm enthalten und so linear unabhängige Snapshots haben. Für solche Probleme sollte man POD folglich nicht verwenden. Insgesamt ergeben sich sehr breite Anwendungsmöglichkeiten.

Auch die Surrogate Model Optimierung/Space Mapping Methode ist in sehr vielen Bereichen anwendbar. Wie in [14] beschrieben gelten dafür einige Grundvoraussetzungen:

1. Die Menge der optimalen Lösungen für das grobe Problem, die die ursprüngliche Aufgabenstellung lösen, muss prinzipiell über die Mapping-Funktion erreichbar sein, d.h. sie muss im Bild der Mapping-Funktion liegen.
2. Konkreter muss die Menge der optimale Lösung für das grobe Problem über die Mapping-Funktion aus den Lösungen des feinen, ursprünglichen Problems erreichbar sein – womit 1. gleich mit erfüllt wäre.
3. Die Mapping-Funktion sollte eine eins-zu-eins Abbildung (bijektiv) sein.
4. Idealerweise gibt es eindeutige Lösungen für das grobe und das feine Problem.

Sollten diese Voraussetzungen allesamt erfüllt werden, kann die Space Mapping Methode auf das Optimierungsproblem angewandt werden. Bei den meisten realen Problemstellungen im technischen Bereich tritt jedoch der Fall ein, dass eine oder mehrere der Anforderungen nicht erfüllt werden kann. Im Speziellen ist die Eindeutigkeit der Mapping Funktion unter Punkt 3. nicht immer gegeben. Durch entsprechende Umformulierung des Problems, z.B. unterschiedliche Regularisierungs-Varianten, kann dennoch eine Lösung erzielt werden. Dadurch wird eine kleine Abweichung gegenüber der tatsächlich optimalen Lösung in Kauf genommen, was im konkreten Fall individuell zu beurteilen wäre. Sofern ein grobes Modell gefunden werden kann, das sehr viel schneller ist als das feine ursprüngliche Modell ist es dann auch wirtschaftlich sinnvoll, die Methode anzuwenden. Eine konkrete Zahl, um wie viel die entsprechenden Modelle schneller sein müssen, kann in diesem Zusammenhang nicht genannt werden. Je nach Ähnlichkeit des groben Modells zum feinen Modell ist aber nach den erhaltenen Ergebnissen davon auszugehen, dass eine zumindest 3-10fache Beschleunigung des ursprünglichen Modells als sinnvoll anzusehen ist.

Die Form des Space Mapping, die auch auf das 3D Batteriemodell in ANSYS angewandt wurde, benötigt lediglich eine genaues und ein grobes Modell des Problems; die Verwendung kommerzieller Solver ist möglich. Während die genaue Problembeschreibung in der normalen Optimierungsaufgabenstellung bereits vorhanden ist, muss als zusätzlicher Aufwand nur noch ein vereinfachtes Modell entwickelt werden, z.B. durch vergrößern des Gitters oder durch Linearisierung oder Entkopplung des betrachteten Systems. Das feine und das grobe Modell können dann mit der entwickelten Implementierung gekoppelt werden und die Space Mapping Methode kann verwendet werden. Falls es möglich ist auf das Problem selbst zuzugreifen und man das adjungierte Problem des groben Modells lösen kann, so hat der Vergleich am 1D Batteriemodell klar den Vorteil dieser Vorgehensweise gezeigt. Allerdings ist hierbei auch der benötigte Arbeitsaufwand höher, da ein tiefergehendes Verständnis der verwendeten Mathematik und der Implementierung benötigt wird. Zusätzlich wurde in diesem AP wie geplant die Dokumentation vervollständigt und die Projektergebnisse für den Abschlussbericht zusammengefasst.

Ermittlung der Mess- und Validierungsdaten

Ziel der Messungen war es, die Basis der Validierung für die Simulationen zu legen. Methodische Herangehensweise:

- Vermessung auf Zellebene: Die Einzelzellen wurden unter definierten elektrischen Lastzyklen vermessen. Hierbei wurden sowohl die elektrischen Parameter wie Zellspannung und Zellstrom, als auch die Oberflächentemperatur erfasst.
- Vermessung auf Modulebene: Nach dem Aufbau von Prototypmodulen wurden diese am Prüfstand vermessen. Hierbei wurde darauf geachtet, dass die thermischen Gegebenheiten im realen Modul bestmöglich abgebildet werden.

Dadurch konnten dem Projekt Messergebnisse zur Verfügung gestellt werden, die die Bedatung der Modelle auf Zellebene ermöglichen. Nachteil der gewählten Messvariante (Vermessung in einer Temperaturkammer, stehende Anordnung) ist die im Modell schlecht abzubildende Wärmeabfuhr. Hierbei entstehen Ungenauigkeiten in der Ermittlung der abgeführten Wärme hin zur Temperaturkammer, welche die thermische Datenbasis zur Modellbedatung direkt beeinflusst.

Die Modulvermessung hatte primär zum Ziel, die Skalierung von der Einzelzelle auf das Modul zu gewährleisten. Durch die 12S2P-Verschaltung ergibt sich ein Mittelwert in der Spannungsantwort, welcher sich gut zur Bedatung der Modelle eignet.

Trotz Diskussionen mit dem Projektteam, welche die Optimierung des Lastzyklus zur Parameteroptimierung zum Ziel hatten, war es bis zum Projektende nicht möglich die fehlenden, nur indirekt oder auch gar nicht messbaren elektrochemischen Parameter zu kompensieren. Die fehlende direkte Parameterermittlung von physikalisch-chemischen Parametern der Zellchemie kann aus heutiger Sicht nicht durch die Messung externer Zellgrößen wie Temperatur, Spannung und Strom kompensiert werden. Hierzu sind parallel Forschungsaktivitäten angestoßen.

Auf Grund der sich ändernden zukünftigen Fahrzeugarchitekturen und die damit einher gehende Auslegung der Batteriegröße/Leistungsfähigkeit werden sich in Zukunft die Lastzyklen für die Batterie ebenfalls verändern. Zwei Tendenzen wurden in Gesamtfahrzeugsimulationen untersucht:

- PHEV: Die Batteriegröße steigt mit einer Verkleinerung der installierten Leistung der Verbrennungskraftmaschine
- Einstiegselektrifizierung/Bordnetzstabilisierung: Die Leistungsanforderungen an die Chemie/Zelle steigt, um trotz Verkleinerung der Batterie grundlegende Fahrfunktionen (reversieren, segeln) abbilden zu können

Für diese Simulationsläufe mussten sowohl die Längsdynamik der Fahrzeuge, sowie Regelstrategien abgebildet werden. Auf dieser Basis wurden die Zellbezogenen Lastzyklen errechnet.

Mathematische Untersuchungen und Support, Umsetzung: UKN

Das Ziel dieser Arbeiten bestand darin, das ViF im Bezug auf Algorithmen für die Lösung des Batteriemodells, die Modellreduktion und die Surrogate Optimierung mittels Space-Mapping zu unterstützen. Hierzu wurden die relevanten Methoden an einem mathematisch gut untersuchten und leichter handhabbaren Batteriemodell, [30], entwickelt. Das gewonnene Know-How wurde an das ViF weitergegeben, um dort auf das komplexere Batteriemodell angewandt zu werden. Da bezüglich der Modellreduktion Ergebnisse aus einem anderen Projekt genutzt werden konnten, [24, 25], war es möglich in dem dadurch entstandenen Freiraum nicht nur das Space-Mapping für das Batteriemodell zu adaptieren, sondern auch die Methode für das Batteriemodell umzusetzen. Die so gewonnenen Erkenntnisse erwiesen sich als sehr wertvoll für die Umsetzung des Space-Mapping für das komplexere Batteriemodell am ViF.

Beschreibung der eventuellen Schwierigkeiten bei Erreichung der geplanten Ziele

Die Validierung an sich stellte sich als deutlich aufwändiger dar, als bei der Planung des Projekts gedacht. Die Parametrierung der nichtlinearen Systeme von partiellen Differentialgleichungen (1D und 3D Batteriemodell) ist hochgradig nichttrivial. Zusätzlich zeigten schwer oder gar nicht messbare Parameter einen großen Einfluss. Die Validierung wurde deswegen in AP 5 zeitlich ausgedehnt und wurde mit den oben beschriebenen nicht ganz befriedigenden Ergebnissen abgeschlossen.

Die Modellreduktion der gekoppelten elektrisch thermischen Simulation mit ANSYS war durch Beschränkungen der verfügbaren Daten nicht mit mathematischen Methoden wie z.B. Balanced Truncation oder Proper Orthogonal Decomposition (POD) möglich. Es wurde eine eigene Methode zur Modellreduktion und Beschleunigung der Simulation entwickelt, die jedoch in Kombination mit mathematischen Methoden noch effizienter gewesen wäre. Die resultierenden Rechenzeiten sind in

einem Bereich, der eine Optimierung für nicht zu große Batterien und Lastzyklen ermöglicht. Für eine industrielle Anwendung ist die Methode damit nur bedingt anwendbar. Da die Modellvalidierung ausgedehnt wurde, war es zusammen mit den erwähnten Rechenzeiten zeitlich nicht möglich eine Optimierung für mehrere Lastzyklen durchzuführen. Die Funktionsweise der Methode wurde an einem exemplarischen Lastzyklus demonstriert.

Beschreibung der „Highlights“ des Projektes

Implementierung und Vergleich zweier Space Mapping Ansätze

Für die Anwendung auch in Verbindung mit kommerziellen FE-Lösern wurde eine Space Mapping Methode entwickelt und implementiert, die nur ein grobes und ein feines Modell des betrachteten Problems benötigt. Das grobe Modell ist sehr viel schneller zu berechnen als das feine, und seine Lösungen erlauben mit der Space Mapping Methode eine deutliche Reduktion der für die Optimierung benötigten Berechnungen mit dem feinen Modell. Falls es möglich ist das zum groben Modell adjungierte Problem zu Lösen, ist in dem Space-Mapping Ansatz eine weitere Beschleunigung der Berechnungen zu erwarten. Dieser Vergleich konnte am 1D Batteriemodell erbracht werden.

Optimierungsprototyp für die elektrisch thermische Batteriesimulation mit ANSYS

Die entwickelte Optimierungsmethode basiert auf dem Space Mapping Ansatz und weist einen breiten Anwendungsbereich auf. Die skriptbasierte Automatisierung des Modellaufbaus ermöglicht die Optimierung der Batteriegeometrie und Kapazität. Weiter Anwendungsfelder wären z.B. die Optimierung der Ableiterfolien (Aluminium bzw. Kupfer) oder die Dicke der aktiven Zwischenschicht. Besonders hervorzuheben ist die Möglichkeit auch Parameter aus dem elektrochemischen (1D) Batteriemodell optimieren zu können, wobei die resultierenden Auswirkungen auf die Batterie (3D) direkt berücksichtigt werden. Alle genannten Optimierungsanwendungen können unter Temperaturnebenbedingungen gelöst werden, so kann eine maximale Temperatur oder ein maximaler Temperaturgradient vorgegeben werden; entweder auf der ganzen Batterie oder auch an einem festgelegten Punkt.

2. Ergebnisse und Schlussfolgerungen

Im Projekt konnten folgende technische Ergebnisse erzielt werden:

- Anfertigung einer Literaturstudie und Analyse der unterschiedlichen Literaturstellen und Modellierungsarten von Batterien
- Festlegung des Batteriemodells, elektrisch und thermische Erweiterung
- Implementierung des Batteriemodells inklusive Kopplung mit FE- Lösern um thermische Effekte optimal abbilden zu können
- Testen der Implementierung
- Adaption des Batteriemodells (Linearisierung) für das Space Mapping
- Implementierung der Surrogate Optimierung mittels Space Mapping Technik getestet
- Optimierungsprototyp für die Kombination Batteriemodell mit FE-Solver getestet
- Planung und Durchführung von Batteriemessungen für die Validierung
- Validierung der Simulation an Messdaten
- Optimierung für exemplarischen Lastzyklus erfolgt
- Definition typischer und möglicher Batterielastzyklen
- Potentialabschätzung für weitere Verwendungsfelder

Schlussfolgerungen:

- Für die Implementierung des thermisch elektrisch gekoppelten Batteriemodells wurde die kommerzielle Software ANSYS verwendet. Hier sind viele Informationen nur schwer oder auch gar nicht zugänglich. Es wurde eine Diplomarbeit betreut, deren Ziel es war ein sehr einfaches Beispiel in dem freien Finite Elemente Löser EleFAnT3D umzusetzen. Hier hat sich

gezeigt, dass eine Ersetzung des kommerziellen FE-Solvers ANSYS durch den freien Löser EleFAnT3D zu einem sehr hohen Arbeitsaufwand geführt hätte, wenn die gleiche Funktionalität erreicht werden sollte. Deswegen wurde entschieden, dass ein Wechsel der Software für das Projekt als nicht zielführend anzusehen war und weiterhin mit ANSYS gearbeitet wurde.

- Am ViF wurde eine Bakk-Arbeit zur Sensitivitätsanalyse des Batteriemodell bezüglich der Modellparameter betreut. Nach erfolgreichem Abschluss dieser Analyse zeigte sich, dass fast alle Parameter eine hohe Sensitivität aufweisen und auch vielfach Interaktionen zwischen den Parametern bestehen. Diese Information ist wichtig für die spätere Validierung des Modells.
- Die Validierung des Modells erwies sich als deutlich aufwändiger als ursprünglich geplant. Sowohl bei der elektrischen als auch der thermischen Validierung konnte in einigen Teilbereichen eine gute Übereinstimmung zwischen Modell und Messung erreicht werden. In anderen Teilbereichen traten Probleme auf, die an unbekannten (und nicht messbaren) Materialparametern und an der mathematischen Komplexität des Optimierungsproblems lagen. Eine noch stärkere Ausdehnung der Arbeiten wurde als nicht zielführend betrachtet.
- Die Surrogate Optimierung mittels Space Mapping erwies sich als sehr geeignet. Für das Batteriemodell konnten mehrere Varianten der Methode verglichen werden. Hierbei zeigte sich, dass eine Kombination mit dem in der Optimierung verbreiteten Trust Region Verfahren sehr vorteilhaft ist. Auch für das thermisch elektrisch gekoppelte Batteriemodell in ANSYS konnte eine Variante des Space Mapping angewandt werden. Hierfür wurden lediglich ein grobes (vereinfachtes) und ein feines (genaues) Modell der Batterie benötigt. Die Optimierungsmethode für die Batterie unter Berücksichtigung elektrischer und thermischer Aspekte funktioniert.

3. Ausblick und Empfehlungen

Im Umfeld der Nutzung von Batterien für Elektro- und Hybridfahrzeuge gibt es vielfältigen Forschungsbedarf. Bei der Parametrierung des Batteriemodells auf einen Batterietyp gibt es wegen der hohen Parameterzahl im Modell noch mehrere offene Fragen. Die Frage welche Parameter in welchem Ausmaß die Modellantwort beeinflussen kann mit der Sensitivitätsanalyse beantwortet werden. So ist es für die Parametrierung wichtig zu untersuchen, ob sich die Sensitivitäten der Parameter beim Vergleich mit verschiedenen Messungen ändern. Falls sich zeigt, dass einige Parameter z.B. nur bei langsamen Prozessen sensitiv sind (also die Modellantwort deutlich beeinflussen), während andere Parameter nur bei schnellen Prozessen sensitiv sind, so könnte die Schätzung dieser Parameter getrennt erfolgen. Dies wäre eine wesentliche Vereinfachung des Optimierungsprozess'. Welche Messdaten überhaupt für die Parametrierung benötigt werden kann mit der Methode der Parameter Subset Selection untersucht werden. Bei einer vorgegebenen Genauigkeit für die Parameterschätzung wird berechnet, welche Parameter sich aus gegebenen Messdaten bestimmen lassen. Die Schwankungen im Produktionsprozess führen bei Messungen von Batterien gleichen Typs zu deutlichen Abweichungen. Die daraus resultierenden Probleme bei der Optimierung lassen sich durch Methoden der robusten Parameterschätzung lösen. Somit ist es möglich einen Parametersatz zu erhalten, der die Bandbreite der Schwankungen der real gefertigten Batterien berücksichtigt.

Ein weiterer Forschungsschwerpunkt betrifft die Alterung von Batterien. Die Alterung ist ein hochkomplexer Vorgang, der die Lebensdauer der Batterie und die Reichweite des Fahrzeugs entscheidend mitbestimmt. Hierbei stellt die Modellierung chemische Vorgänge bei

kalendarischer Alterung, temperaturbedingter Alterung und zyklenbedingter Alterung eine große Herausforderung dar. Es ist zu erwarten, dass die bereits aufwändig zu lösenden elektrochemischen Modelle durch die zusätzlichen Alterungseffekte nochmals an Komplexität gewinnen werden. Für ein optimales Batteriemanagement im Fahrzeug, sowohl elektrisch als auch thermisch, wird die Beschleunigung der Simulation, z.B. durch Methoden der Modellreduktion, eine wesentliche Voraussetzung sein. Eine Minimierung der Alterung bei Batterien für Elektro- und Hybridfahrzeuge wird also nur in Zusammenarbeit von Fachleuten für die chemische Modellierung, effizienter Simulation und optimalem Batteriemanagement gelingen.

4. Literaturverzeichnis

- [1] P. P. Silvester and R. L. Ferrari. Finite elements for electrical engineers. Cambridge University Press, 1983.
- [2] William J. McCalla. Fundamentals of computer-aided circuit simulation. Kluwer Academic Publishers, 1988.
- [3] E. E. Antonova and D. C. Looman. Finite elements for thermoelectric device analysis in ANSYS. In International Conference on Thermoelectrics, 2005.
- [4] M. Koplenig, M.K. Scharrer, B. Suhr, M.Cifrain and T. Heubrandtner, Modeling and Simulation of a Lithium-Ion Cell, Journal Publication planned in 2013
- [5] ANSYS, Inc., ANSYS Mechanical APDL and Mechanical Applications Theory Reference, 2010
- [6] Doyle, M. et al.: „Modeling of Galvanostatic Charge and Discharge of the Lithium/Polymer/Insertion Cell“, Journal of the Electrochemical Society, 140 (7), 1993, 1526-1533
- [7] Newman, J. und Thomas-Alyea, K. E.: „Electrochemical Systems“, John Wiley & Sons, Inc., 2004, 517-527
- [8] Scharrer, M.K.: „A Comparison of Solutions to a PDE based Battery Cell Model with and without Splitting“, Battery Days, Universität Konstanz, 2011, -
- [9] Pichler, F.: „Anwendung der Finite-Elemente Methode auf ein Lithium-Ionen Batterie Modell“, Diplomarbeit an der Karl Franzens Universität Graz, 2011, -
- [10] White, R.E. und Cai, L.: „Mathematical Modeling of a Lithium Ion Battery“, Proceedings of the COMSOL Conference, 2009, -
- [11] Meyer, B.: „Applying 'design by contract'“, Computer (IEEE), 25 (10), 1992, 40-51
- [12] Bandler, J.W. et al.: „Space mapping technique for electromagnetic optimization“, IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques, 42 (12), 1994, 2536-2544
- [13] Bakr M.H. et al.: „An Introduction to the Space Mapping Technique“, Optimization and Engineering, 2 (7), 2001, 369-384
- [14] Søndergaard, J.: „Optimization using surrogate models - by the space mapping technique“, Dissertation an der Technical University of Denmark, 2003, -
- [15] Broyden, C.G.: „A Class of Methods for Solving Nonlinear Simultaneous Equations“, Mathematics of Computation, 19 (92), 1965, 577-593
- [16] Lass, O. et al.: „Space mapping techniques for a structural optimization problem governed by the p-Laplace equation“, Optimization Methods and Software, 26 (4-5), 2011, 617-642
- [17] Scharrer, M.K., Pichler, F., Suhr, B.: „Simulation und Ansätze zur Parameteridentifikation eines 1D elektrochemischen Modells von Lithium-Ionen-Zellen“, NAFEMS deutschsprachige Konferenz, 2012, 106-109
- [18] Scharrer, M.K., Suhr, B., Watzenig, D.: „Surrogate Parameter Optimization based on Space Mapping for Lithium-Ion Cell Models“, 15th Int. IGTE Symposium on Numerical Field Calculation in Electrical Engineering, Proc. of, 2012, 368-373

- [19] Scharrer, M.K., Suhr, B., Watzenig, D.: "A new Space Mapping Parameter Surrogate Optimization for Lithium-Ion Cell Models", 4th International Symposium on Inverse Problems, Design and Optimization, Proc. of, to be published 2013.
- [20] ANSYS, Inc. ANSYS Mechanical APDL Coupled-Field Analysis Guide, 2010
- [21] Anderberg, Michael R., Cluster Analysis for Applications, Academic Press, 1973
- [22] P. Holmes, J.L. Lumley, G. Berkooz, and C.W. Rowley. *Turbulence, Coherent Structures, Dynamical Systems and Symmetry*. Cambridge Monographs on Mechanics, Cambridge University Press, second edition, 2012.
- [23] B. Kaltenbacher, A. Neubauer, and O. Scherzer. *Iterative Regularization Methods for Nonlinear Ill-Posed Problems*. Radon Series on Computational and Applied Mathematics, Vol. 6, 2008.
- [24] O. Lass and S. Volkwein. POD Galerkin schemes for nonlinear elliptic-parabolic systems. To appear in *SIAM Journal on Scientific Computing*, 2013.
- [25] O. Lass. Efficient POD reduced-order modeling for parametrized nonlinear PDE systems. Submitted, 2012.
- [26] R. Mancini and S. Volkwein. A POD based space mapping approach for a nonlinear parameterized elliptic-parabolic system. In preparation, 2013.
- [27] L.N. Vicente. Space mapping: models, sensitivities, and trust-region methods. *Optim. Eng.*, 4:159-175, 2003.
- [28] C.R. Vogel. *Computational Methods for Inverse Problems*. Frontiers in Applied Mathematics, SIAM, Philadelphia, 2002.
- [29] S. Volkwein. *Proper Orthogonal Decomposition: Theory and Reduced-Order Modelling*. Lecture Notes, University of Konstanz, 2012.
- [30] J. Wu, J. Xu, and H. Zou. On the well posedness of mathematical model for lithium-ion battery systems. *Methods and Applications of Analysis*, 13:275-298, 2006.

5. Anhang

Details zur Arbeit an der Universität Konstanz

Das untersuchte Batteriemodell ist sowohl parameter- als auch zeitabhängig und geht auf [30] zurück. Zur Beschreibung der elektrochemischen Eigenschaften in einer Lithium-Ionen Batterie sind drei partielle, nichtlineare Differentialgleichungen Bestandteil des Batteriemodells, aus denen sich die elektrischen Potentiale im Elektrolyten (hier $\hat{p}$ bezeichnet) und in den Elektroden – Anode beziehungsweise Kathode – (hier mit $\hat{q}$ bezeichnet) sowie die Konzentration von Lithium-Ionen (hier mit $\hat{y}$ bezeichnet) berechnen lassen. Mathematisch lassen sich die Gleichungen kompakt in der Form

$$\mathcal{F}(\hat{y}, \hat{p}, \hat{q}; \boldsymbol{\mu}) = 0 \quad (13)$$

schreiben, wobei die Variable $\boldsymbol{\mu}$ für die im Modell vorhandenen und zum Teil nicht bekannten Parameter steht. Wir bezeichnen **(13)** als *feines Modell*. Ziel ist es gewesen, aufgrund von vorgegebenen Daten (zum Beispiel durch Messungen an der Batteriezelle) für die Randwerte eines elektrischen Potentials skalare Parameter im Batteriemodell zu schätzen. Das ist ein inverses Problem [23,28], welches mit Methoden der numerischen Optimierung gelöst werden sollte. Das quadratische Zielfunktional ist von der Bauart

$$J(\hat{y}, \hat{p}, \hat{q}, \hat{\boldsymbol{\mu}}) = \left\| \hat{q}|_{\text{am Rand}} - \text{Messung} \right\|^2 + \mathcal{R}(\hat{\boldsymbol{\mu}})$$

mit einem parameterabhängigen Regularisierungsterm $\mathcal{R}(\boldsymbol{\mu})$. Wir können somit das Parameterschätzproblem wie folgt formulieren:

$$\min J(\hat{y}, \hat{p}, \hat{q}, \hat{\boldsymbol{\mu}}) \quad \text{unter der Nebenbedingung} \quad \mathcal{F}(\hat{y}, \hat{p}, \hat{q}; \boldsymbol{\mu}) = 0. \quad (14)$$

Allerdings ist das vorliegende Batteriemodell sehr komplex (viele Freiheitsgrade, Differentialgleichungen von unterschiedlichen Typen, nichtlineare Kopplungen), so dass wir das Modell in der Optimierung durch ein vereinfachtes System ersetzt haben:

- 1) Die Nichtlinearitäten sind um einen Referenzparameter linearisiert und
- 2) die dann erhaltenen drei linearen partiellen Differentialgleichungen durch ein reduziertes Modell ersetzt worden.

Wir verwenden also statt **(13)** ein vereinfachtes, sogenanntes *grobes Modell*

$$\mathcal{G}(y, p, q; \mu) = 0. \quad (15)$$

Die Modellreduktion ist mit der Methode Proper Orthogonal Decomposition (siehe z.B. in [22, 29]) durchgeführt worden. Hier konnten die Resultate aus [24, 29] verwendet werden. Auf diese Weise sind effiziente reduzierte Modelle **(15)** implementiert worden, deren Lösung um ein Vielfaches (mehr als einhundert Mal) schneller möglich ist im Vergleich zur Lösung des Batteriemodells **(13)** unter Verwendung von Finite-Elemente-Methoden. Natürlich ergeben sich aus dem vereinfachten Modell veränderte Lösungen. Insbesondere stimmen die Randwerte des Potentials, welches für die Parameterschätzung verwendet werden sollte, nicht überein; vergleiche Abbildung 1 (linkes Bild).

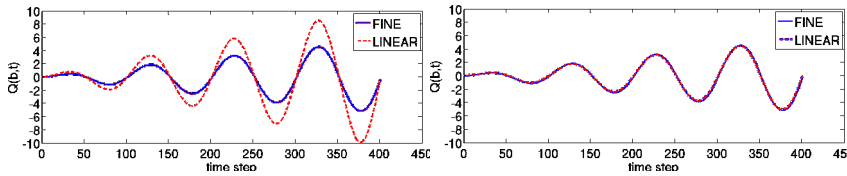


Abbildung 1: Links: $t \mapsto \hat{q}(t)|_{\text{am Rand}}$ und $t \mapsto q(t)|_{\text{am Rand}}$. Hier ist $\hat{q}$ **(13)** und q **(15)** für das gleiche μ . Rechts: beide Abbildungen, wobei nun q als Lösung von **(16)** bestimmt ist.

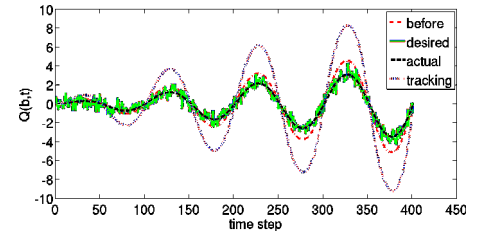


Abbildung 2: Numerisches Ergebnis bei der Lösung von **(17)**.

Damit aber die Parameterschätzung deshalb nicht zu falschen geschätzten Parametern führt, lösen wir nicht

$$\min J(y, p, q, \mu) \quad \text{unter der Nebenbedingung} \quad \mathcal{G}(y, p, q; \mu) = 0$$

sondern es wird eine Space-Mapping-Methode [13, 12, 27] verwendet. Hier werden die Parameter durch eine Space-Mapping $\mathcal{P}$ so modifiziert, dass die Randwerte von q aus Gleichung **(15)** den Randwerten von $\hat{q}$ aus **(13)** möglichst gut entsprechen. Genauer gesagt, anstatt **(15)** lösen wir

$$\mathcal{G}(y, p, q; \mathcal{P}(\mu)) = 0. \quad (16)$$

In Abbildung 1 (rechtes Bild) wird gezeigt, dass nach der Anwendung der Space-Mapping die Lösung q von **(16)** der Lösung $\hat{q}$ von **(13)** am Rand entspricht. Zur Auswertung von $\mathcal{P}$ an einem Parameterwert μ muss ein Optimierungsproblem gelöst werden, was mit einem gradientenähnlichen Verfahren durchgeführt worden ist. Unter Verwendung der Space-Mapping-Methode ist nun Problem **(14)** durch das Optimierungsproblem

$$\min J(y, p, q, \mu) \quad \text{unter der Nebenbedingung} \quad \mathcal{G}(y, p, q; \mathcal{P}(\mu)) = 0 \quad (17)$$

ersetzt worden. In Abbildung 2 haben wir ein numerisches Ergebnis angegeben. Hier stehen unter anderem $-$ für die verrauschte Messung am Rand, $-$ für $q|_{\text{am Rand}}$ ausgewertet am optimalen Parameter und $-$ für $q|_{\text{am Rand}}$ ausgewertet am Parameter, mit dem das Optimierungsverfahren zur Lösung von **(17)** gestartet wird. Weitere numerische Resultate werden derzeit in [26] zusammengestellt.

IMPRESSUM

Verfasser

Kompetenzzentrum - Das virtuelle Fahrzeug
Forschungsgesellschaft mbH (ViF)
Inffeldgasse 21a/1.Stock, 8010 GRAZ
Tel: +43/316/873-9001
Fax: +43/316/873-9002
E-Mail: office@v2c2.at
Web: <http://www.v2c2.at>

Projektpartner

- AVL List GmbH, ÖSTERREICH
- GAIA Akkumulatorenwerke GmbH,
DEUTSCHLAND
- Fachbereich Mathematik und Statistik,
Universität Konstanz, DEUTSCHLAND

Eigentümer, Herausgeber und Medieninhaber

Klima- und Energiefonds
Gumpendorfer Straße 5/22
1060 Wien
E-Mail: office@klimafonds.gv.at
Web: www.klimafonds.gv.at

Disclaimer

Die Autoren tragen die alleinige Verantwortung für den Inhalt dieses Berichts. Er spiegelt nicht notwendigerweise die Meinung des Klima- und Energiefonds wider.

Weder der Klima- und Energiefonds noch die Forschungsförderungsgesellschaft (FFG) sind für die Weiternutzung der hier enthaltenen Informationen verantwortlich.

Gestaltung des Deckblattes

ZS communication + art GmbH