

## BattLab

High performance battery systems driven by polymer science and virtual material engineering

<b>Programm / Ausschreibung</b>	Kooperationsstrukturen, Kooperationsstrukturen, COMET Module Ausschreibung 2022	<b>Status</b>	laufend
<b>Projektstart</b>	01.01.2024	<b>Projektende</b>	31.12.2027
<b>Zeitraum</b>	2024 - 2027	<b>Projektlaufzeit</b>	48 Monate
<b>Keywords</b>	batteries, degradation, functional polymers, material modelling, simulation		

### Projektbeschreibung

Das COMET-Modul BattLab kombiniert die Methoden aus der Multiphysik Werkstoffsimulation mit den Grundlagen der Polymerwissenschaft, um die Basis für die Hochleistungsbatteriesysteme der Zukunft zu schaffen. Im Kontext des aktuellen Klimawandels wurde die Batterieforschung als wichtige Voraussetzung für den Übergang zu einer kohlenstoffneutralen Gesellschaft identifiziert. Batterien ermöglichen die Elektromobilität und fördern eine stärkere Durchdringung der erneuerbaren Energien. Batterien sind jedoch komplexe Multimaterialsysteme, und die Fortschritte in der Forschung halten derzeit nicht mit den hohen Anforderungen an Leistungsdichte und Sicherheit Schritt.

Die derzeitigen Fortschritte bei der Untersuchung einzelner Komponenten eines komplexen Multimaterialsystems sind limitiert, da das resultierende Systemverhalten nicht abgeschätzt werden kann. Die Ergebnisse der Systemsimulation sind oft zu stark vereinfacht und berücksichtigen keine lokalen Effekte. Beabsichtigte Verbesserungen können daher unerwartet eine negative Wechselwirkung mit anderen Systemkomponenten haben, die sich erst bei der Qualifizierung oder, noch schlimmer, im Betrieb zeigt.

Battlab wird daher die Entwicklung neuer Batteriegenerationen durch einen virtuellen Ansatz vorantreiben, der basierend auf den Polymerwissenschaften eine tiefgreifende Systemphysik auf mehreren Maßstabsebenen berücksichtigt. BattLab wird eine effiziente Methode zur Vorhersage des Einflusses einzelner Anpassungen auf das Gesamtsystemverhalten einführen, indem ein globales Modell mit detaillierten lokalen Modellen in vollem Umfang automatisiert gekoppelt wird. Die Herausforderungen bei der Umsetzung liegen einerseits in der für den Ansatz erforderlichen Multidisziplinarität (Chemie, Elektrochemie, Materialphysik, konstitutive Modellierung, numerische Algorithmen, maschinelles Lernen usw.) und andererseits in der Relevanz und den Auswirkungen kleiner Variationen auf der Mikroebene.

Der BattLab-Ansatz verfolgt drei übergeordnete Ziele: (i) Funktionelle polymere Materialien, die ein neues Sicherheitsniveau für Batteriesysteme einführen, (ii) Identifizierung und Modellierung von Degradation auf Batteriezellenebene, (iii) Ein virtuelles Material- und Designbewertungstool mit einer vollumfänglichen Verknüpfung des globalen Modells mit lokalen Auswertungen. Dementsprechend werden drei Teilprojekte definiert, die eng miteinander verknüpft sind, da einerseits die virtuelle Vorhersage die Grundlage für die maßgeschneiderte Materialentwicklung bildet und andererseits das gemessene Materialverhalten die Basis für die Kalibrierung der konstitutiven Materialmodelle darstellt. Darüber hinaus bildet die Simulation auf lokaler Ebene die Grundlage für homogenisierte Simulationen auf globaler Ebene und für das Training eines

auf einem neuronalen Netz basierenden lokalen Metamodells. Diese lokalen Metamodelle wiederum erlauben die vollumfängliche detaillierte Bewertung der globalen Simulationsergebnisse.

Ausgewählte Beispiele für potenzielle Innovationen, die durch BattLab-Ergebnisse initiiert werden sind u. a.: (i) neue effiziente Systeme zur Überwachung der Batteriesicherheit auf der Grundlage funktioneller Polymerbeschichtungen, die Tracer-Moleküle freisetzen, (ii) funktionelle temperatur- und druckgesteuerte Verbundwerkstoffe zur thermischen Isolierung von Zellen, (iii) genaue und effizient kalibrierte Simulationsmodelle für den "Gesundheitszustand" von Batterien, die eine zirkuläre Batteriewirtschaft ermöglichen, indem sie Daten für ein zweites Leben und Recyclingstrategien liefern, (iv) ein Optimierungswerkzeug für die Zelldegradation auf der Grundlage parametrisierter Vorhersagemodelle und (v) ein Simulationsansatz, der das globale Verhalten komplexer Multimaterialsysteme mit kritischen lokalen Fehlern verbindet. Der geplante BattLab-Ansatz wird neue Batterietechnologiekonzepte ermöglichen und als virtuelles Labor zur Beschleunigung der Entwicklung von Batteriematerialien und -designs dienen.

## **Abstract**

The COMET Module BattLab combines multi-physics virtual material engineering and fundamental polymer science to pave the way towards safe high-performance battery systems of the future. In the context of the current climate change, battery research has been identified as an important prerequisite for the transition to a carbon neutral society. Batteries enable electromobility and greater penetration of renewable energy technologies through stationary energy storage. However, batteries are complex multi-material systems and advances in research are currently not keeping pace with the demands for high power densities and safety requirements.

Current progress in the study of individual components of a complex multi-material system is severely limited by the fact that the resulting system behavior cannot be predicted accurately. System simulation results are often oversimplified and do not account for local effects. Intended improvements on design and material level may therefore unexpectedly have a negative interaction with other system components, which only becomes apparent during qualification or, even worse, during operation.

Battlab will thus drive the development of new battery generations by adopting a virtual engineering approach that leverages polymer science and considers the in-depth system physics on multiple scale levels. BattLab will introduce an efficient method to predict the influence of individual adaptations on the overall system behavior by a full-scale automated coupling of a global model with detailed local models. The challenges to implementation are, on the one hand, the required multi-disciplinarity for the approach (chemistry, electro-chemistry, material physics, constitutive modeling, numerical algorithms, machine learning, etc.), and, on the other hand, the relevance and effects of minor variations at micro-scale. According to the project requirements, an excellent consortium with all the necessary competences has been defined, ready to face the challenges.

The BattLab approach consists of three major pillars which are consistent with the overall goals: (i) functional polymeric materials introducing a new level of safety for battery systems (ii) identification and modeling of degradation on battery cell level (iii) a virtual material and design assessment tool with a full scale global-to-local link. Accordingly, three subprojects are defined, which will be strongly interconnected, as virtual prediction will be a basis for the tailored material development on the one hand, and the measured material performance will be the basis for the calibration of the constitutive material models on the other hand. In addition, simulation at the local level will provide the foundation for homogenized simulations at the global level and for training a neural network based local metamodel. These local metamodels will in turn provide the link between the global system and a full-scale local assessment.

Selected examples for potential innovations initiated by BattLab results include: (i) new efficient battery safety monitoring

systems based on functional polymer coatings releasing tracer molecules, (ii) functional temperature and pressure triggered cell-to-cell thermal insulation composites, (iii) accurate and efficiently calibrated battery 'State of Health' simulation models enabling a circular battery economy by providing data for a second life and recycling strategies, (iv) an optimization tool for the cell degradation based on parametrized predictive models that allow screening of a vast design space, and (v) a simulation approach linking the global behavior of complex multi-material systems with critical local failures.

The planned BattLab approach will enable new battery technology concepts and will serve as a Battery Material and Design Development Acceleration Laboratory.

### **Projektkoordinator**

- Polymer Competence Center Leoben GmbH

### **Projektpartner**

- 4a engineering GmbH
- AVL List GmbH
- ISOVOLTA AG
- Resch Holding GmbH
- hofer powertrain GmbH
- Virtual Vehicle Research GmbH
- Budapest University of Technology and Economics
- AIT Austrian Institute of Technology GmbH
- FUNDACIÓN CIDETEC
- Montanuniversität Leoben