

## STAR

Simulation based digital twin approach for battery recycling

<b>Programm / Ausschreibung</b>	Expedition Zukunft, Expedition Zukunft 2022, Expedition Zukunft Start 2022	<b>Status</b>	laufend
<b>Projektstart</b>	01.10.2024	<b>Projektende</b>	30.09.2025
<b>Zeitraum</b>	2024 - 2025	<b>Projektlaufzeit</b>	12 Monate
<b>Keywords</b>	Lithium-Ionen-Batterien, Recycling, Digital Twin, Verdampfung, Elektrolytflüssigkeit		

### Projektbeschreibung

Der Übergang zu erneuerbaren Energien ist notwendig, um die Auswirkungen des Klimawandels zu stoppen. Lithium-Ionen-Batterien (LIB) sind eine der vielversprechendsten Technologien. Die ProtectLiB GmbH (PLIB) verfolgt dabei den Ansatz einer teil-dezentralisierten Aufbereitung und beginnt mit der Wiederverwertung beim Kunden vor Ort. Dies bietet einerseits den Vorteil, dass Kunden ihre Lagerkapazitäten und die davon ausgehende Brandgefahr minimieren können und PLIB sich aufwändige ADR-Transporte spart, denn das Material stellt nach der Verarbeitung keine Gefahr für Mensch und Umwelt mehr dar, wodurch sich auch die Arbeitssicherheit drastisch verbessert.

Im Zuge des Projekts erarbeitet PLIB ein Optimierungstool, um einen Teil (das thermische Nachbehandeln) des Prozesses zu digitalisieren. Dies erlaubt einerseits die Optimierung hinsichtlich Nachhaltigkeit und Wirtschaftlichkeit und ermöglicht die Berücksichtigung von entstehenden PFAS-Verbindungen. Das auf Messdaten und Simulationen basierende Optimierungstool legt den Grundstein, um im Anschluss einen Digital Twin für den Prozess zu erstellen.

ProtectLiB GmbH leitet das Projekt und konzentriert sich auf die Optimierung des Recyclingprozesses. Dabei verfolgt das Projekt den Cooper Stage-Gate Ansatz. Für die technische Umsetzung werden folgende fünf Punkte definiert:

**Bestimmen von Verdampfungskurven:** Das Forschungsunternehmen Virtual Vehicle Research GmbH übernimmt die Messungen in einer eigens konstruierten Messkammer. Es kann auch über optische und spektroskopische Methoden die Gaswolke visualisiert und die Konzentration der Verdampfungsprodukte in der Kammer bestimmt werden.

**Bestimmen von freiwerdendem Fluorid:** Die zu variierenden Temperaturen und Drücke stimmen mit den definierten Werten aus den Messungen zu den Verdampfungskurven überein. Der Versuchsaufbau beinhaltet dabei einen Vakuumtrockenschrank, in dem die Elektrolytflüssigkeit aus den Zellen verdampft wird und anschließend kondensiert, aufgefangen und gesammelt wird. Thermische Versuche zeigen auf, dass bei Temperaturbehandlung der Zellen HF entsteht, welches als freies Fluorid detektierbar ist.

**Vereinfachtes Wärmeübertragungsmodell:** Um aufwändige Simulation zu vermeiden, werden Partikel als vereinfachte Objekte approximiert, um schnellrechnende Modelle zu erhalten, welche in einer Simulationsdatenbank gesammelt werden, um Messdaten und Simulationen sinnvoll in ein Optimierungstool zu verbinden.

**Optimierungstool - Digital Twin:** Ein aus den vorangegangenen Ergebnissen abgeleitetes Modell erlaubt eine Optimierung von Prozessparametern, um Lösungsmittel optimal verdampfen zu können, unter Berücksichtigung von entstehenden

Fluoriden und Energien.

Prototyp zum Verdampfen von Elektrolyten: Damit der Recyclingprozess von PLIB weiter verbessert und nachhaltiger gestalten werden kann, wird ein Prototyp zum Verdampfen von Elektrolytflüssigkeit auf Basis der vorangegangenen Ergebnisse zur ständigen Verbesserung des Digital Twins gebaut.

Nach Projektende und der Erprobung des Prototyps zum Verdampfen und Kondensieren von Elektrolytflüssigkeit im Batterierecycling, plant PLIB diesen Prototyp in ihre Prototypenanlage auf der Uni Graz (Lechgasse 42, 8010 Graz) zu implementieren und zu optimieren. Darüber hinaus wird die Simulationsdatenbank weiter befüllt. Weiters ist eine Adaption des Prototyps notwendig, um den erwähnten Vorbehandlungsschritt (Patent in Anmeldung) mit dem thermischen Nachbehandeln zu verknüpfen.

## **Abstract**

The transition to renewable energies is necessary to stop the effects of climate change. Lithium-ion batteries (LIB) are one of the most promising technologies (next to e.g. fuel cells) for the transition to a sustainable society. LIBs at the end of their life cycle represent valuable secondary materials, as battery waste will increase by 25% annually until 2040, resulting in up to 20,500 kilotons.

PLIB pursues the approach of partially decentralized processing and starts with recycling at the customer's site. This offers the advantage that customers can minimize their storage capacities and the resulting fire hazard. PLIB saves on costly ADR transports, as the material no longer poses a risk to people and the environment after processing, drastically improving occupational safety.

As part of the project, PLIB is developing an optimization tool to digitalize part of the process (thermal post-treatment). On the one hand, this allows optimization in terms of sustainability and cost-effectiveness and, on the other hand, makes it possible to consider any PFAS compounds that arise. The optimization tool, based on measurement data and simulations, lays the foundation for creating a digital twin for the process.

ProtectLiB GmbH is leading the project and is focusing on optimizing the recycling process. The project follows the Cooper Stage-Gate approach. The following five points are defined for the technical implementation:

Determination of evaporation curves: the research company Virtual Vehicle Research GmbH is taking over the measurements in a specially constructed measuring chamber. Optical and spectroscopic methods can also be used to visualize the gas cloud and determine the concentration of evaporation products in the chamber.

Determination of released fluoride: The temperatures and pressures to be varied correspond to the defined values from the measurements on the evaporation curves. The experimental set-up includes a vacuum drying oven in which the electrolyte liquid is evaporated from the cells and then condensed, collected and collected. Thermal experiments show that when the cells are temperature treated, HF is produced, which can be detected as free fluoride.

Simplified heat transfer model: Particles are approximated as simplified objects to avoid complex simulations. Considering physical variables such as the electrolyte's evaporation enthalpy, fast-calculating models are collected meaningfully in a simulation database to combine measurement data and simulations in an optimization tool.

Optimization tool - Digital Twin: A model derived from the previous results allows process parameters to be optimized to evaporate solvents optimally, considering the fluorides and energies produced.

Prototype for the evaporation of electrolytes: To further improve the recycling process of PLIB and make it more sustainable, a prototype for the evaporation of electrolyte liquid is being built based on the previous results for the continuous improvement of the digital twin.

After the end of the project and the testing of the prototype for the evaporation and condensation of electrolyte liquid in

battery recycling, PLIB plans to implement and optimize this prototype in its prototype plant at the University of Graz. In addition, the simulation database will be further populated. Furthermore, an adaptation of the prototype is necessary to link the mentioned pre-treatment step (patent pending) with the thermal post-treatment.

## **Endberichtkurzfassung**

Im Rahmen dieses Projekts wurde eine Prozesskomponente für das Recycling von Lithium-Ionen-Batterien entwickelt, die die effiziente Verdampfung und Rückgewinnung von Elektrolyten ermöglicht. Zentraler Bestandteil ist ein beheizter Vakuumkessel, in dem flüssige Elektrolyte unter reduzierten Druckbedingungen verdampft werden, sowie eine nachgeschaltete Kühlstrecke, in der die gasförmige Phase kondensiert und gesammelt wird. Um die physikalischen Prozesse zu verstehen und zu optimieren, wurden experimentelle Messungen der Verdampfungskurven durchgeführt, die die Abhängigkeit von Temperatur, Filmhöhe und Druck aufzeigen. Parallel dazu wurde ein Simulationsmodell erstellt, das den Phasenwechsel im Kessel sowie die Kondensation in den Rohren abbildet. Die Kalibrierung des digitalen Zwillings anhand experimenteller Daten ermöglichte präzise Vorhersagen von Verdampfungsraten, Temperaturprofilen und Massenflüssen. Durch die Optimierung der Heiz- und Kühlparameter konnte die Effizienz der Elektrolytrückgewinnung von anfänglich 20% auf über 90% gesteigert werden. HF-beständige Materialien und kontinuierliche Überwachung gewährleisteten die Prozesssicherheit. Die entwickelte Prozesskomponente bietet damit eine robuste, skalierbare und sichere Grundlage für die Integration in zukünftige Recyclinganlagen und demonstriert die Machbarkeit energieeffizienter und kontrollierter Verdampfungs- und Kondensationsprozesse.

## **Projektpartner**

- ProtectLiB GmbH