



1

BATTERIESIMULATIONSTOOL BEST – NEUE EFFIZIENTE LÖSER UND INTEGRATION IN GeoDict

1 Mit *BESTmicroFFT* simulierte Lithium-Ionen-Konzentration (molcm^3), hydrostatische Dehnung und von-Mises-Dehnung für eine realistische, stochastisch erzeugte Elektrodenstruktur
(Strukturzeugung: Institut für Stochastik, Universität Ulm)

Der Bereich der Elektromobilität stellt an den Energiespeicher – hauptsächlich Lithium-Ionen-Batterien – hohe Anforderungen. Computersimulationen helfen, die Performance möglicher neuer Batteriezellen zu beurteilen, die mikroskopischen Ursachen besser zu verstehen und das Design zu optimieren. Am ITWM starteten wir daher vor einigen Jahren die Entwicklung des Battery and Electrochemistry Simulation Tools BEST, das in öffentlichen und industriellen Projekten kontinuierlich weiterentwickelt wird.

Interessante Fragestellungen reichen dabei von Designfragen auf der makroskopischen Batteriezellskala (BESTmeso) bis hin zum Einfluss der mikroskopischen Gestalt der Elektroden (BESTmicro) auf die elektrischen, thermischen und mechanischen Eigenschaften der Zelle. Dieser Mehrskaligkeit trägt die Software mit ihren unterschiedlichen Modulen BESTmeso und BESTmicro Rechnung.

BESTmicroFFT reduziert Rechen- und Speicheraufwand

Simulationen, die die dreidimensionale Mikrostruktur der Elektroden berücksichtigen, sind wegen der notwendigen feinen räumlichen Diskretisierung aufwändig. Sie nehmen mit BESTmicro auf gängigen Workstations zum Teil einige Tage Rechenzeit in Anspruch. Abhilfe schafft in vielen Standardfällen nun das neuentwickelte Modul BESTmicroFFT. Dieser neue Löser basiert ähnlich wie der ITWM-Mechaniklöser FeelMath auf einer Fouriermethode (FFT) und ist mit deutlich reduziertem Rechen- und Speicheraufwand zur Simulation im Einsatz. Je nach Anforderungen entscheiden die User nun zwischen den beiden Micro-Lösern.

BatteryDict als neues GeoDict-Modul

Die Löser BESTmicro und BESTmicroFFT sind voll kompatibel mit den Strukturgeneratoren der Software GeoDict der Math2Market GmbH. Seit dem letzten Jahr haben wir die Zusammenarbeit mit M2M auch im Bereich der Batteriesimulation verstärkt und gemeinsam das neue GeoDict-Modul »BatteryDict« entwickelt. Es ist seit der Version GeoDict2018 kommerziell verfügbar und bietet BESTmicroFFT-basierte Batteriesimulationen in einem voll in GeoDict integrierten Workflow. Mit der neuen Version GeoDict2019 wurden die Modelle erweitert, sodass Elektroden aus verschiedenen Aktivmaterialien (electrode blends) und mit zusätzlichen Materialklassen (z. B. Leitadditive) abgebildet werden.