

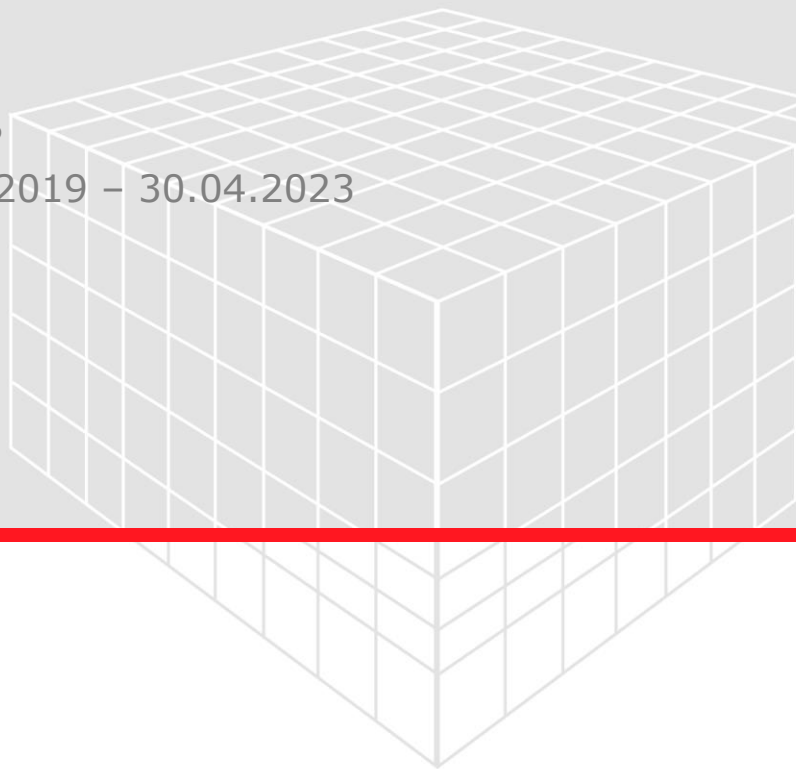
## KURZBERICHT

struktur.e

Förderkennzeichen: 03ETE018B

Laufzeit des Vorhabens: 01.05.2019 – 30.04.2023

20. Oktober 2023





# 1. AUFGABENSTELLUNG

Die hauptsächlichen Ergebnisse der Math2Market GmbH wurden in Arbeitspaket 2 „Computergestützte Zellentwicklung und Bewertung“ erzielt. Ziel des Arbeitspaketes war die simulationsgestützte Untersuchung und Optimierung von hochkapazitiven Elektroden und Batteriezellen hinsichtlich Leistung und Zyklenstabilität. Die kommerziellen Softwarepakete GeoDict (Strukturgenerierung – M2M) und BEST (elektrochemische Simulation – ITWM / DLR) werden von den Antragsstellern entwickelt und bieten in Kombination die Möglichkeit der Evaluierung verschiedener homogener Elektrodenstrukturen hinsichtlich ihrer Leistung in einer virtuellen Batteriezelle.

In AP2.1 „Zelldegradation: Physikalische Modellierung und Simulationsentwicklung“ wurden von den Partnern DLR und ITWM Modelle zur Beschreibung des Degradationsverhaltens durch Li-Plating und SEI-Wachstum modelliert und implementiert.

In AP2.2 „Strukturmodellierung & -charakterisierung“ wurden von der Math2Market GmbH flexible und effiziente Strukturgeneratoren zur Realisierung von strukturierten Elektrodenkonzepten implementiert.

Auf dieser Basis konnten die Anwender in der Industrie (VW / SGL) Simulationen homogener Elektroden und einfacher Strukturierungskonzepte unter Verwendung verschiedener Aktivmaterialien durchführen (AP2.3 „Simulation und Optimierung der Elektrodenleistung und des Alterungsverhaltens“). Die Ergebnisse aus AP2.1 und AP2.2 ermöglichten die Entwicklung und Optimierung neuartiger, strukturierter Elektrodenkonzepte in Hinblick auf Leistung und Lebensdauer.

# 2. VORAUSSETZUNGEN UNTER DENEN DAS VORHABEN DURCHGEFÜHRT WURDE

Das Projekt wurde bei der Math2Market GmbH im Zeitraum vom 01.05.2019 bis zum 30.04.2023 durchgeführt. Dabei waren mehrere Mitarbeitende direkt an der Projektumsatz beteiligt: Dr. Mathias Fingerle leitete das Projekt und entwickelte so genannte GeoApps zur Erstellung der Digitalen Zwillinge der Batterie Elektroden. Janine Hilden und Dr. Anja Streit führten die Bildverarbeitung und Segmentierung der  $\mu$ CT Scans der hergestellten Batterie Elektroden durch. Dr. Ilona Glatt unterstützte Dr. Mathias Fingerle bei der Entwicklung der GeoApps. Dr. Fabian Biebl und Dr. Rolf Westerteiger implementierten Verbesserungen in die Software GeoDict. Dr. Sven Linden implementierte ein numerisches Lösungsverfahren, um die anisotrope Diffusion in Graphit Anoden darstellen zu können. Dr. Roman Buchheit validierte die Digitalen Zwillinge der Elektroden. Um die benötigten Rechenkapazitäten bereit zu stellen, wurde die Infrastruktur der Math2Market genutzt. Die  $\mu$ CT Scans der Elektroden wurden beim externen Dienstleister RJL Micro & Analytics beauftragt. Es entstand eine gemeinsame Publikation mit der Hochschule Aalen.

# 3. PLANUNG UND ABLAUF DES VORHABENS

Die auf ursprünglich 36 Monate geplante Laufzeit des Projektes wurde in Abstimmung mit den Projektpartnern um 6 Monate verlängert. Die Bearbeitung des Vorhabens erfolgte ohne Unterbrechung und größere Wechsel in der personellen Kapazität. Die im Balkenplan vorgegebenen Fristen und Zielstellungen wurden realisiert.

## 4. WISSENSCHAFTLICHER UND TECHNISCHER STAND

Die Software GeoDict – Das Digitale Materiallabor wurde am Fraunhofer ITWM entwickelt. 2011 gründete sich die Math2Market GmbH aus, die seither GeoDict weiterentwickelt und vertreibt. Im Jahr 2023 zählt die Math2Market ca. 60 Köpfe und das fachliche Wissen konnte bisher fast ausnahmslos in der Firma gehalten werden. Seit ca. 2016 ist die M2M im Bereich Batterien tätig und entwickelt seitdem eigenständige Lösungen für diesen Markt. Hierzu wurde unter anderem der numerische Löser BESTmicro des Fraunhofer ITWM in die Software implementiert, der den elektrochemischen Ladevorgang einer Batterie simuliert. Seit 2019 entwickelt die M2M einen eigenen numerischen Löser, der im Vergleich zum BESTmicro schneller und speichereffizienter arbeitet. Als kommerzielles Produkt ist der Workflow, wie er im Projekt beschrieben wurde, weltweit einzigartig. Es gibt keine Software am Markt, die sowohl die Bildverarbeitung als auch die geometrische Analyse, das Modellieren sowie numerische Simulation erlaubt. Durch die im Projekt erzielten Ergebnisse konnten auch KI-gestützte Verfahren speziell für Batterien implementiert werden, die als kommerzielles Produkt einzigartig sind.

## 5. ZUSAMMENARBEIT MIT ANDEREN STELLEN

Innerhalb des Projektes wurde mit allen Projektpartnern zusammengearbeitet, insbesondere mit Volkswagen (später PowerCo), DLR, HSAA, ITWM und SGL Carbon. Die im Projekt nötigen  $\mu$ CT Scans wurden von dem externen Dienstleister RJL Micro & Analytics durchgeführt. Es besteht weiterhin eine enge Kooperation mit dem Fraunhofer ITWM, um die Technologie des BESTmicro weiterzuentwickeln.

## UNTERSCHRIFTEN

---

Dr. Mathias Fingerle, Projektleiter  
Math2Market GmbH

---

Dr. Jürgen Becker, Prokurist  
Math2Market GmbH

Math2Market GmbH  
Richard-Wagner-Str. 1  
67655 Kaiserslautern, Germany  
Web: [www.math2market.de](http://www.math2market.de)

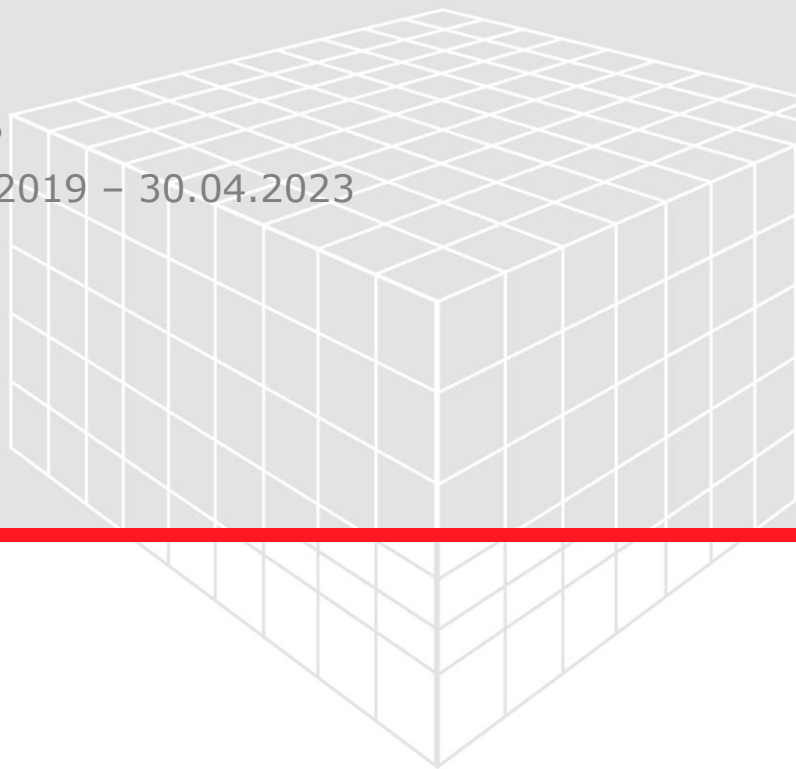
## SACHBERICHT

Structur.e

Förderkennzeichen: 03ETE018B

Laufzeit des Vorhabens: 01.05.2019 – 30.04.2023

20. Oktober 2023

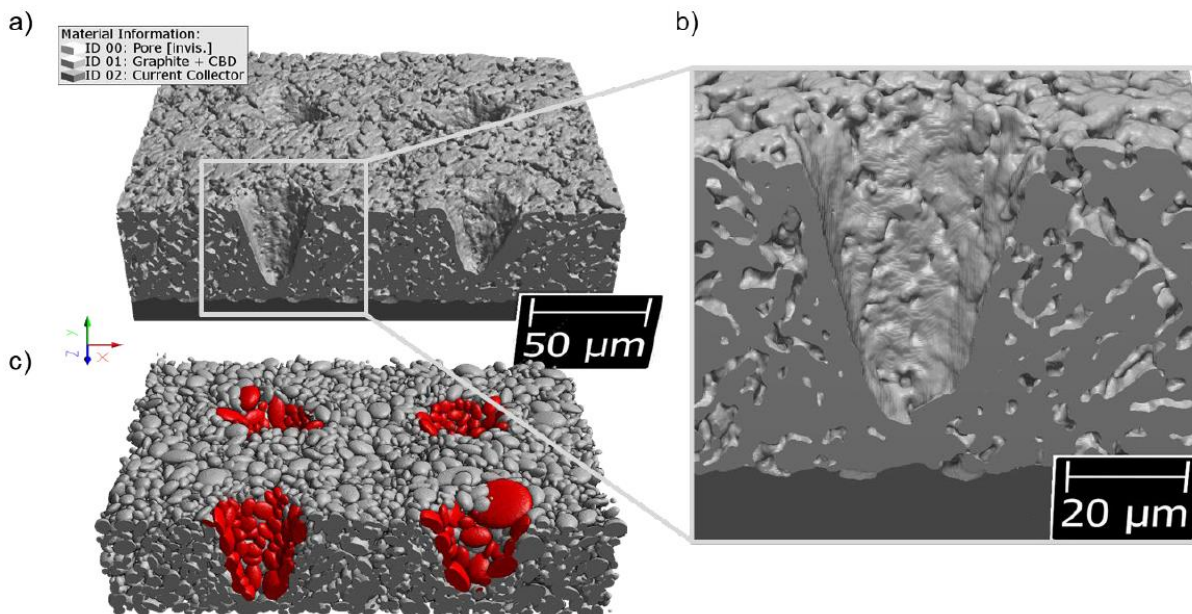




## KURZZUSAMMENFASSUNG

Die Math2Market GmbH entwickelte in Arbeitspaket AP2 („Computergestützte Zellentwicklung und Bewertung“) im Teilarbeitspaket AP2.2 („Strukturmodellierung & -charakterisierung“) Verfahren zur digitalen Modellierung der im Projekt untersuchten Mikrostrukturierungsverfahren an NMC Kathoden und Graphit Anoden. Dabei wurde der Meilenstein MS 2.2 „Strukturmodelle für laserstrukturierte, mechanisch strukturierte oder gradierte Elektroden wurden erstellt“ erreicht. Durch Auslieferung von so genannten GeoApps für die Software GeoDict – Das Digitale Materiallabor an die Projektpartnern war es in AP2 möglich, digitale Modelle zu erstellen, um die Mikrostrukturierungsverfahren digital zu testen und zu optimieren. Ziel des Arbeitspaketes AP2 war die simulationsgestützte Untersuchung und Optimierung von hochkapazitiven Elektroden und Batteriezellen hinsichtlich Leistung und Zyklenstabilität. Um aussagekräftige Simulationen zu ermöglichen, wurde ein numerisches Lösungsverfahren implementiert, um die anisotrope Diffusion in Graphit Anoden zu simulieren. Zusammen mit den Projektpartnern wurden umfangreiche Parameterstudien durchgeführt, um den Projektpartnern für die weiteren Arbeitspakete Empfehlungen für die Umsetzung der Pilotproduktion zu geben.

Um die GeoApps zu entwickeln, wurden zunächst 3D  $\mu$ CT Scans der, von den Projektpartnern hergestellten Modellelektroden in die Software GeoDict importiert, um diese zu analysieren. Hierzu waren unter anderem Verbesserungen in der Bildverarbeitung sowie KI-gestützten Analyse der Bilddaten notwendig, die in die Software GeoDict implementiert wurden. Danach konnten die so genannten Digitalen Zwillinge erfolgreich validiert werden, so dass sie in allen wesentlichen geometrischen und physikalischen Eigenschaften den Originalen entsprechen. Der Nutzen von GeoDict in der Digitalen Materialentwicklung im Bereich Batterien konnte in einer gemeinsamen Publikation mit der Hochschule Aalen demonstriert werden (<https://doi.org/10.1016/j.est.2023.107359>). In Abbildung 1 ist die Analyse des importierten 3D  $\mu$ CT Scans einer mikrostrukturierten Graphit Anode gezeigt.



**Abbildung 1:** a) Visualisierung der Mikrostruktur einer mikrogeprägten Graphitanode, segmentiert aus dem NanoCT-Scan. Der Scan wurde in drei Bestandteile segmentiert: 1) Pore, 2) Graphit und die Carbon Black & Binder Domain (CBD) und 3) Stromkollektor. b) Zoom in den markierten Bereich in a), um das mikrogeprägte Loch detaillierter darzustellen. c) Elliptische Fits der identifizierten Graphitpartikel im Scan. Zur Visualisierung werden alle Partikel in unmittelbarer Nähe der Prägelöcher rot hervorgehoben.



# VERWENDUNG DER ZUWENDUNG UND DES ERZIELTEN ERGEBNISSES IM EINZELNEN, MIT GEGENÜBERSTELLUNG DER VORGEGEBENEN ZIELE

## AUFGABENBESCHREIBUNG

Die hauptsächlichen Ergebnisse der Math2Market GmbH wurden in Arbeitspaket 2 „Computergestützte Zellentwicklung und Bewertung“ erzielt. Ziel des Arbeitspaketes war die simulationsgestützte Untersuchung und Optimierung von hochkapazitiven Elektroden und Batteriezellen hinsichtlich Leistung und Zyklenstabilität. Die kommerziellen Softwarepakete GeoDict (Strukturgenerierung – M2M) und BEST (elektrochemische Simulation – ITWM / DLR) werden von den Antragsstellern entwickelt und bieten in Kombination die Möglichkeit der Evaluierung verschiedener homogener Elektrodenstrukturen hinsichtlich ihrer Leistung in einer virtuellen Batteriezelle.

In AP2.1 „Zelldegradation: Physikalische Modellierung und Simulationsentwicklung“ wurden von den Partnern DLR und ITWM Modelle zur Beschreibung des Degradationsverhaltens durch Li-Plating und SEI-Wachstum modelliert und implementiert.

In AP2.2 „Strukturmodellierung & -charakterisierung“ wurden von der Math2Market GmbH flexible und effiziente Strukturgeneratoren zur Realisierung von strukturierten Elektrodenkonzepten implementiert.

Auf dieser Basis konnten die Anwender in der Industrie (VW / SGL) Simulationen homogener Elektroden und einfacher Strukturierungskonzepte unter Verwendung verschiedener Aktivmaterialien durchführen (AP2.3 „Simulation und Optimierung der Elektrodenleistung und des Alterungsverhaltens“). Die Ergebnisse aus AP2.1 und AP2.2 ermöglichten die Optimierung und Entwicklung neuer strukturierter Elektrodenkonzepte hinsichtlich Leistung und Lebensdauer.

## ABSTIMMUNG MIT DEN PROJEKTPARTNER BEZÜGLICH MODELLSYSTEM

**Projektmonate 1 – 6:** In den ersten 6 Monaten des Projektes haben die Projektpartner die Anforderungen an das Referenzsystem aus Sicht der Simulation besprochen. Für die Math2Market GmbH waren Dr. Mathias Fingerle, Dr. Ilona Glatt und Dr. Fabian Biebl an diesen Gesprächen beteiligt. Sowohl das Elektrolytsystem als auch der Separator sollen so gewählt werden, dass die beschreibenden Parameter möglichst bekannt sind. Der Meilenstein MS 1.1 „Die Anforderungen sind definiert und stehen den Projektpartnern zur Verfügung“ wurde erfüllt.

Außerdem haben sich die Projektpartner auf eine Zusammensetzung der Referenzelektrode geeinigt. Durch die Fokussierung des Projektes auf die Anode wurde bei der Kathode auf ein bekanntes und weitentwickeltes NMC622 Material gesetzt. NMC622 wird derzeit in einem Großteil der aktuellen Zellgenerationen verwendet. Als Anodenmaterial wurde ein Graphit des Verbundpartners SGL Carbon verwendet, der einen guten Kompromiss zwischen Schnellladefähigkeit und Energiedichte darstellt. Bei der Materialauswahl wurde auf eine Balance zwischen einer kleinen Partikeloberfläche bei gleichzeitig geringer Diffusionslängen geachtet. Kleine Partikeldurchmesser bedeuten einen hohen initialen Lithiumverlust durch die

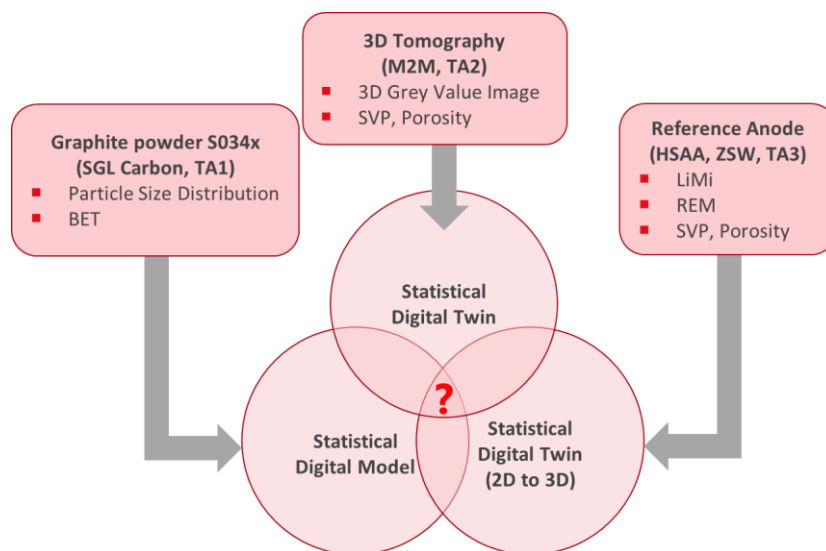
SEI-Bildung auf der Oberfläche. Gleichzeitig wird die Diffusionslänge innerhalb des Graphits verkürzt und dadurch die Schnellladefähigkeit erhöht.

## AP2.2 STRUKTURMODELLIERUNG & -CHARAKTERISIERUNG

Im zweiten Halbjahr des ersten Projektjahres wurden die Arbeiten an AP2.2 begonnen. Das Ziel des Arbeitspaktes 2.2 war es, digitale 3D Modelle (Statistische Digitale Zwillinge) der Elektroden zur Verfügung zu stellen, um einen digitalen Prototyp einer verbesserten Folgegeneration zu entwickeln. Sowohl die Referenzelektroden als auch die modifizierten Referenzzellen sollen modelliert werden, um den Einfluss der Mikrostrukturierung oder einer Gradierung simulieren zu können. Diese Simulation dient dazu, die besten Ansätze für die zu findenden Prototypen zu identifizieren.

### Projektmonate 7 – 12:

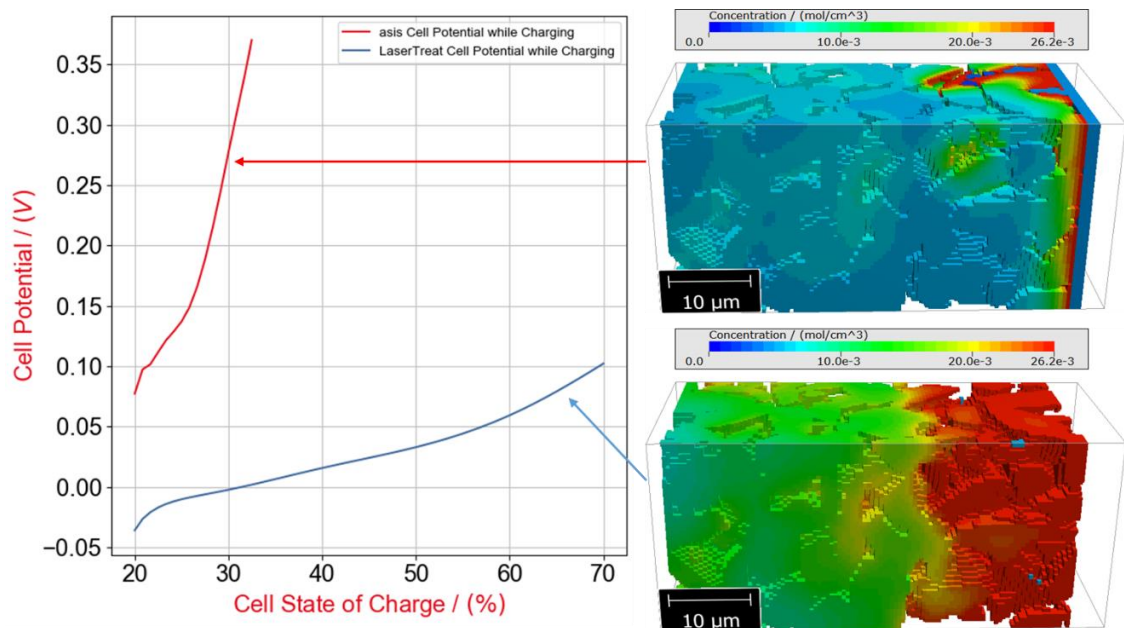
**Modellierung:** Zunächst wurde die Modellierung auf Grundlage von 2D Querschnitten von, zum Referenzsystem vergleichbaren Elektroden begonnen. Diese Herangehensweise ist insofern interessant, dass 2D Aufnahmen von Elektroden schneller und kostengünstiger zur Verfügung stehen. Die Herausforderung liegt jedoch darin, auf Grundlage von 2D Daten ein akkurates 3D Modell zu erstellen. Der Arbeitsweg von Ausgangsdaten hin zum digitalen Modell ist in Abbildung 2 dargestellt. Die Erstellung des Statistischen Digitalen Zwillings aus 3D Grauwertbildern ( $\mu$ CT oder FIB-SEM) stellt hierbei den Idealfall dar. Auch aus 2D Querschnitten oder nur aus Kenndaten des Rohmaterials kann prinzipiell ein 3D Modell erstellt werden. Die Qualität dieser Modelle muss dann aber gegen den Idealfall validiert werden, um Faktoren zu finden, die Ungenauigkeiten in der Modellierung ausgleichen. Die Modellierung aus Kenndaten des Rohmaterials (von SGL Carbon) wurde für die Anodenseite ebenfalls getestet und im späteren Projektverlauf in Zusammenarbeit mit SGL weiterverfolgt. Die erzielten Ergebnisse zur Erstellung der Digitalen Zwillinge wurden den Projektpartnern in Form von Skripten zur Verfügung gestellt.



**Abbildung 2: Verschiedene Arbeitswege, um von Ausgangsdaten zu einem digitalen Modell einer Elektrode zu gelangen. Neben der Generierung aus 3D Tomographie-Daten ist es ebenfalls möglich nur aus 2D Bilddaten ein 3D Modell zu erschaffen oder theoretisch könnte auch aus Daten des Rohmaterials (z.B. Partikelgrößenverteilung) ein statistisches digitales Modell generiert werden. Ob und wie diese Wege zu einem vergleichbaren digitalen Modell führen, wird derzeit untersucht.**

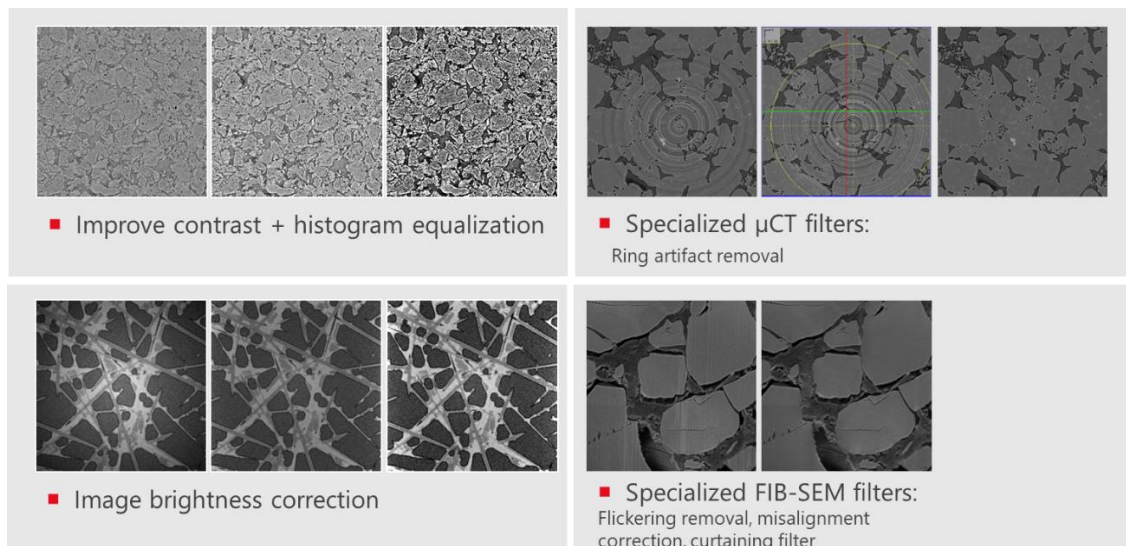
**Modellierung der Mikrostrukturierung:** Anhand des digitalen Modells der Graphit Anode, wurde die Mikrostrukturierung durch gezieltes Entfernen des Binders mittels eines Lasers näher untersucht. Hierzu wird der Laserbeschuss digital simuliert und

der überschüssige Binder an der Anoden-Oberfläche entfernt. Der Einfluss dieser Behandlung auf das Lade- und Entladeverhalten kann dann mit Hilfe einer Simulation validiert werden. Hierzu werden bestimmte Kennzahlen untersucht: Porosität, Tortuosität, effektive Ionendiffusivität, aktive Oberfläche, u.a. Darüber hinaus kann auch das Ladeverhalten selbst simuliert werden. Dadurch kann der Effekt dieser und später auch anderer Modifikationen digital geprüft werden und die jeweils besten Ansätze auch experimentell durch die Projektpartner weiterverfolgt werden. Eine digitale Anode und der Einfluss der Laserstrukturierung ist in Abbildung 3 dargestellt. Unklar ist derzeit noch, ob durch den Laserbeschuss auch das Aktivmaterial verändert wird und wie sich die möglichen Änderungen auf die Eigenschaften des Aktivmaterials auswirken.



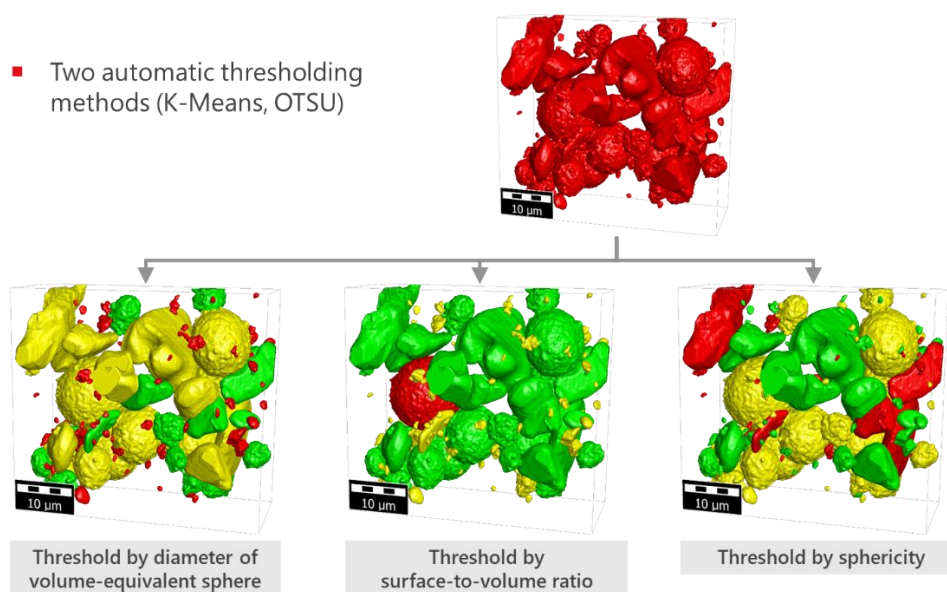
**Abbildung 3:** Ladekurve einer digitalen Anode mit 3C (links) für den unbehandelten Fall (rote Kurve, Modell rechts oben) sowie für den laserstrukturierten Fall (blaue Kurve, Modell rechts unten). Für beide Modelle ist die final erreichte Lithiumkonzentration beim Laden farblich dargestellt (Modelle rechts). Während der Ladevorgang bei der unbehandelten Anode bei ca. 32 % abbricht, kann die laserbehandelte Anode bis 70% geladen werden.

**3D-Bildimport:** Für die Version 2020 der Software GeoDict, die von der Math2Market GmbH entwickelt wird, wurden spezielle Filter für den Import von 3D Bilddaten implementiert, die die Qualität in der Verarbeitung dieser Daten signifikant erhöhen. Damit steigt auch die Qualität der Digitalen Statistischen Zwillinge. Als Beispiele sind in Abbildung 4 spezielle FIB-SEM, µCT und allgemeine-Filter dargestellt.



**Abbildung 4: Darstellung der Anwendung der für GeoDict2020 entwickelten Bildfilter. Neben den allgemeinen Filter zur Verbesserung des Kontrastes der Grauwerte (links oben) und der Korrektur der Helligkeit (links unten) gibt es nun auch einen speziellen  $\mu$ CT-Filter zur Entfernung von so genannten Ringartefakten und spezielle FIB-SEM Filter zum Entfernen des so genannten „Flickerings“ und „Curtainings“ sowie zur Korrektur von Fehlausrichtungen der Schnittbilder. Die Qualität des Bildimports kann dadurch erhöht werden.**

**Objektidentifizierung:** Zwischen Bildimport und Generierung des Statistischen Digitalen Zwillings müssen die einzelnen Aktivpartikel von GeoDict als Objekte identifiziert werden, um deren Größe und Orientierung statistisch zu erfassen. Aus diesen statistischen Daten entsteht dann der Zwilling. In der Objektidentifizierung wurden für GeoDict2020 ebenfalls die Kapazitäten erweitert. Neben zwei automatischen Algorithmen zur Identifizierung von Partikeln (K-Means, OTSU) wurden spezielle Grenzwert-Parameter hinzugefügt, die vom Nutzer eingestellt werden können, um Partikel nach ihrer Sphärizität, Oberfläche-zu-Volumen-Verhältnis oder dem Durchmesser des Volumen-Äquivalents zu identifizieren und zu klassifizieren. Die Unterschiede, die dadurch in der Identifizierung entstehen können, sind exemplarisch in Abbildung 5 gezeigt. Darüber hinaus wurde die Infrastruktur der Software in Hinblick auf die Einbindung von künstlichen neuronalen Netzen (KNN) ausgebaut. Es ist jetzt möglich KNN für eine individuelle Objektidentifizierung zu trainieren, z.B. speziell für Graphitpartikel.

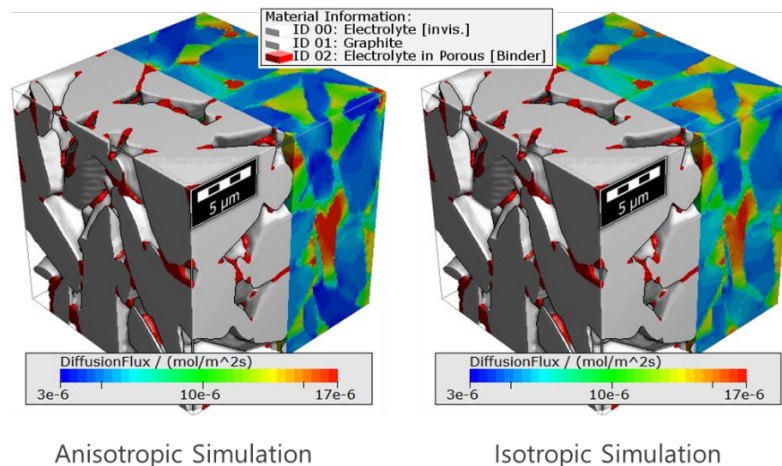


**Abbildung 5: Darstellung der Identifizierung von Partikeln in einem 3D Datensatz. Durch verschiedene Grenzwert-Parameter kann das Ergebnis der Identifizierung beeinflusst werden. Solche speziellen**



**Parameter können dabei helfen das Aktivmaterial in 3D Scans richtig zu identifizieren, um für die Modellierung korrekte statistische Parameter über die Partikel zu gewinnen.**

**Anisotrope Diffusion (Bilaterale Projektarbeit mit Volkswagen):** In Abbildung 6 ist exemplarisch eine Simulation der Ionendiffusion in einer Graphit-Struktur gezeigt. Die Simulation wurde mit einer frühen alpha-Version von GeoDict2021 erstellt. Hier war es noch nicht möglich die Anisotropie in ihrem realen Umfang darzustellen, der sich über mehr als 10 Potenzen erstreckt. Die Simulation unten zeigt daher nur einen Kontrast von einer Größenordnung zwischen Vorzugsrichtung und dazu senkrechter Richtung. Doch auch hier zeigen sich Unterschiede im Transportverhalten der Mikrostruktur.






**Abbildung 6: Simulation der Ionendiffusion an einer exemplarischen Graphitstruktur. Während die Graphitpartikel links eine anisotrope Diffusion aufweisen, ist rechts der Fall für isotrope Diffusionseigenschaften gezeigt.**

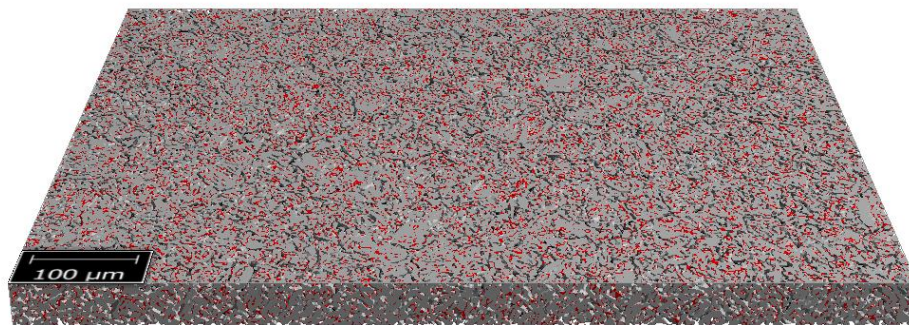
### **Projektmonate 13-18:**

**Modellierung:** Seit März 2020 standen die Referenzanode sowie eine doppelt-beschichtete Anode, hergestellt vom Projektpartner ZSW, zur Verfügung. Beide Anoden wurden an den externen Dienstleister RJL Micro & Analytic gesendet, der nanoCT Scans mit einer Auflösung von 300 nm sowie einem Gesamtvolumen von ca. 800 µm x 45 µm x 700 µm für die Referenzanode, bzw. 750 µm x 100 µm x 700 µm für die doppeltbeschichtete Anode lieferte. Seit Mai 2020 stand auch die Referenzkathode, hergestellt vom ZSW, zur Verfügung und wurde im gleichen Monat von RJL Micro & Analytic mit einer Auflösung von 300 nm gescannt. Die 3D nanoCT Scans wurden allen Projektpartnern zur Verfügung gestellt.

Die Bilddaten der Anoden wurden in GeoDict importiert und bearbeitet, so dass ein gefiltertes 3D Grauwertbild entstand. Hierbei wurden die neuentwickelten Bildfilter erfolgreich eingesetzt, um die Qualität des Bildmaterials zu erhöhen.

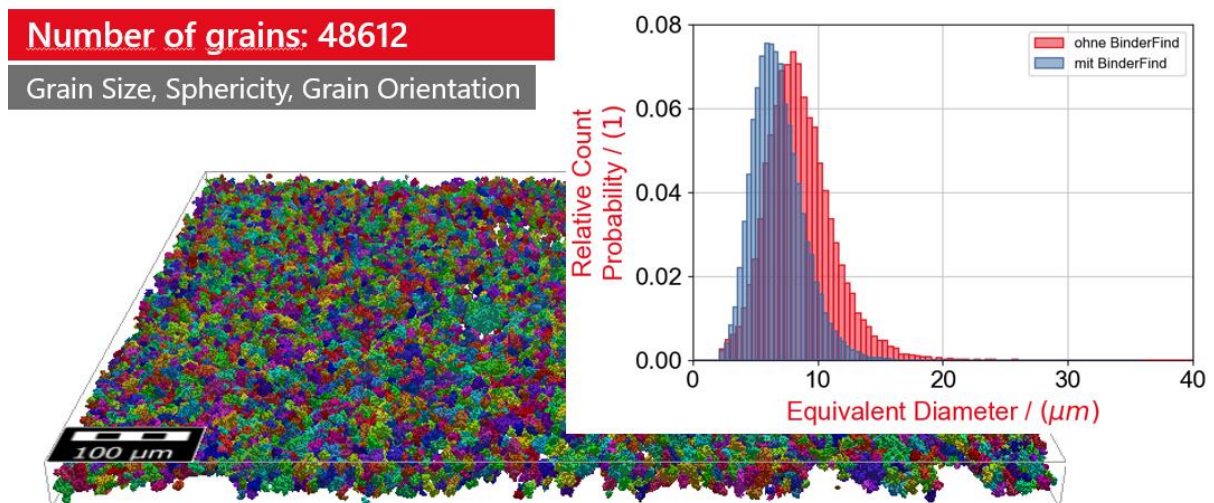
Im nächsten Schritt wurden die 3D-Grauwertbilder segmentiert, d.h. die einzelnen Materialkonstituenten identifiziert. Schwierig ist es hierbei, das Aktivmaterial (Graphit) von der Carbon Black & Binder Domain (CBD) zu unterscheiden, da beide Konstituenten vorwiegend aus Kohlenstoff bestehen und daher den gleichen Grauwert besitzen. Deshalb kam hierbei eine Neuentwicklung der Math2Market zum Einsatz: Ein neuronales Netz (Convolutional Neural Network, CNN) wurde darauf trainiert, in den vorsegmentierten Strukturen (Festkörper und Pore getrennt) die CBD-Phase vom Aktivmaterial zu unterscheiden und somit die Segmentierung zu vervollständigen. Dadurch konnte die CBD-Verteilung in den Elektroden untersucht werden. Siehe dazu auch Abbildung 7.

Material Information:	
	ID 00: Pore [invis.]
	ID 01: Graphite
	ID 02: Binder



**Abbildung 7: Vollständig segmentierter nanoCT Scan einer Referenzanode (ZSW). Die CBD-Phase wurde mit Hilfe eines CNN segmentiert.**

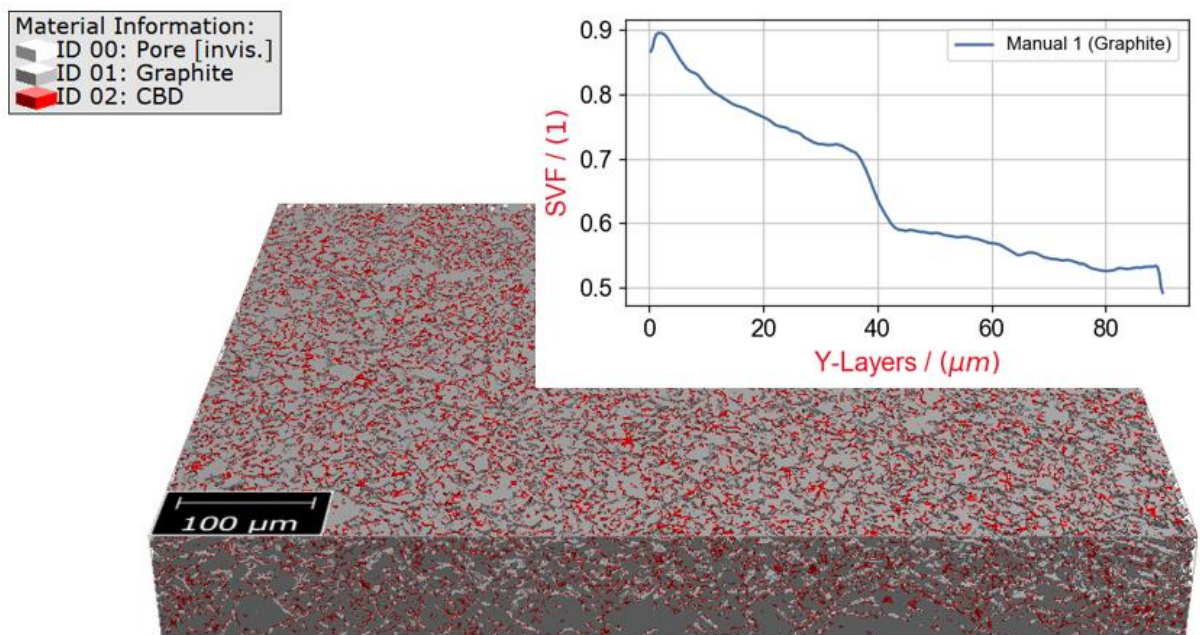
Auf die segmentierten Anoden kann dann eine Objektidentifizierung angewendet werden, die die einzelnen Aktivpartikel identifiziert und deren Größe, Form sowie Orientierung bestimmt (siehe Abbildung 8).



**Abbildung 8: Identifizierung und Analyse der Aktivpartikel in einer Referenzanode (ZSW). Mit Hilfe der Partikelstatistiken kann ein Digitaler Zwilling der Anode erstellt werden.**

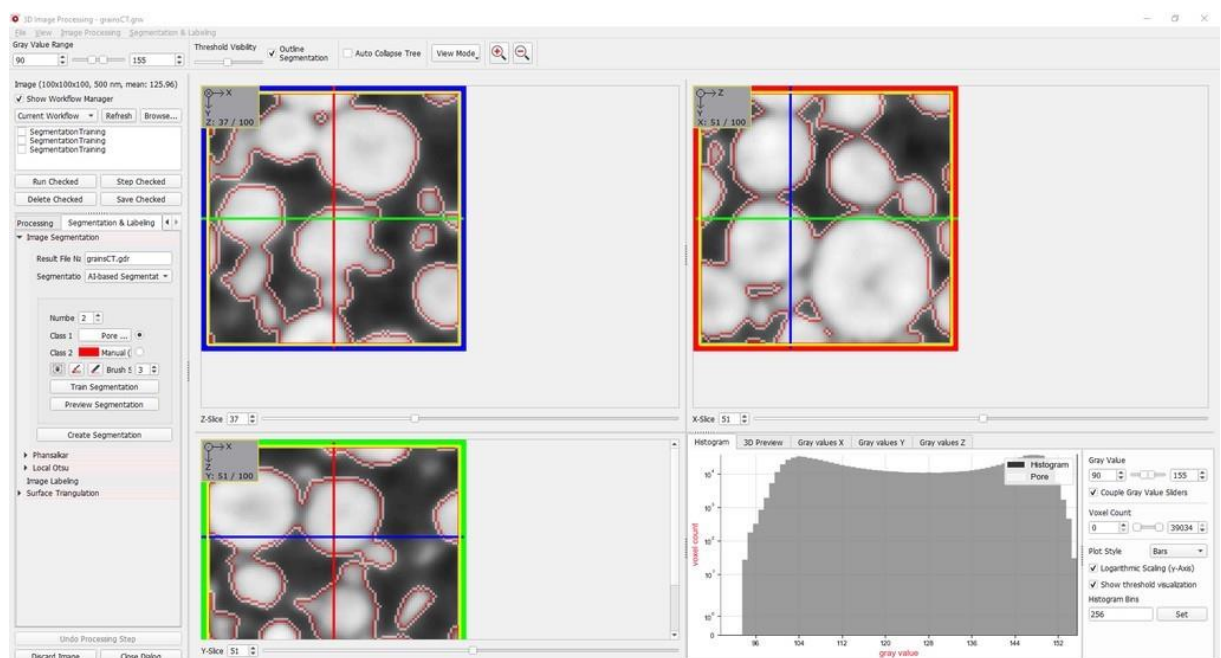
Diese Daten konnten dann genutzt werden, um die Statistischen Digitalen Zwillinge der Referenzanode, und später der Referenzkathode, zu generieren.

**Modellierung der Mikrostrukturierung:** Die oben erwähnte, doppelbeschichtete Anode mit zwei Schichten mit unterschiedlichen Aktivpartikel-Größenverteilungen ist eine mögliche Spielart der 3D-Strukturierung, die im Rahmen des Projektes untersucht wurde. Durch die vorhandenen 3D-Bilddaten einer solchen Anode kann diese mit GeoDict analysiert werden und es kann ebenfalls ein Digitaler Zwilling erstellt werden. Siehe hierzu Abbildung 9.



**Abbildung 9: Vollständig segmentierter nanoCT Scan einer doppelbeschichteten (Anode). Durch eine Analyse der Volumenverteilung entlang der Dicke der Anode (im Diagramm dargestellt) können die unterschiedlichen Schichten identifiziert werden.**

**3D-Bildimport:** In der Version GeoDict2021 (Veröffentlichung September 2020) wurde es dem Nutzer ermöglicht, beim Bildimport auf 3D-Grauwertbildern ein KNN zu trainieren, um Materialkonstituenten zu segmentieren. Siehe hierzu Abbildung 10. Der Nutzer markiert in der GUI Strukturen mittels eines virtuellen Pinsels. Das KNN lernt dadurch, die angemalten Strukturen anhand ihres Grauwertes von den anderen Bereichen zu unterscheiden. Dies konnte später innerhalb des Projektes eingesetzt werden, um die Segmentierung der 3D Scans noch einmal zu verbessern und dadurch noch akkuratere Digitale Zwillinge zu erstellen.

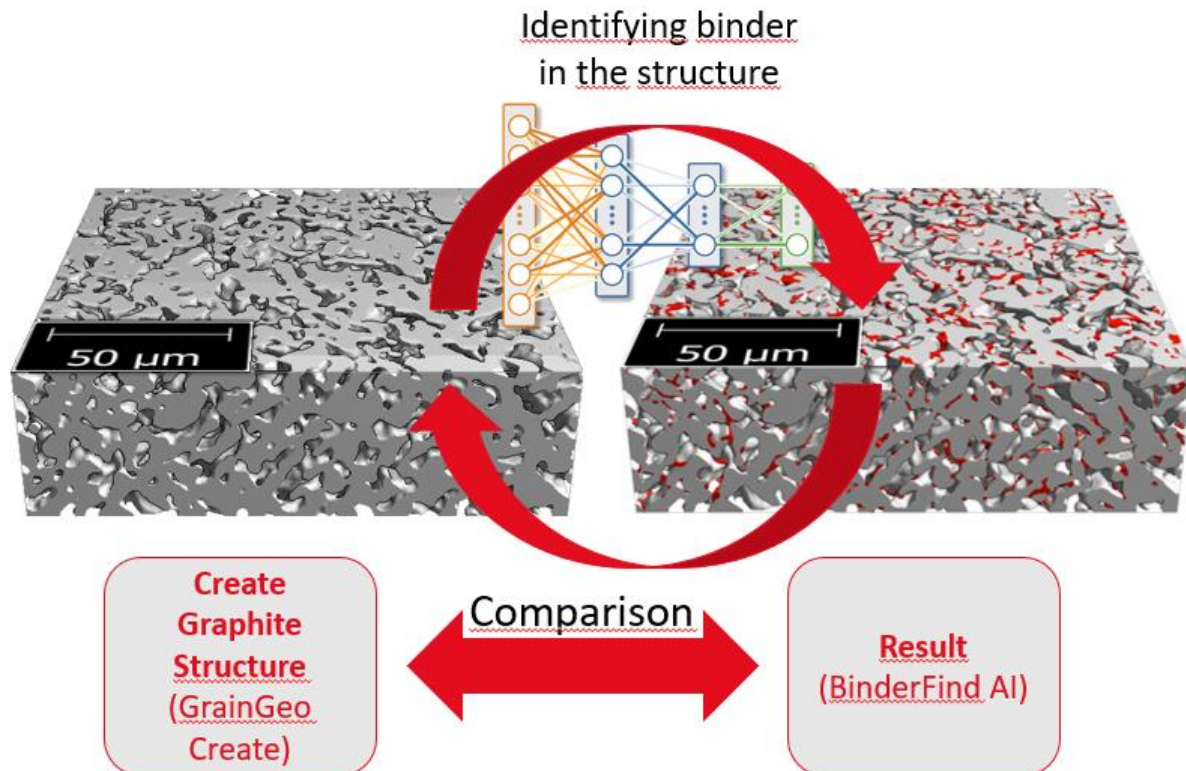


**Abbildung 10: GUI der GeoDict2021 pre-alpha Version. Dargestellt ist die neue Funktion Grauwertbilder mit Hilfe eines CNNs zu segmentieren.**

**Objektidentifizierung:** Ab GeoDict2021 war es möglich ein KNN zu trainieren, um Materialkonstituenten in vorsegmentierten Mikrostrukturen identifizieren können. Dies wurde innerhalb des Projektes angewendet, um ein KNN zu trainieren, dass die



CBD-Phase in einer Graphit-Anodenstruktur identifiziert. Dazu wurde mit Hilfe vorhandener, segmentierter Graphit-Anodenstrukturen und den Strukturgeneratoren von GeoDict ein Trainingsdatensatz erstellt, der mehrere hundert Trainingsstrukturen enthält. Wie in Abbildung 11 schematisch dargestellt, werden die erstellten Strukturen anonymisiert und das KNN lernt im Training die CBD-Phase vom Aktivmaterial durch Abgleich mit der bekannten Lösung zu unterscheiden. Nach erfolgreichem Training ist das KNN in der Lage, auf vorher unbekannten Strukturen die CBD-Phase ebenfalls zu identifizieren. Diese Neuerung ist hoch innovativ und auf 3D-Bilddaten in dieser Form bisher weltweit einzigartig.



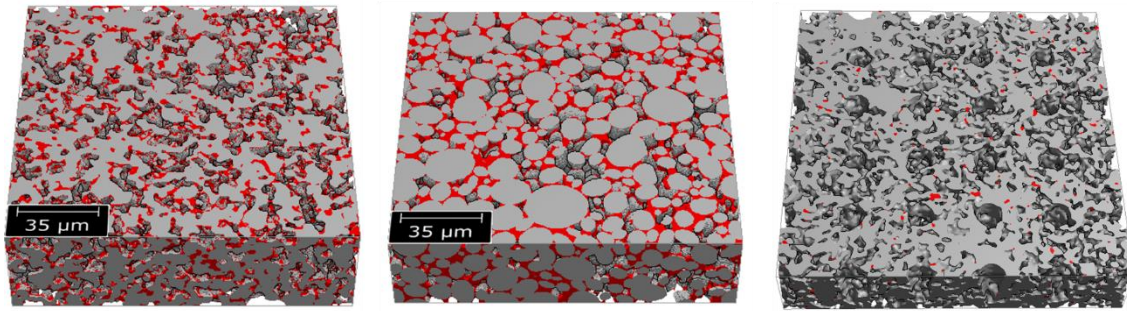
**Abbildung 11: Schema des Trainingsprozesses eines CNNs. Künstlich erstellte Trainingsstrukturen werden anonymisiert. Durch Abgleich mit der richtigen Lösung lernt das CNN die CBD-Phase auch in unbekannten Strukturen zu erkennen.**

**Materialdatenbank:** Es wurde damit begonnen die Materialdatenbank von GeoDict mit den spezifischen Materialparametern für das Projekt zu ergänzen. Neben den Elektrodenmaterialien wurden z.B. auch Materialparameter für die Bindermaterialien verfügbar gemacht. Typische Materialparameter sind neben Kennwerten für den Ionentransport und die Ionenspeicherung, beispielsweise auch die elektronische Leitfähigkeit, volumetrische Dichte und Gewicht. Die Datenbank wird über das Projekt hinweg kontinuierlich auch nach dem Bedarf der Projektpartner ergänzt.

### **Projektmonate 19 – 24:**

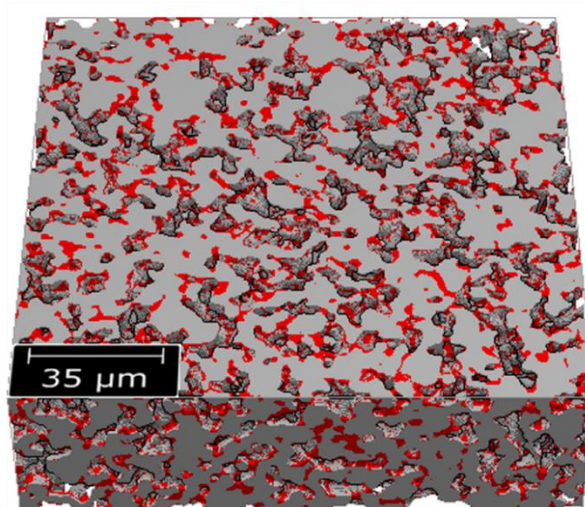
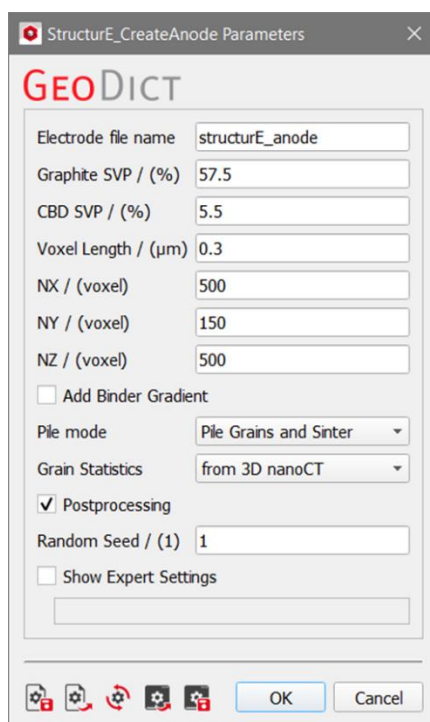
Der Meilenstein MS 2.2 „Strukturmodelle für laserstrukturierte, mechanisch strukturierte oder gradierte Elektroden wurden erstellt“ war in diesem Zeitraum am 30. September 2020 fällig und wurde erreicht.





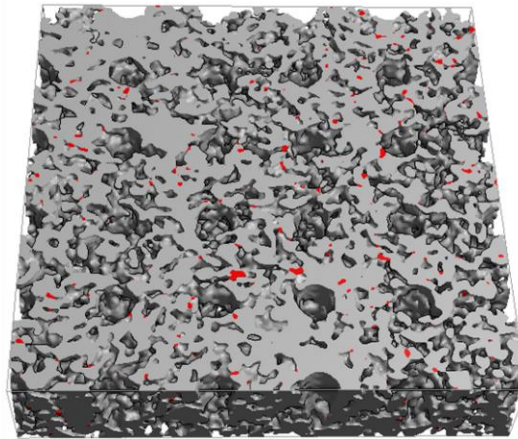
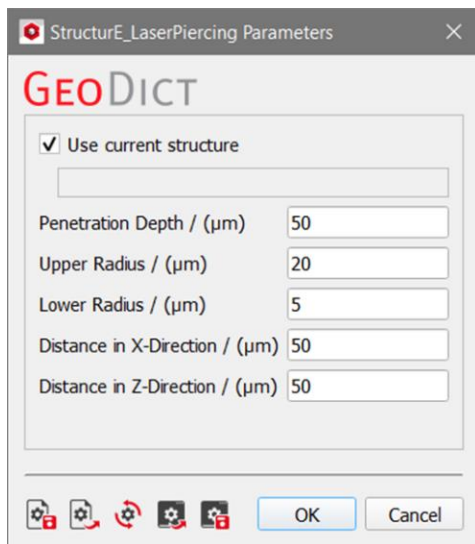
**Abbildung 12: Statistischer Digitaler Zwilling der Referenzanode (links) sowie der Referenzkathode (Mitte). Rechts ist eine Elektrode mit Mikrostrukturierung abgebildet. Alle Modelle können mit GeoDict Skripten automatisch erstellt werden.**

**Modellierung:** Als Deliverables wurden den Projektpartnern Python Skripte (so genannte GeoApps) zur Verfügung gestellt, die eine automatisierte Erstellung von Statistischen Digitalen Zwillingen mit der Software GeoDict ermöglichen. Die Skripte ermöglichen sowohl das Erstellen Digitaler Zwillinge der Referenzelektroden, wie auch die Modellierung der verschiedenen Mikrostrukturierungsverfahren (siehe Abbildung 12). Dabei können die Parameter der Mikrostrukturierung wie z.B. Lochdurchmesser, Tiefe und Abstand eingestellt werden, um Parameterstudien zu ermöglichen.



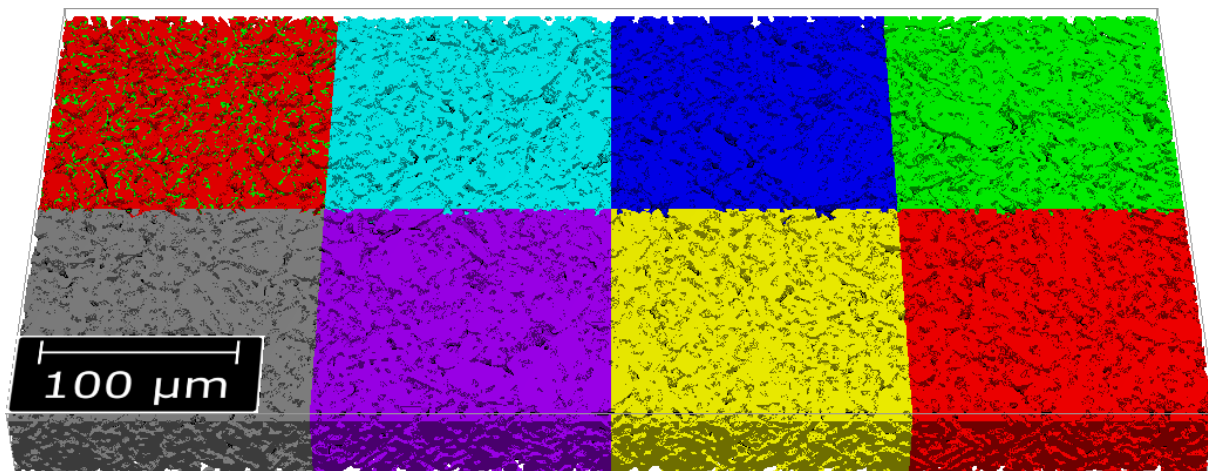
**Abbildung 13: GUI des GeoDict Skriptes zur Erstellung eines Statistischen Digitalen Zwillinges einer Referenzanode. Rechts ist die aus der Ausführung des Skriptes resultierende Mikrostruktur der Anode abgebildet.**

Die GeoApps waren für alle Projektpartner ab dem 20.09.2020 verfügbar und wurden zusammen mit den Partnern weiterentwickelt. Die Skripte verfügen über eine GUI die allen Partnern einen einfachen Zugang zur Modellierung ermöglicht (siehe Abbildung 13).



**Abbildung 14: GUI zur Modellierung des Mikroprägens mit einem Laser. Die verschiedenen Parameter der Strukturierung können bei der Modellierung angepasst werden. Rechts ist eine Realisierung der Strukturierung dargestellt.**

**Modellierung der Mikrostrukturierung:** Für jedes Mikrostrukturierungsverfahren gibt es eine separate GeoApp, in dem die Parameter der Mikrostrukturierung angepasst werden können. Beispielhaft ist in Abbildung 14 das Mikroprägen mit dem Laser abgebildet. Neben Eindringtiefe and Lochabstand können auch der obere sowie untere Radius eingestellt werden. Somit kann z.B. in einer Parameterstudie der ideale Lochabstand ermittelt werden.



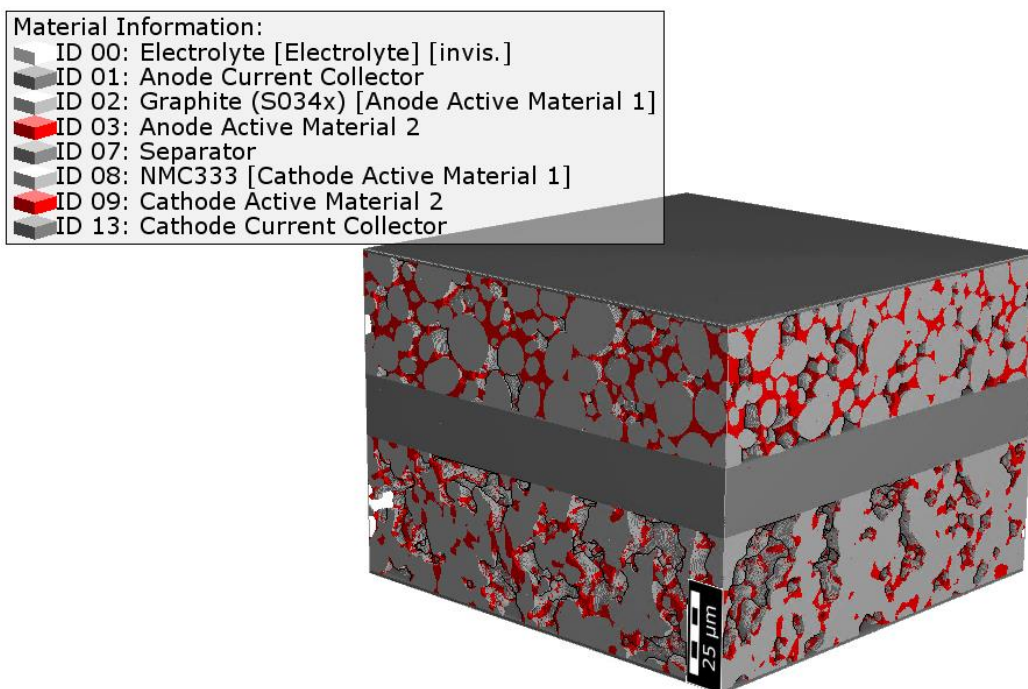
**Abbildung 15: Visualisierung der Unterteilung des microCT Scans der Referenzanode in gleich große repräsentative Volumen. Die Mittelwerte der verschiedenen Mikrostruktureigenschaften aller Teilvolumen dienen als Referenz zur Validierung des Zwillings.**

**Validierung der Statistischen Digitalen Zwillinge:** Bevor die Skripte zur Nutzung freigegeben konnten, wurden sie aufwändig validiert. Dazu wurden die microCT Scans der Referenzelektroden in gleich große Segmente unterteilt (siehe Abbildung 15) und die Mikrostruktureigenschaften jedes Segments wurden bestimmt.

**Tabelle 1: Validierung des Statistischen Digitalen Zwillings der Referenzanode. Verschiedenen Mikrostruktureigenschaften werden verglichen.**

	CT Scan		Statistischer Digitaler Zwilling	
	Mittelwert	StAbw.	SDT	Abw.
Porosity	0.369675	0.007043215	0.3805	3%
Geodesic Tortuosity	1.185125	0.00573231	1.158	2%
Diffusion Tortuosity	1.794625	0.023952753	1.675	7%
Granulometry D50	3.19317E-06	3.99346E-08	4.17E-06	23%
Porosimetrie D50	2.4183E-06	6.99109E-08	3.17E-06	24%
GrainFind D50 Longest	13.8602625	0.37272905	13.1618	5%
GrainFind D50 Intermediate	8.8689075	0.099894392	8.58526	3%
GrainFind D50 Shortest	5.50282375	0.100192001	5.31328	4%

In Tabelle 1 ist das Ergebnis der Validierung für die Referenzanode gezeigt. Der Mittelwert jeder Eigenschaft aus allen Segmenten wird mit dem jeweiligen Wert des Zwillings verglichen und die Abweichung durch Anpassen der Modellierungsparameter so lange optimiert, bis eine ausreichende Übereinstimmung erzielt wurde. Verglichen werden Porosität, Tortuosität, Geometrie des Porenraums (Granulometry, Porosimetrie) und Partikelstatistiken (mit dem GeoDict Modul GrainFind bestimmte D50 Werte für die verschiedenen Partikelachsen). Bisher gibt es noch eine erhöhte Abweichung bei den Parametern des Porenraumes (über 20%). Im weiteren Verlauf des Projektes fand eine weitere Optimierung statt, um diese Abweichung weiter zu reduzieren.

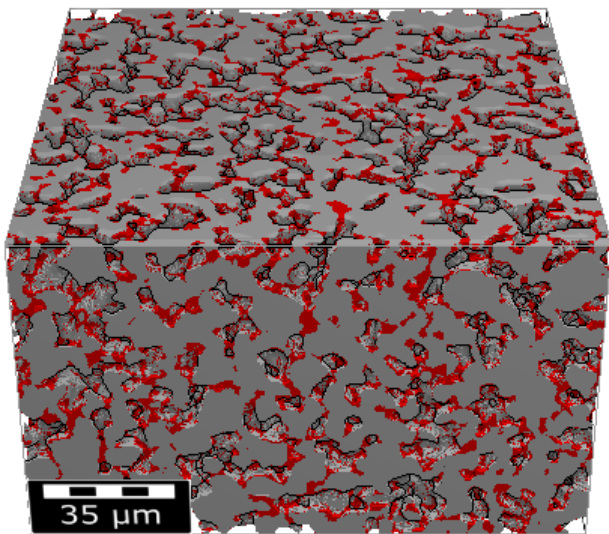


**Abbildung 16: Komplette Batteriezelle auf der Mikrostrukturebene. Der Aufbau wird dazu verwendet das elektrochemische Verhalten der Vollzelle zu simulieren.**

**Bilaterale Projektarbeit mit HSAA:** Die M2M hat von der HSAA die Daten des experimentellen Zyklierens der Referenzanode als Halbzelle und als Vollzelle (mit Referenzkathode) erhalten. Die Daten des Potentialverlaufs der Zellen können nun zwischen Experiment und Simulation verglichen werden. Dazu wird mit Hilfe der Statistischen Digitalen Zwillinge und der, mit Hilfe der in AP1 ermittelten Materialparameter erstellen Materialdatenbank ein Digitaler Zwilling des Experiments erstellt (siehe Abbildung 16). Die Statistischen Digitalen Zwillinge der



Mikrostruktur können dadurch noch einmal optimiert werden, so dass das digitale Experiment das reale Experiment möglichst gut simuliert.



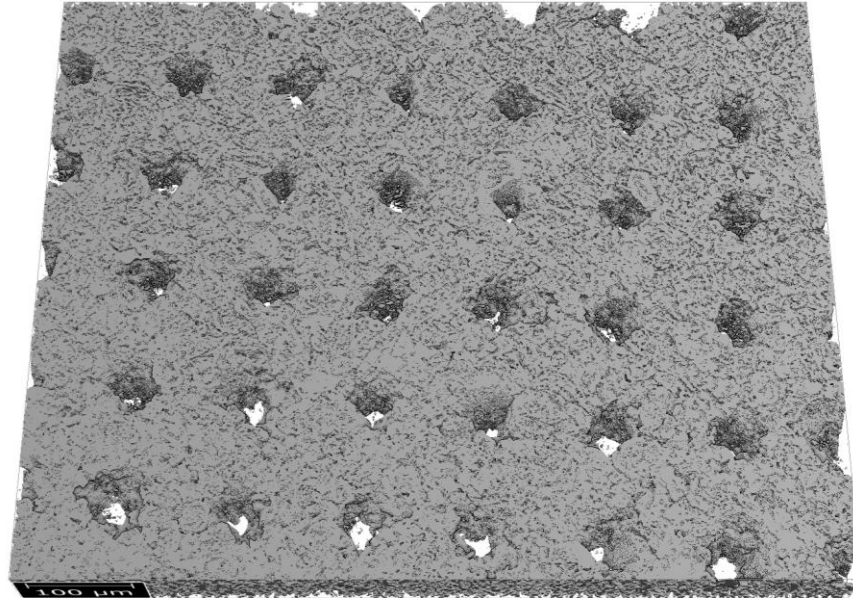
**Abbildung 17: Anodenmikrostruktur basierend auf dem Digitalen Zwilling der Referenzanode. Die Partikelstatistik wurde in Absprache mit SGL Carbon verändert, so dass alle Graphitpartikel eine sphärische Grundform haben.**

**Bilaterale Projektarbeit mit Carbon SGL:** Die Erstellung der Statistischen Digitalen Zwillinge basiert auf der Auswertung der statistischen Parameter der 3D microCT Scans der Referenzelektroden, insbesondere der Partikelgrößenverteilung und Orientierung. Diese kann aber auch beliebig verändert und eingestellt werden, um „was-wäre-wenn“-Szenarien durchzuspielen. Beispielsweise ist es für Carbon SGL interessant die Auswirkung der Partikelgrößenverteilung auf die resultierenden Mikrostruktur digital zu evaluieren, um Designrichtlinien für verbesserte Anodenmaterialien zu entwickeln (siehe Abbildung 17). Es fand ein regelmäßiger bilateraler Austausch einmal im Monat statt.

**Anisotrope Diffusion (Bilaterale Projektarbeit mit Volkswagen):** In den Service Pack 1 der GeoDict2021 Software wurden weitere Verbesserungen zur Simulation der anisotropen Diffusion eingebaut. Dadurch ist es nun möglich, realistische Kontraste zwischen den Transportrichtungen im Graphit darzustellen. Dadurch kann Volkswagen die geplanten Studien durchführen. Ziel ist es weiterhin, die anisotrope Diffusion auch in die elektrochemische Simulation zu integrieren.

### **Projektmonate 25 – 30:**

**Modellierung:** Die GeoApps wurden weiter verbessert. Bei hohen Verdichtungen der Elektroden kam es bei der Modellierung häufig zu Abweichungen in der erzielten Porosität, weil das Postprocessing der Aktivmaterial-Körner nicht volumenerhaltend war. Um dieses Problem zu beheben wurde ein weiterer Iterationsschritt in das Skript eingebaut, dass die Abweichung in der Porosität nachträglich korrigiert. In der GeoDict2022 Version wurde das Postprocessing so verbessert, dass diese Ungenauigkeit nicht mehr auftritt.



**Abbildung 28: 3D Mikrostrukturierte Graphit Anode. Die Graphit Anode wurde von VW hergestellt und dann von der HSAA mit einem Laser perforiert. Zu erkennen sind regelmäßige Löcher.**

**Validierung der Statistischen Digitalen Zwillinge:** Der Projektpartner HSAA hat im angegebenen Zeitraum drei  $\mu$ CT Scans von Graphit Anoden bei einem externen Dienstleister erstellen lassen: (1) Von einer Referenzanode hergestellt von VW, (2) von einer Referenzanode, die von der HSAA mit einer Laser-Ablation bearbeitet wurde (2D Strukturierung) und (3) von einer Referenzanode, die von der HSAA mit einer Laser-Perforation (3D Strukturierung) bearbeitet wurde (siehe Abbildung 18). Die Math2Market GmbH erstellte aus den 3D Scans segmentierte digitale Modelle und stellte diese den Projektpartner zur Verfügung. Die Ergebnisse der Charakterisierung der Referenzanode konnten genutzt werden, um die Modellierung der Anode nochmals zu validieren und zu verbessern.

Charge Mode	In-Flow BC	Applied Value	Stopping Criteria
1 Charge Battery Cell	Charge Rate	Charge Rate / (1) 1	Cell SOC / (%) 95 Cell Pot. / (V) 4.3 <input type="checkbox"/> Sim. Time / (s) 1800
2 Charge Battery Cell	Cell Potential	Cell Potential / (V) 4	Cell SOC / (%) 95 Charge Rate / (1) 0.01 <input checked="" type="checkbox"/> Sim. Time / (s) 3600
3 Discharge Battery Cell	Charge Rate	Charge Rate / (1) 1	Cell SOC / (%) 5 Cell Pot. / (V) 4.3 <input type="checkbox"/> Sim. Time / (s) 3600
4 Discharge Battery Cell	Cell Potential	Cell Potential / (V) 2.8	Cell SOC / (%) 5 Charge Rate / (1) 0.01 <input checked="" type="checkbox"/> Sim. Time / (s) 3600

Number of Rows: 4 Insert Row Delete Row

Boundary Conditions in Tangential Direction: Symmetric

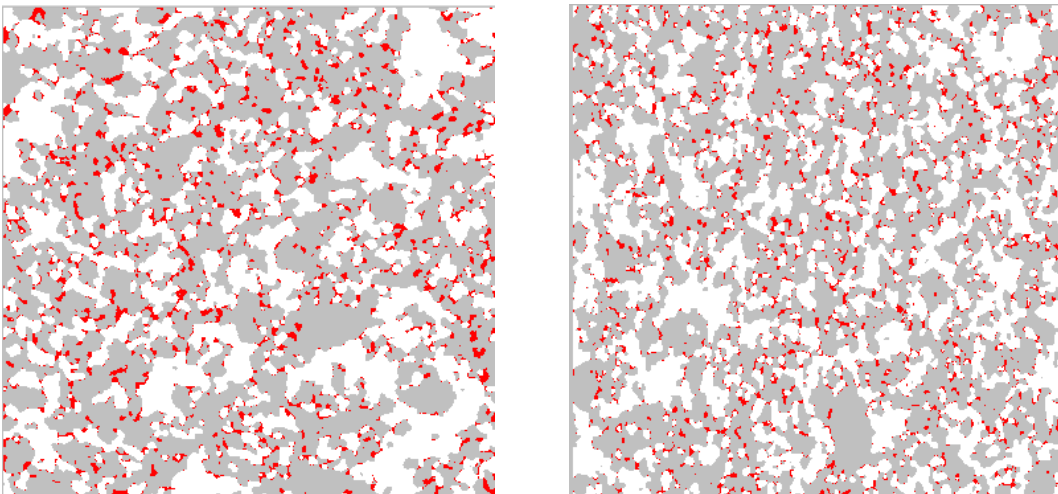
☐ Final Simulated Time / (s): 3600

OK Cancel

**Abbildung 19: Graphische Benutzeroberfläche des GeoDict Moduls BatteryDict in der Version GeoDict2022. Im "Experiment" Tab können nun komplexe Zyklrierprotokolle angelegt werden mit denen experimentelle Zyklrierprotokolle simuliert werden können.**

**Bilaterale Projektarbeit mit HSAA:** Die Projektarbeit mit der HSAA verteilt sich auf zwei Aufgaben: (1) Durchführen eines Digitalen Experiments des Zyklieverhaltens einer Digitalen Batterie im Vergleich zum Experiment, und (2) Auswertung der zwei mikrostrukturierten  $\mu$ CT Scans der HSAA.

- (1) Um das experimentelle Zyklierprotokoll der HSAA für die Referenzzelle in der Simulation nachbilden zu können wurde das GeoDict Modul BatteryDict für die Version GeoDict2022 entsprechend erweitert, um komplexe Protokolle abbilden zu können. Abbildung 19
- (2) zeigt die neu entwickelte Benutzeroberfläche, um entsprechende Ladeprofile anlegen zu können.
- (3) Die in Abbildung 18 gezeigte, mikrostrukturierte Anode (3D Strukturierung), sowie die 2D-strukturierte Anode sollen charakterisiert werden, um Erkenntnisse über den Einfluss der Strukturierung auf die Funktion der Batteriezelle zu erhalten und, um die Modellierung der Mikrostrukturierung zu verbessern. Die Erkenntnisse aus der Charakterisierung und Modellierung konnten dann genutzt werden, um das Mikrostrukturierungsverfahren zu validieren und zu verbessern. Eine gute Modellierung ermöglichen es breit angelegte Parameterstudien simulativ durchzuführen, um die optimalen Parameter für die Mikrostrukturierung zu finden.



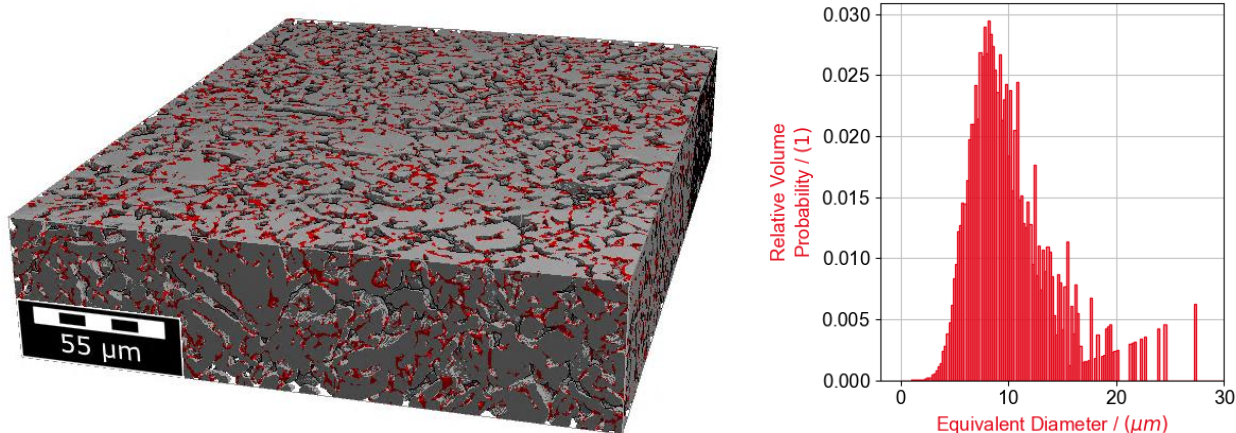
**Abbildung 20: 2D-Schnitte aus einer digital erzeugten Graphit Anode. Links aus einer digital erzeugten Referenzanode, rechts aus einer digital erzeugten Mikrostruktur mit geänderter Orientierung der Aktivmaterial-Körner im Vergleich zur Referenz. Das Aktivmaterial ist in grau dargestellt und die Binderphase in Rot.**

**Bilaterale Projektarbeit mit Carbon SGL:** Die M2M hat für SGL mehrere Parameterstudien erstellt. Das Ergebnis jeder Studie ist ein Satz von digitalen Mikrostrukturen, die an SGL zur Auswertung geliefert wurden. Unter anderem wurde bei den Studien der Bindergehalt und die Porosität einer Graphit Anode variiert, um den Einfluss auf die Tortuosität der Struktur zu untersuchen. Ziel der SGL war es die optimale Anodenstruktur zu finden, um eine gradierte Anode zu entwickeln.

### **Projektmonate 31 – 36:**

**Modellierung:** Die Geschwindigkeit der GeoApps wurde verbessert: Die durchschnittliche Dauer für die Erstellung einer Struktur mit einem Volumen von  $1000^3$  Voxeln wurde von ca. 2 Tagen auf etwa 1 Tag halbiert. Zusätzlich wurde die Möglichkeit eingebaut, den 3D-Orientierungstensor der Aktivmaterial-Partikel für die Erstellung anzupassen. Diese Funktion wurde in der Zusammenarbeit mit SGL Carbon verwendet, um den Einfluss der Partikelorientierung auf die Tortuosität zu

untersuchen. Außerdem wurde die Möglichkeit implementiert, eine definierte Partikelgrößenverteilung als .CSV-Datei einzulesen und für die Generierung zu verwenden. Mit dieser Funktion kann untersucht werden, ob neuartige Graphit-Pulver eine bessere Performance besitzen.



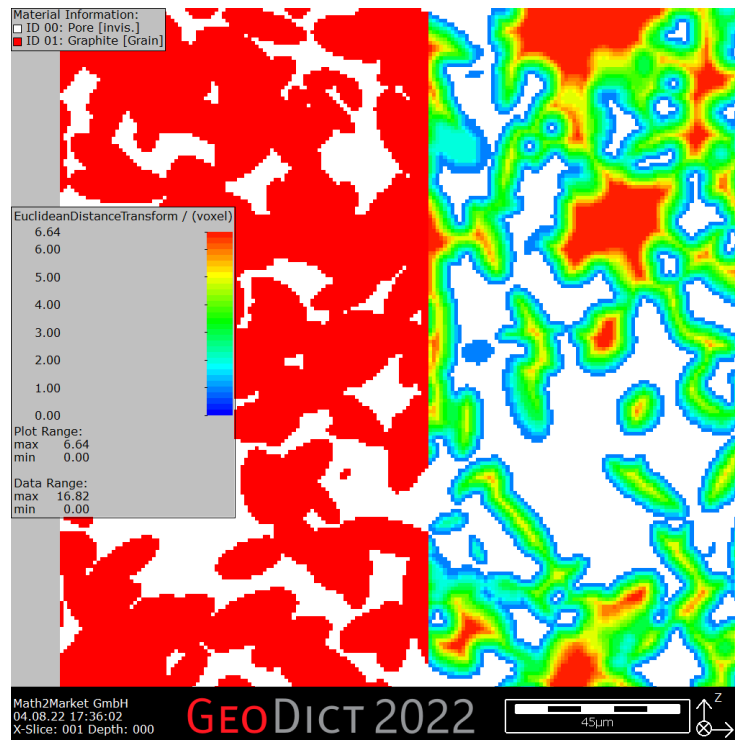
**Abbildung 21: Segmentierung der Referenzanode der HSAA (links) sowie mit GeoDict bestimmte Partikelgrößenverteilung (Durchmesser der Kugeln mit äquivalentem Volumen) des Graphits (rechts).**

**Validierung der Statistischen Digitalen Zwillinge:** Der  $\mu$ CT Scan der Referenzanode der HSAA wurde segmentiert und analysiert, um die Porosität der Elektrode sowie die Anteile von Aktivmaterial und Binder zu bestimmen. Darüber hinaus wurde die Größenverteilung des Aktivmaterials bestimmt (siehe Abbildung 21), sowie die Orientierung der Körner. Diese Werte wurden mit den bisherigen Werten aus dem ersten  $\mu$ CT Scan der Referenzanode des ZSW verglichen und eine sehr gute Übereinstimmung festgestellt. Anhand der  $\mu$ CT Scans der 2D- und 3D-mikrostrukturierten Anoden der HSAA wurden zudem die Skripte zur Modellierung der 2D- und 3D-Strukturierung validiert. Für die 2D-Strukturierung wurde die Tiefe bestimmt bis zu der der Binder mit dem Laser abgetragen werden konnte und wieviel des Binders in diesem Bereich abgetragen werden konnte. Siehe hierzu auch Abbildung 21, die eine Analyse der Binderverteilung bezogen auf die Tiefe zeigt. Für die 3D-Strukturierung wurde der Abstand der Löcher, deren Form und deren Größe (Breite, Tiefe) bestimmt.

**Bilaterale Projektarbeit mit Carbon SGL:** In monatlichen Treffen wurden die jeweils erzielten Ergebnisse diskutiert und neue Ziele gesetzt. Die Math2Market erstellte dabei nach Vorgaben von SGL digitale Modelle der Anode, bei der im Vergleich zur Referenzanode verschiedene Parameter variiert wurden. Der Fokus lag auf dem Einfluss der Partikelorientierung auf die Tortuosität der Anode.

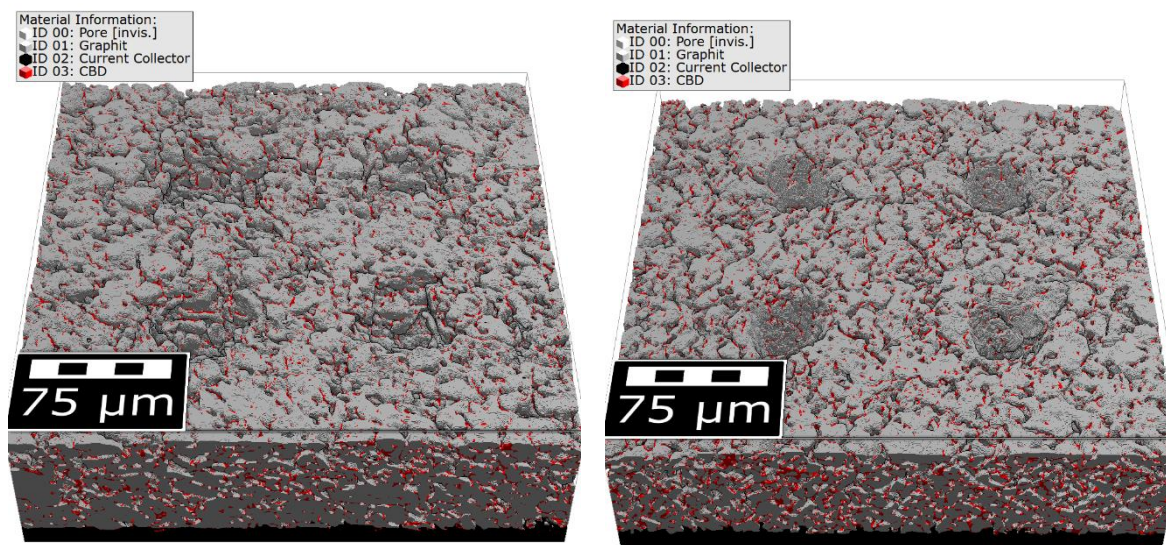
### **Projektmonate 37 – 42:**





**Abbildung 22: 2D Schnitt einer vereinfachten digitalen Graphit-Anode. Auf der linken Bildhälfte ist die Mikrostruktur dargestellt und rechts die Abstands-Metrik zur Bestimmung des Abstandes jedes Graphit-Voxels zum Porenraum (Elektrolyt).**

**Modellierung:** Die Auswertung der erstellten Digitalen Zwillinge wurde für die bilaterale Zusammenarbeit mit SGL Carbon automatisiert, so dass eine Reihe von Analysen durchgeführt wird: Insbesondere die Oberfläche der Aktivmaterial-Partikel, sowie der Abstand jedes Aktivmaterial-Voxels zur Elektrolyt-Phase. Mit dieser Abstands-Metrik kann unter anderem die Schnellladefähigkeit einer Anode bewertet werden. Je größer der Abstand eines Aktivmaterial-Voxels zur Elektrolyt-Phase ist, desto schwieriger kann er in der Realität „erreicht“ werden, d.h. desto ineffizienter funktioniert der Li-Ionen-Transport. Diese Abstands Metrik ist in Abbildung 22 für eine vereinfachte Graphit-Anode dargestellt.



**Abbildung 33: Segmentierter 3D röntgentomographische Scans der mikrogeprägten Graphit-Anode (links) und der laserperforierten Graphit-Anode (rechts).**

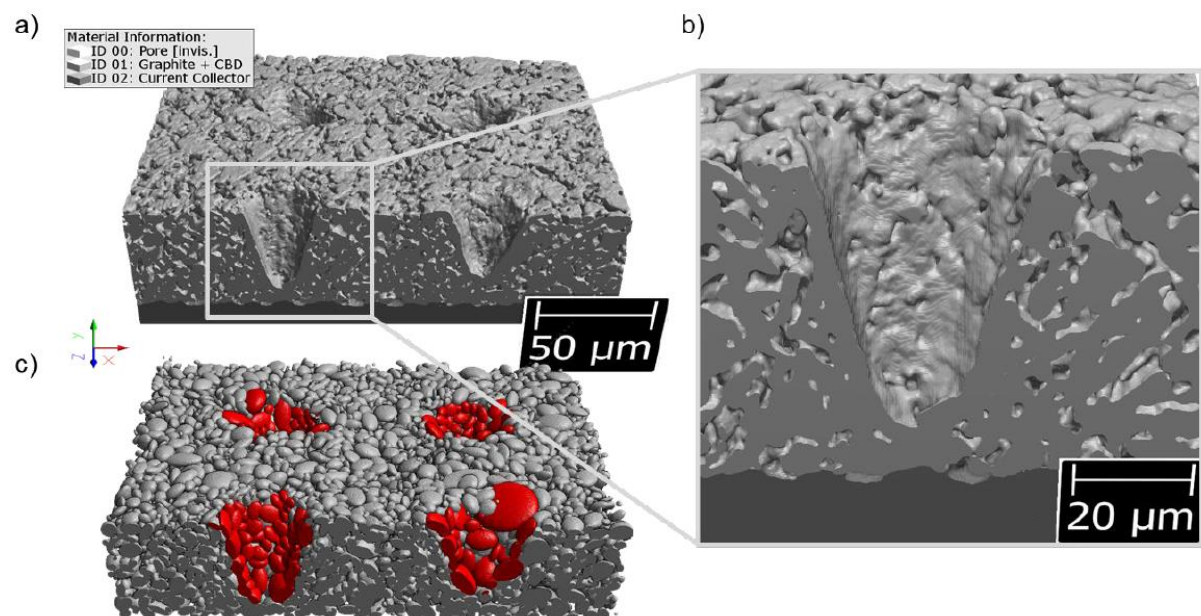
**Bilaterale Projektarbeit mit DLR:** Die beiden segmentierten 3D Modelle der mikrostrukturierten Anoden wurden ebenfalls dem DLR zur Verfügung gestellt, damit das DLR elektrochemische Simulationen auf den Modellen durchführen kann. Ziel



war es, die Ergebnisse der Simulation mit den experimentellen Ergebnissen zu vergleichen und dadurch die Simulation zu validieren. Die Segmentierung der bisher gelieferten Strukturmodelle (Referenzanode, 2D strukturierte Anode und 3D strukturierte Anode) wurden durch den Einsatz von KI noch einmal verbessert. Außerdem wurde in enger Abstimmung mit dem DLR sichergestellt, dass die Flächenbeladung der digitalen Modelle korrekt ist. Die Anoden können dadurch weitergehend analysiert und vom DLR für Simulationen genutzt werden.

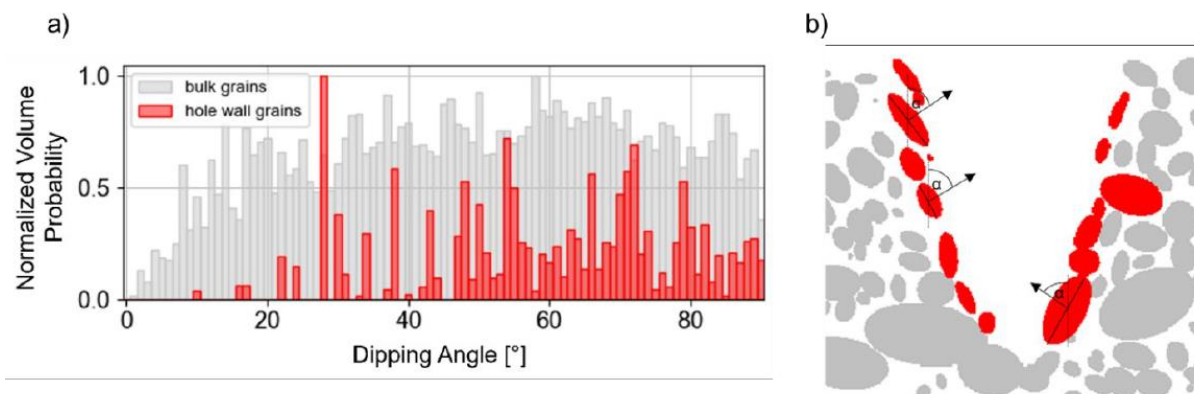
**Bilaterale Projektarbeit mit Carbon SGL:** Die monatlichen Treffen mit SGL wurden auf einem zweiwöchigen Rhythmus geändert, um die gemeinsame Projektarbeit weiter voranzutreiben. Auf Grundlage von künstlich erstellten Partikelgrößenverteilungen wurden verschiedene Graphit-Mikrostrukturen von der M2M erstellt und die Mikrostrukturen dann von SGL ausgewertet. Ziel war es, den Workflow zur künstlichen Erzeugung von Partikelgrößenverteilungen zu validieren. Mit dieser Methode können in Zukunft neue Aktivmaterialien digital entwickelt und getestet werden.

### Projektmonate 43 – 48:



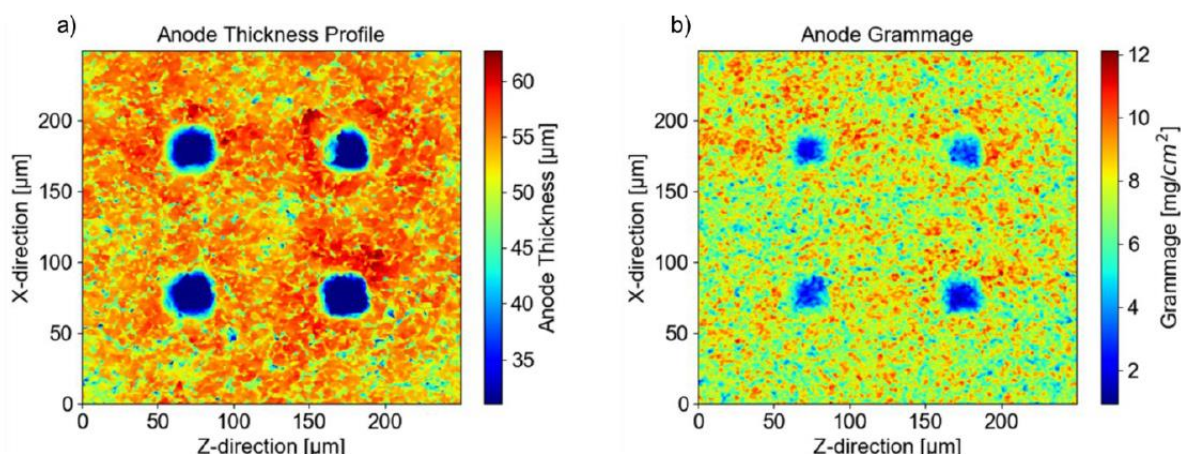
**Abbildung 24:** a) Visualisierung der Mikrostruktur der mikrogeprägten Graphitanode, segmentiert aus dem NanoCT-Scan. Der Scan wurde in drei Bestandteile segmentiert: 1) Pore, 2) Graphit und die Carbon Black & Binder Domain (CBD) und 3) Stromkollektor. b) Zoom in den markierten Bereich in a), um das mikrogeprägte Loch detaillierter darzustellen. c) Elliptische Fits der identifizierten Graphitpartikel im Scan. Zur Visualisierung werden alle Partikel in unmittelbarer Nähe der Prägelöcher rot hervorgehoben.

**Bilaterale Projektarbeit mit HSAA:** Eine gemeinsame Publikation mit der Hochschule Aalen wurde fertig gestellt und im peer-reviewed „Journal of Energy Storage“ publiziert. Für die Publikation wurde der CT Scan einer mikrogeprägten Graphit Anode segmentiert (siehe Abbildung 24 a und b) und die einzelnen Graphit-Flakes identifiziert und mit einer elliptischen Form angefitet (Abbildung 24 c).



**Abbildung 25: Histogramm des Neigungswinkels der Graphitpartikel  $\alpha$  in Richtung Vertikale. Die Auswertung zeigt, dass die Körner in der Nähe der Mikroprägelöcher durch die mechanische Kraft des Prägevorgangs eine deutliche Neigung in Richtung Vertikale aufweisen.**

Anschließend wurde die Orientierung der Partikel im 3D Raum analysiert, um den Einfluss des Mikroprägens auf die Ausrichtung der Partikel an den Lochwänden zu untersuchen. Wie in Abbildung 25 gezeigt, konnte festgestellt werden, dass die Partikel an den Lochwänden durch das Prägen „in die vertikale“ gedrückt werden. Dies könnte dazu führen, dass Poren an den Lochwänden verschlossen werden, was wiederum den Ionentransport im Elektrolyt behindern könnte.

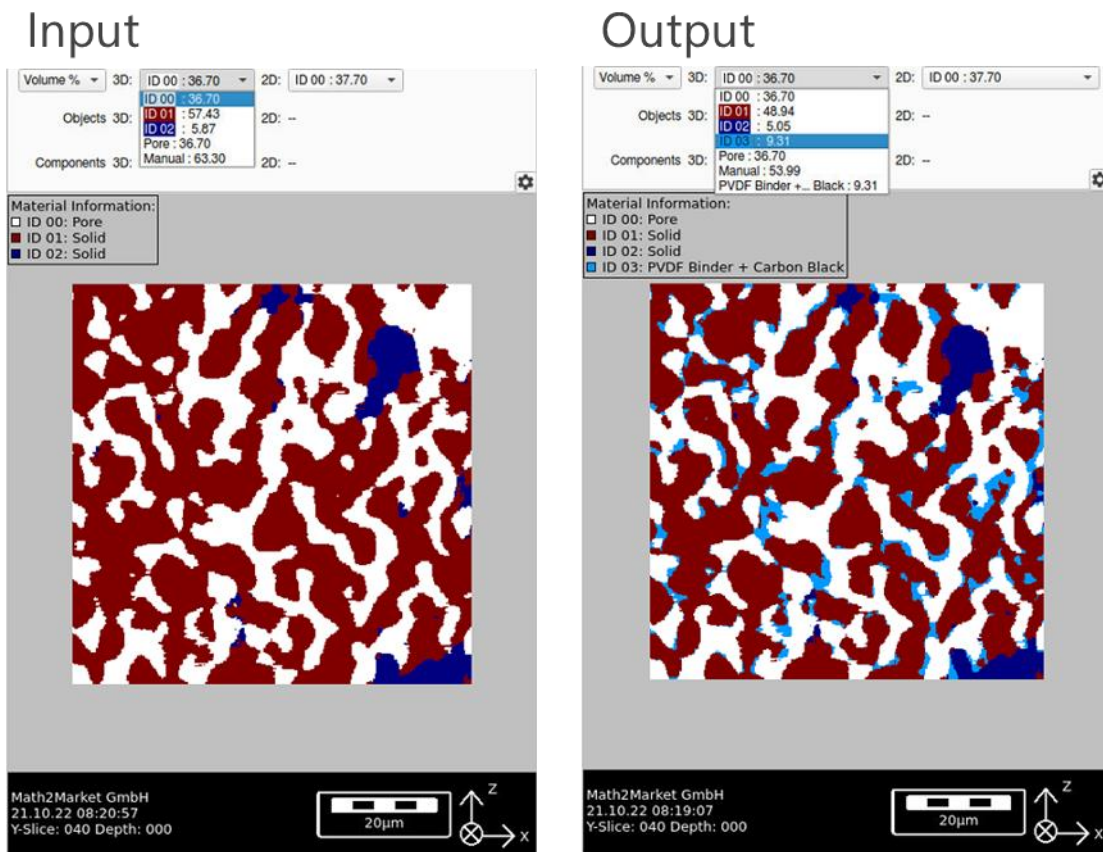


**Abbildung 26: a) 2D Höhenprofil der Anode und b) 2D Projektion des Flächengewichtes.**

Durch die Analyse des Höhenprofils des untersuchten Ausschnitts (Abbildung 26 a) und des Flächengewichtes (Abbildung 26 b) konnte zudem gezeigt werden, dass das Prägen keinen gravierenden Einfluss auf die Mikrostruktur besitzt. An den Rändern der Löcher lassen sich leicht ausgeprägte Krater erkennen und die Bereiche um die Löcher herum wiesen im Vergleich zum durchschnittlichen Flächengewicht eine leicht höhere Dichte auf.

**Bilaterale Projektarbeit mit DLR:** Mit dem DLR wurde eine mögliche Abweichung in der Auflösung der angefertigten CT Scans untersucht. Dies war zum ersten Mal bei den Arbeiten zur oben beschriebenen Publikation aufgefallen. Die Auflösung und damit die Voxellänge musste nachträglich korrigiert werden: Ursprünglich war vom Erzeuger des Scans (RJL Micro & Analytics GmbH) eine Voxellänge von 300 nm angegeben worden. Durch den bekannten Lochabstand von 100  $\mu\text{m}$  konnte die Voxellänge jedoch normiert werden und wurde nachträglich auf 250 nm korrigiert.

**Bilaterale Projektarbeit mit Carbon SGL:** Die Zusammenarbeit mit SGL Carbon wurde erfolgreich abgeschlossen. M2M hat weitere 3D Modelle geliefert mit deren Hilfe es SGL möglich war ihre Untersuchungen fertig zu stellen. Es wurde der Einfluss der Partikelorientierung auf die Tortuosität untersucht.



Target Binder: 8.37 v%  
Identified Binder: 9.31 v%

**Abbildung 27: Validierung des trainierten neuronalen Netzes zur Identifizierung der Carbon Black & Binder Domain (CBD) in einer Graphit Anode.** Links ist der Input abgebildet und rechts das Ergebnis der Identifizierung. Die CBD ist hellblau markiert. Die Menge des identifizierten Binders (9.31 v%) stimmt gut mit den Erwartungen (8.37 v%) überein.

**Validierung eines Neuronalen Netzes zur Identifikation der Carbon Black & Binder Domain in Graphit-Anoden:** Im Projektverlauf konnte die Validierung eines neuronalen Netzes zur Identifizierung der CBD in Graphit Anoden abgeschlossen werden. Hierzu wurden mit Hilfe der in Meilenstein 2.2 entwickelten Skripte Trainingsdaten erstellt. Das neuronale Netz wurde dann auf diesen Daten trainiert und validiert. Beim Test auf einer realen Anodenstruktur (siehe Abbildung 27) konnte eine gute Übereinstimmung bei der Menge des identifizierten Binders erzielt werden.



## EINGESETZTE MITTEL UND WICHTIGSTEN POSITIONEN DES ZAHLENMÄßIGEN NACHWEISES

Der Projektbeginn war der 01.05.2019. Die ursprünglich geplante Projektlaufzeit von 3 ½ Jahren wurde auf Antrag der Projektpartner kostenneutral um 6 Monate verlängert, so dass der 30.04.2023 das offizielle Projektende war.

Während dieser Zeit wurden insgesamt 7288 Arbeitsstunden in das Projekt investiert, dadurch entstanden Kosten in Höhe von 448 T€. Die Projektleitung bei der Math2Market übernahm Dr. Mathias Fingerle. Weiterhin wurden die Mitarbeiter Dr. Ilona Glatt, Dr. Fabian Biebl, Janine Hilden, Dr. Rolf Westerteiger, Dr. Sven Linden, Dr. Anja Streit und Dr. Roman Buchheit auf dem Projekt eingesetzt.

Im Rahmen des Projektes wurden beim externen Dienstleister RJL Micro & Analytics  $\mu$ CT Scans von Batterie Elektroden beauftragt. Die Kosten für diese Leistungen beliefen sich auf insgesamt 2.995 €.

Die Reisekosten, um an den Projekttreffen bei den Projektpartnern teilzunehmen beliefen sich auf insgesamt 699 €.

## NOTWENDIGKEIT UND ANGEMESSENHEIT DER GELEISTETEN ARBEIT

Die geleistete Arbeit entspricht dem im Projektantrag dargestellten Rahmen. Die fachkundige Segmentierung und Bildverarbeitung der  $\mu$ CT Scans der Batterie Elektroden erforderte die nötige Sorgfalt von Janine Hilden, Dr. Anja Streit und Dr. Mathias Fingerle, denn die digitalen Modelle der Elektroden dienten für das gesamte Arbeitspaket 2 als Grundlage. Die Erstellung der Digitalen Zwillinge der Elektroden, und damit das Erreichen von Meilenstein 2.2 „Strukturmodelle für laserstrukturierte, mechanisch strukturierte oder gradierte Elektroden wurden erstellt“, erforderte von Dr. Mathias Fingerle, Dr. Ilona Glatt und Dr. Fabian Biebl die Entwicklung einer statistischen Modellierung der Elektroden und die Validierung dieser Methode. Anschließend wurden auch die im Projekt untersuchten Mikrostrukturierungsverfahren implementiert. Das Modellierungsverfahren wurde den Projektpartnern als so genannte GeoApp zur Verfügung gestellt. Um die Qualität der Ergebnisse zu erhöhen, wurden von Dr. Fabian Biebl und Dr. Rolf Westerteiger zahlreiche Verbesserungen in die Software GeoDict implementiert. Insbesondere wurde die Bildverarbeitung verbessert, die KI-gestützte Identifikation von Aktivmaterial-Partikeln verbessert und auch die KI-gestützte Trennung von Aktivmaterial und Binder in diesem Projekt weiterentwickelt. Dr. Sven Linden implementierte ein anspruchsvolles numerisches Lösungsverfahren, um die anisotrope Diffusion in Graphit Anoden darstellen zu können. Ohne dieses Lösungsverfahren hätte der Nutzen der Mikrostrukturierung digital nicht zielführend bewertet werden können. Mit den Projektpartnern wurde während der gesamten Projektlaufzeit an der Validierung der Modelle und dem Einsatz der Ergebnisse für die Projektziele der Partner gearbeitet. Insbesondere fanden fortlaufende Arbeiten für das DLR, SGL Carbon und auch Volkswagen (später PowerCo) statt. Dr. Roman Buchheit unterstützte das Projekt im letzten Projektjahr und konnte die Validierung der Digitalen Zwillinge erfolgreich beenden. Eine gemeinsame Publikation mit der HSA konnte 2023 fertig gestellt werden, in der die im Projekt entwickelten Mikrostrukturierungsverfahren bewertet werden.

## VORAUSSICHTLICHE NUTZEN UND VERWERTBARKEIT DES ERGEBNISSES IM SINNE DES FORTGESCHRIEBENEN VERWERTUNGSPLANS

Durch das Projekt konnten verschiedene Module der Software GeoDict weiterentwickelt werden. Dadurch erhöht sich für die Zukunft der Nutzen der Kunden, was zu einer verbesserten Vermarktung der Produkte führt.

In ImportGeo-Vol wurden verschiedene neue Bildfilter implementiert, um die Bildverarbeitung von 3D Bilddaten zu verbessern. Außerdem wurde im Rahmen des Projektes das Segmentieren mit Hilfe von Neuronalen Netzen implementiert. Diese Features können sowohl für Batterien als auch für andere Anwendungsbereiche wie Brennstoffzellen, Elektrolyseure, Digitale Gesteinsphysik als auch Filtration verwendet werden.

Das Modul GrainFind-AI wurde verbessert, so dass eine genauere Analyse von 3D Bilddaten von Batterien, aber auch von anderen granularen Medien möglich ist. Dadurch wird für die Anwender die Qualität der digitalen Modelle erhöht.

In BinderFind-AI wurden während des Projektes zwei neuronale Netze implementiert, die die Identifikation der so genannten Binder & Carbon Black Domain in digitalen 3D Modellen ermöglichen. Diese Funktionalität als anwenderfreundliches Produkt ist weltweit einmalig und die Math2Market erwartet durch dieses Feature einen Zuwachs der Einnahmen mit diesem Modul um ca. 100% in den nächsten 5 Jahren.

In DiffuDict wurde ein numerisches Verfahren implementiert, um die anisotrope Diffusion in Graphit Anoden simulieren zu können.

Die Math2Market plant die im Projekt entstandenen GeoApps zur Erstellung von Digitalen Zwillingen von Batterie Elektroden allen Kunden zugänglich zu machen. Wir erwarten eine Umsetzung bis zum Jahr 2024. Diese Funktion bietet für alle Kunden im Bereich Batterien einen erheblichen Mehrwert und ist als kommerzielles Produkt weltweit einzigartig.

Durch die Publikation ausgewählter Projektergebnisse mit der HSAA konnte der Nutzen der Software GeoDict für die digitalen Entwicklung von Batterie Elektroden demonstriert werden. Durch diese Publikation erwarten wir, dass sich die Bekanntheit der Software entsprechend erhöht.

Das im Projekt gesammelte Wissen kommt in Kunden Projekten und in zukünftigen öffentlich geförderten Projekten zur Geltung. Insbesondere kann die Math2Market das gesammelte Wissen bei der Akquise von Neukunden einsetzen und in Pilot Projekten den gesteigerten Nutzen der Software für die Batterieentwicklung deutlich machen.

## WÄHREND DER DURCHFÜHRUNG DES VORHABENS BEKANNT GEWORDENEN FORTSCHRITTS AUF DEM GEBIET DES VORHABENS BEI ANDEREN STELLEN

Während der Durchführung des Vorhabens ist uns kein Fortschritt bekannt geworden, der bei anderen Stellen in dem die Math2Market betreffenden Bereich erzielt wurde.

## ERFOLGTE ODER GEPLANTE VERÖFFENTLICHUNGEN DES ERGEBNISSES

- Sandherr, Jens, et al. "Micro embossing of graphite-based anodes for lithium-ion batteries to improve cell performance." *Journal of Energy Storage* 65 (2023): 107359.

## UNTERSCHRIFTEN

---

Dr. Mathias Fingerle, Projektleiter  
Math2Market GmbH

---

Dr. Jürgen Becker, Prokurist  
Math2Market GmbH

Math2Market GmbH  
Richard-Wagner-Str. 1  
67655 Kaiserslautern, Germany  
Web: [www.math2market.de](http://www.math2market.de)