

Der vorliegende Beitrag wurde beim Deutschen Studienpreis 2022 mit dem 2. Preis in der Sektion Natur- und Technikwissenschaften ausgezeichnet. Er beruht auf der 2021 an der Rheinisch-Westfälischen Technischen Hochschule Aachen eingereichten Dissertation „Battery digital twin with physics-based modeling, battery data and machine learning“ von Dr. Weihan Li.

Machine Learning für effizienten Batterieeinsatz in Mobilität und Energieversorgung für nachhaltigen Klimaschutz

Nach den jüngsten Berichten der Vereinten Nationen über den Klimawandel stehen uns bei der derzeitigen Rate der CO₂-Emissionen nur noch wenige Jahre zur Verfügung, um den Temperaturanstieg wirksam einzudämmen und bis zum Jahr 2100 unter 1,5 °C zu halten. Für die Begrenzung des weltweiten Temperaturanstiegs und damit die Begrenzung des Klimawandels auf einem Niveau, dass die Ökosysteme und die menschliche Zivilisation nachhaltig sichern, ist eine grundlegende Umstellung der Energieversorgung weg von den fossilen Energieträgern Kohle, Öl und Erdgas hin zu erneuerbaren Energieträgern unvermeidbar. Durch die engagierte Arbeit von Forschenden, Unternehmen, Zivilgesellschaft und Staaten ist es in den letzten 40 Jahren gelungen, alternative Technologien zur Bereitstellung von Energie aus erneuerbaren Quellen zu entwickeln, zu etablieren und auf ein Kostenniveau zu bringen, sodass nach erfolgreicher Umstellung des Energiesystems langfristig nachhaltige und kostengünstige Energie zur Verfügung stehen wird. Während die fossilen Energieträger durch deren Verbrennung aber überwiegend zunächst Wärme bereitstellen, wird der überwiegende Teil der zukünftig eingesetzten Technologien Strom erzeugen. Letzteres gilt für Technologien wie Windkraft und Photovoltaik, aber auch für die Kerntechniken Fusion und Spaltung. Während die fossilen Energieträger aber gleichzeitig auch Speicher sind, lassen sich Wind und Sonnenstrahlung gar nicht speichern. Die Speicherung der nach der Umwandlung entstandenen elektrischen Energie ist aufwendig, mit Verlusten behaftet und teuer. Aber Strom hat von allen Energieformen die höchste Exergie und kann daher nahezu vollständig in direkten Nutzen (z.B. Licht, Antrieb, Kommunikation, Wärme) umgewandelt werden. Jede Umwandlung des Stroms in einen anderen Energieträger. - was z.B. über den Weg der Erzeugung von Wasserstoff und der Weiterprozessierung mit CO₂ in quasi jedes Äquivalent der bisher eingesetzten fossilen Energieträger in fester, flüssiger oder gasförmiger Form möglich ist. - führt zu erheblichen Verlusten. Die Umstellung vieler Anwendungen wie Fahrzeuge oder Heizungssysteme auf Strom als

primäre Energiequelle, führt aber zu erheblichen Veränderungen der Nutzungsgewohnheiten und vielleicht auch des Lebensstils der Menschen. Durch den Aufbau einer großen Zahl von Windkraftanlagen und Photovoltaik wird zudem das gewohnte Landschaftsbild verändert. Daher sind große Anstrengungen notwendig, um zusammen im Austausch mit allen Teilen der Bevölkerung über gangbare Wege der Energiewende zu diskutieren und Wege zu finden, die breite gesellschaftliche Akzeptanz erfahren. Dafür ist eine enge Zusammenarbeit zwischen Gesellschafts- und Politikwissenschaften, Wirtschaftswissenschaften, Bau-, Raum- und Landschaftsplanung sowie Natur- und Ingenieurwissenschaften notwendig.

Meine Kompetenz und Ausbildung als Ingenieurwissenschaftler erlaubt mir, aktiv an technischen Lösungen zu arbeiten, die die Hürden auf dem Weg der Energiewende so gering wie möglich halten. Mobilität durch Elektrofahrzeuge mit guter Batterietechnologie ermöglicht den Wechsel weg von Benzin und Diesel ohne große Anpassungen im Mobilitätsverhalten der Nutzer. Durch die effiziente Nutzung von Strom in vielen Anwendungsbereichen wird die Zahl der zu bauenden Windkraft- und Photovoltaikanlagen und damit auch der Ressourcenverbrauch an Stahl, Glas oder Baumaterialien so klein wie möglich gehalten. Dabei ist der Ansatz, den Nutzern eine Ersatztechnologie zur Verfügung zu stellen, die ihnen möglichst wenig Veränderungen des bisherigen Lebensstils bieten, nicht notwendigerweise der beste Weg. Eine Veränderung unseres Mobilitäts- oder Konsumverhaltens oder auch eine effizientere Nutzung von Wohnraum zur Reduzierung des Heizenergiebedarfs wären sicher wertvoll. Dies zu verändern liegt aber nicht in meiner Kompetenz. In meiner Dissertation habe ich mich damit beschäftigt, den Einsatz von Batterien in mobilen und stationären Anwendungen so zu verbessern, dass ein sicherer und langlebiger Betrieb möglich ist, was nachhaltig Kosten spart, den Einsatz von Ressourcen reduziert und Bequemlichkeit für die Nutzer bringt.

Der Kern meiner Dissertation beschäftigt sich mit Verfahren, den aktuellen Zustand von Batterien zu jedem Zeitpunkt zuverlässig zu bestimmen. Dazu gehört neben einem sehr guten Verständnis der inneren Prozesse in einer Batterie auch der Einsatz von Verfahren der künstlichen Intelligenz und hier insbesondere des Machine Learnings. Die internen Prozesse einer Batterie sind hochgradig nichtlinear und kleinste Änderungen in der Produktion oder in Betriebsbedingungen auch innerhalb eines Batteriesystems führen dazu, dass die Alterung der Batteriezellen sich stark unterscheiden kann. Stand der Forschung ist, dass es keine klassischen physikalisch-chemischen Modelle gibt, die Lebensdauer und Alterungsfortschritt für jede individuelle Zelle vorhersagen können. Verfahren des Machine Learnings helfen dabei, im laufenden Betrieb die Batteriezellen zu monitoren und daraus Prognosen für die nähere und weitere Zukunft zu erstellen. Der Vergleich mit einer sehr großen

Zahl von Systemen durch Analysen in der Cloud ermöglicht es, Muster zu erkennen und frühzeitig Entwicklungen, die zu Sicherheitsrisiken führen können, ebenso wie die zu erwartende Restlebensdauer vorhersagen zu können. Darüber hinaus können aus der Analyse einer großen Zahl von Systemen auch Optimierungen für Betriebsstrategien und Ladeverfahren abgeleitet werden, die wiederum zu einer Lebensdauererweiterung führen. Jede Lebensdauererweiterung ist aber eine direkte Einsparung von Material- und Energieressourcen und reduziert damit den Druck auf den Ausbau von Bergwerken und Energiewandlungsanlagen weltweit. In den folgenden Abschnitten wird die Bedeutung für die Ingenieurwissenschaften und die Gesellschaft von drei Ansätzen vorgestellt, bei denen Machine Learning die Batterienutzung im mobilen und stationären Bereich ohne materiellen Ressourceneinsatz ganz wesentlich verbessert.

Online-Alterungsdiagnostik mit neuronalen Netzen

Die Alterung von Lithium-Ionen-Zellen wird durch eine Vielzahl physikalischer und chemischer Mechanismen verursacht, die verschiedene Komponenten der Zelle betreffen. Infolgedessen lässt die Fähigkeit der Zelle, Energie zu speichern und Leistung abzugeben, nach, bis die Zellen das Ende ihrer Lebensdauer erreichen. Eine genaue Abschätzung der Alterung ist für den Betrieb, die Wartung und die Optimierung der Zelle unerlässlich, aber die Überwachung der Alterung ist aufgrund der komplexen und nichtlinearen Mechanismen, die der Alterung der Zelle zugrunde liegen, eine schwierige Aufgabe. Im Labor können wir Post-Mortem-Analysen durchführen, indem wir die Zellen öffnen und die Materialveränderungen analysieren. Diese invasiven Methoden können allerdings nicht für Zellen in Anwendungen wie z.B. Elektrofahrzeugen verwendet werden und eine Online-Diagnoseansatz im Betrieb muss für die Kundenakzeptanz möglich sein. Der in der Industrie am weitesten verbreitete Online-Diagnoseansatz ist die Parametrisierung eines Batteriemodells. Die Identifizierung und Abstimmung der Parameter des Modells, sodass es alle zugrunde liegenden Alterungsmechanismen der Zellen erfasst, ist eine anspruchsvolle und oft rechenintensive Aufgabe.

Für das hier entwickelte Online-Alterungsdiagnoseverfahren werden die Messdaten von Strom, Spannung und Temperatur, die in jedem Batteriesystem erfasst werden, während verschiedener Ladephasen analysiert. Ladephasen treten im Betrieb regelmäßig auf und die Veränderungen der Auswirkung des Ladevorgangs auf die Messparameter über die Betriebsdauer enthalten Informationen über den Alterungszustand. Für die Analysen dieser Veränderungen werden neuronale Netze eingesetzt. Dazu können nicht nur die Daten von vollständigen Aufladungen, sondern

auch von Teilladungen, die wesentlich häufiger auftreten, genutzt werden. Das neuronale Netz adaptiert sich selbstständig auf unterschiedliche Batteriegrößen und eingesetzte Materialien. Die Validierung des Modells mit einem kommerziell verfügbaren Chip, der auf Operationen des Machine Learnings optimiert ist, zeigt die Leistungsfähigkeit des Ansatzes auch auf kostengünstiger Hardware, die in Batteriemanagementsystemen eingesetzt werden kann.

Dies ist die erste Arbeit, die neuronale Netze einsetzt, um aus online erfassten Zeitreihen von Strom und Spannung während Teilladevorgängen eine Schätzung der noch vorhandenen Kapazität zu bestimmen. Das Training der neuronalen Netze erfolgt in der Cloud. Dies ermöglicht es, auch die Daten einer großen Zahl gleicher Batteriesysteme zu nutzen. Die Analyse eines Ladevorgangs dauert kaum 2 Sekunden und damit weniger als ein Tausendstel eines typischen Ladevorgangs. Die Analyse mithilfe des neuronalen Netzes ist zudem sehr robust gegenüber Rauschen und Ungenauigkeiten bei der Vermessung der Batterie, was das Verfahren für den Feldeinsatz besonders robust macht.

Sicherer Batterieeinsatz durch Vorhersage der Lebensdauer

Neben der Online-Alterungsdiagnostik ist auch die Vorhersage des zukünftigen Alterungsverlaufs für eine sichere und effiziente Batterienutzung von großer Bedeutung. Eine genaue Vorhersage der verbleibenden Lebensdauer der Batterien in einem frühen Stadium ist nicht nur für die Wartung, Sicherheit und Optimierung der Anwendungen von Vorteil, sondern dient auch als Ausgangspunkt für die technische und wirtschaftliche Analyse möglicher Zweitnutzung, wozu auch der Weiterverkauf von Gebrauchtfahrzeugen und damit eine optimale Nutzung der bei der Herstellung eingesetzten Ressourcen gehört. Eine genaue Vorhersage der zukünftigen Alterung ist jedoch keine triviale Aufgabe, da die Alterung ein komplexer, nicht linearer Prozess mit verschiedenen stark untereinander wechselwirkenden internen Mechanismen ist, deren Dynamik nur schwer zu messen und genau zu modellieren ist. Unter den Stressfaktoren für die Batteriealterung können intrinsische Fertigungsschwankungen zu einem starken Leistungsunterschied vor allem im letzten Drittel der Lebensdauer der Batterien führen. Diese durch intrinsische Varianzen verursachte Alterungsvariabilität lässt sich mit herkömmlichen physikalischen Modellen nur schwer modellieren.

Mithilfe von Machine Learning haben wir einen datengesteuerten Ansatz für die Prognose des Batteriezustands entwickelt, mit dem sich der künftige Alterungsverlauf direkt vorhersagen lässt. Der Modell-Input ist die Kapazitätszeitreihe bis zum aktuellen Zeitpunkt, wie sie von den Batteriemanagementsystemen bestimmt wird.

Vorteilhaft ist, dass keine weiteren Merkmale oder Merkmalsauswahlverfahren erforderlich sind. Der Modell-Output ist die zukünftige Kapazitätsentwicklung der Zelle bis zum Ende der Lebensdauer und damit der Fähigkeit, eine bestimmte Reichweite zu erreichen oder einen Verbraucher über eine bestimmte Dauer zu versorgen. Mit dieser Prognose kann auch vorhergesagt werden, wie lange die aktuelle Nutzung fortgesetzt werden kann und welches Potential sich für die Zweitnutzung ergibt. Dies berücksichtigt auch die ab einem bestimmten Punkt („Knickpunkt“) einsetzende beschleunigte Alterung. Das Modell erkennt schon während der etwa ersten 100 Zyklen und damit weniger als 10% der zu erwartenden Lebensdauer die Fertigungsunterschiede und die daraus folgende Variabilität der zu erwartenden Lebensdauer. Die Prognosegenauigkeit verbessert sich weiter in fortschreitender Betriebsdauer. Es konnte gezeigt werden, dass mit den im Batteriemanagementsystem einsetzbaren Chips mit den neuen Verfahren wesentlich bessere Prognosegenauigkeiten bei gleichzeitig etwa 15-fach schnellerer Rechengeschwindigkeit in Vergleich zu den bisher eingesetzten Modellen erreicht werden. Diese Arbeit unterstreicht die Effektivität von datengesteuerten Ansätzen im Bereich der Alterungsprognostik. Mit dem Modell können auch verschiedene Batteriemodule in einem Batteriesystem analysiert und bewertet werden, sodass aus der unterschiedlichen Leistungsfähigkeit der einzelnen Module individuelle und kontinuierlich im laufenden Betrieb aktualisierte und optimierte Betriebsstrategien für eine Maximierung der Lebensdauer abgeleitet und entsprechend eingesetzt werden. Aus technischer Sicht sind die Modelle sehr robust bezüglich Messfehlern und Messrauschen.

In der Anwendung werden die Daten jeder Zelle mit einer bestimmten ID an einen Server gesendet, sodass ein eindeutiger „Zellenpass“ erstellt werden kann, der für die Verfolgung der Leistung über die gesamte Lebensdauer nützlich ist und auch die Bereitstellung von Over-the-Air-Update für die Modelle ermöglicht. Der „Zellenpass“ bietet auch einen Mehrwert für First- und Second-Life-Anwendungen durch die Erfassung von Nutzungsinformationen während der gesamten Lebensdauer jeder Zelle. Dies führt zu interessanten Entwicklungen bei Batteriegarantien und Versicherungen. Ein effektives und an den realen Kosten orientiertes Versicherungsangebot ist gerade im Bereich der Kompakt- und Mittelklassewagen von hoher sozialer Bedeutung, denn ein Batterieschaden wäre aufgrund der hohen Kosten in den meisten Fällen der wirtschaftliche Totalschaden des Fahrzeugs. Ohne entsprechende Versicherungen würde dies vor allem für den Bevölkerungsteil mit geringeren Einkommen ein untragbares wirtschaftliches Risiko bedeuten. Gleichzeitig wird durch die Online-Diagnostik der Bedarf an teuren technischen Tests bei entsprechenden Dienstleistern erheblich verringert.

Selbstlernende Betriebsstrategie mit Reinforcement Learning

Die Betriebsstrategie von Batteriesystemen bestimmt direkt die aktuelle Belastung, die Entladetiefe, den Ladezustand und das thermische Verhalten jeder Zelle. Dies sind auch die Stressfaktoren, die Einfluss auf die Batteriealterung haben. Erhebliche Batteriealterung sowie eine hohe Stromstärke und Temperatur können auch zu Sicherheitsproblemen führen. Daher ist eine sicherheits- und alterungsorientierte Betriebsstrategie von entscheidender Bedeutung. Da sich die Betriebsumgebung ändert und nur schwer vorhergesagt werden kann, besteht die größte Herausforderung darin, die Betriebsstrategie durch das Erlernen mehrerer Umweltzustandsänderungen kontinuierlich zu bewerten und anzupassen.

Im Allgemeinen basieren moderne Betriebsstrategien entweder auf vorgegebenen empirischen Regeln, was zu Lösungen führen kann, die weit von dem Optimum entfernt sind, oder es fehlt die Lernfähigkeit für sich ändernde Nutzungsszenarien und das individuelle Alterungsverhalten. Lernbasierte Methoden, wie z.B. das Reinforcement Learning, können aus historischen Erfahrungen lernen und das Kontrollschema durch die Interaktion mit der Umgebung schrittweise optimieren, was zu selbstangepassten Betriebsstrategien für unterschiedliche Fahrbedingungen führt. Reinforcement Learning ist ein Teilgebiet des Machine Learnings, bei dem ein Agent selbstständig eine Strategie erlernt, um die erhaltene Belohnung zu maximieren. Der Agent hat eigenständig erlernt, in welcher Situation welche Aktion die beste ist. Zudem erlauben die Verfahren die Nutzung der Erkenntnisse aus einer großen Zahl von Systemen, die in der Cloud zusammengetragen werden können.

Auf der Grundlage der von uns entwickelten Diagnose- und Prognosemodelle für Batterien haben wir eine selbstlernende Betriebsstrategie für Batteriesysteme mittels Reinforcement Learning entwickelt. Um die reale Dynamik des Batteriesystems, wie z.B. Temperatur und Alterungsverlauf im realen Betrieb, zu erforschen und um die anwendungsorientierten Lastprofile zu erstellen, haben wir eine große Menge an realen Fahrdaten gesammelt. Neben dem elektrothermischen Modell wurde das experimentelle Alterungsmodell der Zellen implementiert, das sowohl die Kapazitäts- als auch die Leistungsreduktion durch kalendarische und zyklische Alterung berücksichtigt, mit dem Ziel, die reale Dynamik der Batterie genau zu simulieren. Es wurde eine neue Belohnungsfunktion entwickelt, die einerseits die elektrische und thermische Sicherheit erhöht und andererseits den Energieverlust und die äquivalenten Alterungskosten verringert. Die vorgeschlagene alterungsminimierende Strategie wurde im Rahmen eines Vehicle-to-Cloud-Konzepts trainiert und an einem kostengünstigen eingebetteten System mit realen Fahrdaten validiert. Sie übertrifft

die modernsten Strategien in Bezug auf Trainingseffizienz, Energieverlustreduzierung und Alterungsabschwächung.

Der entwickelte Ansatz für die Optimierung der Betriebsstrategie bietet hervorragende Möglichkeiten zur Verbesserung der Energieeffizienz, der Materialeffizienz und zur Senkung der Lebenszykluskosten. Insgesamt werden für die Analysen Daten der Verkehrsinfrastruktur und des Verkehrsaufkommens, des Wetters und der Belegung der Ladestation verknüpft, um für anstehende Fahrten und Speichernutzungen aus den historischen Daten zuverlässige Prognosen ableiten und in Echtzeit die Betriebsstrategien an die dynamischen Rahmenbedingungen anpassen zu können. Damit bietet die von uns entwickelte Methode das Potenzial, die gesellschaftliche Akzeptanz von Elektrofahrzeugen mit begrenzter Reichweite durch optimierte Betriebsstrategien fundamental zu steigern.

Fazit und Ausblick

Der Hauptbeitrag meiner Dissertation ist es, die Batteriediagnostik und damit die Batterienutzung auf eine neue Ebene zu bringen. Der Einsatz von Machine Learning in verschiedenen Bereichen von der Zellebene bis zur Systemebene bringt in diesem Bereich einen erheblichen Zusatznutzen für die Betreiber, Eigner und Nutzer von Anwendungen mit Batterieanlagen sowohl im Mobilitätsbereich wie auch in stationären Speichersystemen als Elemente von Energiesystemen mit erneuerbaren Energien. Diese Arbeit ermöglicht die Online-Überwachung des internen Alterungsgrades, die Vorhersage des Alterungsverlaufs und die Optimierung der Betriebsstrategie durch Begrenzung der Alterung, was für einen sicheren und zuverlässigen Betrieb von Batteriesystemen von entscheidender Bedeutung ist. Die in dieser Arbeit vorgestellten Lösungen erfüllen die Hauptanliegen der Akteure im Bereich der Energiespeicherung und tragen zur Beschleunigung der Energiewende und insbesondere der Elektrifizierung des Verkehrs bei. Sie leisten nicht nur einen Beitrag zur Forschung, sondern haben weitreichende Auswirkungen auf verschiedenste Industriezweige und eröffnen neue kommerzielle Möglichkeiten, wie z.B. digitale Zertifikate für Batterien, Batteriegarantien und -versicherungen sowie vorausschauende Wartung und rechtzeitige Warnung vor sicherheitskritischen Zuständen. Die entwickelte Methodik vereinfacht den Einsatz von Batterien in mobilen und stationären Anlagen erheblich und macht den internen Zustand und den Betrieb für die Nutzer transparenter. Damit liefert die Arbeit einen wesentlichen Baustein für eine breite Akzeptanz und Durchsetzung von klimaschonender Mobilität und Energieversorgung auf dem Weg zu einem klimaneutralen Energiesystem.

Die Arbeit wurde am Lehrstuhl für Elektrochemische Energiewandlungs- und Speichersysteme an der RWTH Aachen unter der Betreuung von Prof. Dirk Uwe

Sauer und Prof. Venkat Viswanathan von der Carnegie Mellon University, USA, durchgeführt. Aufgrund der großen wissenschaftlichen Bedeutung dieser Arbeit wurden die Ergebnisse in 11 Artikeln in renommierten Fachjournals veröffentlicht, bei denen ich sowohl Erstautor als auch korrespondierender Autor bin. An weiteren 12 Veröffentlichungen in teils interdisziplinären Teams habe ich als Autor mitgewirkt. Wir arbeiten auch mit internationalen Forscherinnen und Industriepartnern zusammen, um die in dieser Arbeit entwickelten Methoden auf der Grundlage von drei kommerziellen Patenten zu vermarkten, die ich als Ersterfinder angemeldet habe. Ich bin davon überzeugt, dass diese Arbeit mehr und mehr Anwendungen von Machine Learning im Energiesektor und in anderen Bereichen inspiriert und die Wissenschaft dadurch weiter gehende Antworten auf die Probleme der Gesellschaft liefern kann.