WESTFÄLISCHE
WILHELMS-UNIVERSITÄT
MÜNSTER

# Die Modellierung einer Lithium-Batterie

Abschlusspräsentation zum Praktikum “Nichtlineare Modellierung in den Naturwissenschaften”

wissen.leben
WWU Münster

Christoph Fricke, Natascha von Aspern, Carla Tameling

03.08.2012

# Inhalt

Das Modell

Differentialgleichungen

Finite Volumen Verfahren

stationäre Lösung

# Aufbau

Lithiumfolie als Anode, fester Elektrolyt, poröse Kathode

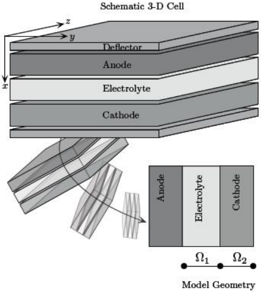


Abbildung: Modell der Batterie

# PDE I

Im Inneren der Gebiete benötigt man folgende partielle Differentialgleichungen, **Massenbilanzgleichung**:

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = -\frac{\partial J_i}{\partial X_j} \tag{1}$$

Fluss der geladenen Teilchen im Elektrolyt:

$$J_{Li^+} = -\left( D_{Li^+} \frac{\partial C_{Li^+}}{\partial X_1} + \mu_{Li^+} C_{Li^+} \frac{\partial \Phi}{\partial x_1} \right) \tag{2}$$

Aus (8) und (9) folgt die **Advektions-Diffusions-Gleichung**

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = D_{Li^+} \frac{\partial^2 C_{Li^+}}{\partial X_1^2} + \mu_{Li^+} \frac{\partial}{\partial X_1} \left( C_{Li^+} \frac{\partial \Phi}{\partial X_1} \right) \tag{3}$$

# PDE II

Fluss der entladenen Teilchen in der Kathode:

$$J_{Li} = -D_{Li} \frac{\partial C_{Li}}{\partial X_2} \tag{4}$$

Aus (8) und (11) folgt die **Diffusionsgleichung**

$$\frac{\partial C_{Li}}{\partial t} = D_{Li} \frac{\partial^2 C_{Li}}{\partial X_2^2} \tag{5}$$

# PDE III

Das elektrische Potential im Elektrolyt ergibt sich wegen des Gauß-Gesetzes $E = -\partial_{X_1}\Phi$ durch die **Possion-Gleichung**

$$-\epsilon_b \frac{\partial^2 \Phi}{\partial X_1^2} = \rho \tag{6}$$

Dabei gilt für die Ladungsdichte

$$\rho = F(C_{Li^+} - C_A) \tag{7}$$

$F$ ist die Faraday-Konstante, $C_A$ die (konstant angenommene) Anionen-Konzentration im Elektrolyt und $\epsilon_b$ die dielektrische Feldkonstante.

# Was ist das Finite Volumen Verfahren?

- Numerisches Verfahren zur Lösung partieller DGL 2. Ordnung
- Basiert auf der Integralformel einer PDGL, wir integrieren über eine Zeitintervall $(t_j, t_{j+1})$ und ein Gitterzelle $K_i$

# Herleitung I

Mit dem Hauptsatz der Integral- und Differntialrechnung und den Sätzen von Fubini und Gauß folgt:

$$
\begin{aligned}
\int_{K_i}\int_{t_j}^{t_{j+1}} f(x,t)dtdx &= \int_{K_i}\int_{t_j}^{t_{j+1}} \partial_t u(x,t) - \nabla\cdot(a(x)\nabla u(x,t)dtdx \\
&= \int_{K_i} u(x,t_{j+1}) - u(x,t_j)dx \\
&\quad - \int_{\partial K_i}\int_{t_j}^{t_{j+1}} a(x)\nabla u(x,t)\cdot n(x)dtdx
\end{aligned}
$$

# Herleitung II

Durch Einführen der Zellmittelwerte $u_i(t) := \frac{1}{|K_i|} \int_{K_i} u(x,t)dx$ und $f_i(t) = \int_{K_i} f(x,t)dx$, der Defintion des Randes und der Diskretisierung der Normalenableitung durch die entsprechende fintie Differnez unter der Verwendung der Zellmittelpunkte ergibt sich dann:

$$u_i(t_{j+1}) - u_i(t_j) = \frac{1}{|K_i|} \int_{t_j}^{t_{j+1}} a(x_{i+1}) \frac{u_{i+1}(t) - u_i(t)}{s_{i+1} - s_i} + a(x_i) \frac{u_{i-1}(t) - u_i(t)}{s_i - s_{i-1}} + f_i(t)dt$$

# Testproblem I

Differentialgleichung:

$$\partial_t u(x,t) - 0.01\Delta u(x,t) = f(x,t)$$

mit Randwerten $\nabla u \cdot n = 0$, der Anfangsbedingung

$$u(x,0) = e^{-25(x-0.5)^2} - e^{-6.125}$$

und dem Quellterm

$$f(x,t) = 0.7x - 0.3t$$

Weitere Daten:

- $\Omega = [0,1]$
- $T = 3$

# Testproblem II

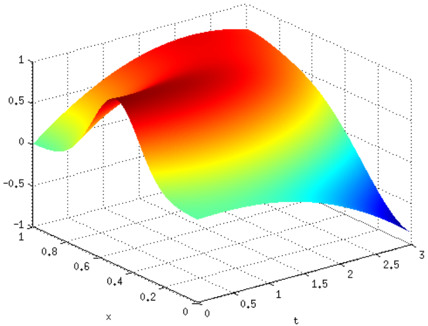


Abbildung: Lösung des Testproblems

# System der PDE für die stationäre Lösung

Für den Zustand der voll aufgeladenen Batterie muss man folgende gekoppelte PDEs lösen:

$$
\begin{aligned}
0 &= D_{Li^+} \frac{\partial^2}{\partial x_1} c(x_1) + D_{Li^+} \frac{\partial}{\partial x_1} \left( c(x_1) \frac{\partial}{\partial x_1} \phi(x_1) \right) \\
0 &= \epsilon^2 \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} \phi(x_1) + \frac{1}{2} (c(x_1) - c_A)
\end{aligned}
$$

# Randbedingungen für die stationäre Lösung

Für das stationäre System braucht man dann noch die folgenden Randbedingungen:

$$D_{Li^+}\frac{\partial}{\partial x_1}c(x_1) + D_{Li^+}c(x_1)\frac{\partial}{\partial x_1}\phi(x_1) = 0, \qquad x_1 \in \{0,1\}$$

$$\frac{\partial}{\partial x_1}\phi(0) + \frac{1}{\gamma\epsilon}\phi(0) = \phi_0$$

$$\frac{\partial}{\partial x_1}\phi(1) + \frac{1}{\gamma\epsilon}\phi(1) = 0$$

$$\int_0^1 c(x_1)dx_1 = c_A$$

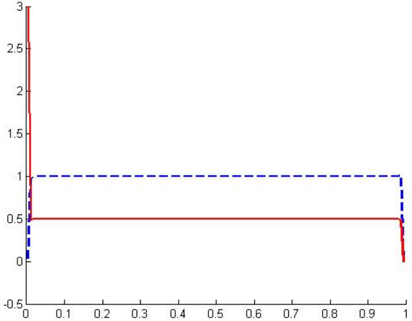


Abbildung: Konzentrations- und Potentialkurve der stationären Lösung

# Vielen Dank für die Aufmerksamkeit!