

Masterarbeit

Asymptotische Homogenisierung – Virtuelles Elektrodendesign von Li-Ionen- Batterien

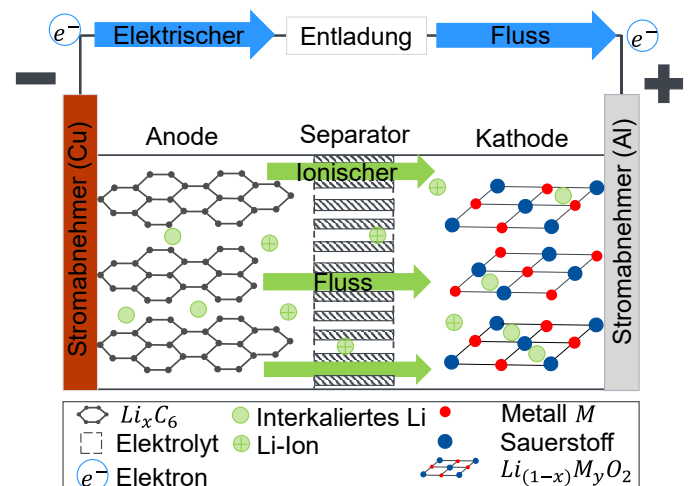
Prof. Dr.-Ing. Ulrich Nicken
 Böblinger Straße 78
 70199 Stuttgart

Stuttgart, 03.11.2021

Motivation

Im Kommunikations-, Mobilitäts- oder dem Medizinsektor spielen Li-Ionen-Batterien bereits seit mehreren Jahrzehnten eine fundamentale Rolle. Mit der voranschreitenden Elektrifizierung, wie zum Beispiel im Mobilitätssektor, wird sich der Anwendungsbereich dieser Batterien zukünftig weiter vergrößern.

In vielen dieser potenziellen Anwendungen kann die gewünschte Leistungsfähigkeit der Batterien aufgrund auftretender Transportlimitierungen nicht abgerufen werden. Ein Werkzeug, um diese Limitierungen zu verringern und somit die Leistungsfähigkeit zu steigern, ist die Optimierung der Elektrodenstruktur mit Hilfe eines virtuellen Materialdesigns. Um diese Optimierung durchzuführen, muss das Batterieverhalten während der Be- bzw. Entladung mit angemessenem Aufwand modelliert werden können.



Die dafür zu Verfügung stehende Batteriemodelle lassen sich in Mikro- und Makroskalenmodelle aufteilen. Die Mikroskalenmodelle sind dabei aufgrund des zu hohen Rechenaufwands ungeeignet. Daher wurde in der bisherigen Arbeit¹ ein Mikroskalenmodell über eine mathematische Mittelungsoperation – der sogenannten Asymptotischen Homogenisierung – in ein Makroskalenmodell überführt.

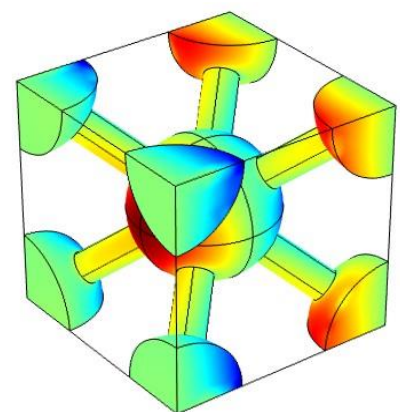
In dieser Arbeit wurden die Ergebnisse des homogenisierten Makroskalenmodells mit denen eines Mikroskalenmodells verglichen. Dabei ergab sich, dass entscheidende Transportprozesse der Mikroskala nicht im Makroskalenmodell abgebildet werden konnten.

Aufgabenstellung

Im Rahmen dieser Arbeit soll das bisher bestehende Makroskalenmodell durch einen anderen Homogenisierungsansatz modifiziert werden, sodass die entscheidenden Transportprozesse der Mikroskala berücksichtigt werden können.

Arbeitspakete:

- Einarbeitung in die Elektrochemie, Thermodynamik und der damit verbundenen Transportprozesse
- Herleitung der modifizierten asymptotischen Homogenisierung des Batteriemodells
- Implementierung des Batteriemodells



¹ Giuliano Lombardo. Vergleich des Full-Homogenized – und Doyle-Fuller-Newman – Modells hinsichtlich der Anwendbarkeit für das digitale Elektrodendesign von Li-Ionen-Batterien. Masterthesis, Universität Stuttgart, 2021

- Validierung der Modellergebnisse anhand der Daten des Mikromodells
- Virtuelles Materialdesign anhand der Elektrodenstruktur

Qualifikation und Vorkenntnisse

- Freude am Erlernen neuer mathematischer Lösungsmethoden
- Interesse an mathematischer Modellierung und elektrochemischen Batteriesimulationen
- Kenntnisse in Thermodynamik, Numerische Methoden sowie der Modellierung verfahrenstechnischer Prozesse (MVP)
- Erfahrung im Programmieren (Matlab, Python, C, etc.)

Ansprechpartner

Giuliano Lombardo, Raum 2.042, Böblingerstr. 78, Stuttgart, giuliano.lombardo@icvt.uni-stuttgart.de