

# Einführung in das Wissenschaftliche Rechnen

## Praktikumsblatt 10

### Aufgabe 23 (Phasen-Separation in Elektrodenpartikeln)

Lena Hilpp Matr.Nr.: 1941997  
Jan Frithjof Fleischhammer Matr.Nr.: 2115491

09.07.2020

#### Problemstellung

In dieser Aufgabe modelliert man die Einlagerung von Lithium in Elektrodenpartikel von Lithium-Ionen Batterien.  $\Omega = (0, 1)$  ist das Gebiet des Elektrodenpartikels über dem die Einlagerung stattfindet. Bis zur Zeit  $T = 0.98$  werden die Partikel mit einem uniformen Ladestrom,  $\mu^N = -1$ , geladen. Folgendes Anfangswertproblem wird betrachtet:

$$\begin{cases} \partial_t c = \nabla(m \nabla \mu) & \text{in } (0, T) \times \Omega \\ \mu = f'(c) - \kappa \Delta c & \text{in } (0, T) \times \Omega \\ \nabla c \cdot \mathbf{n} = 0 & \text{in } (0, T) \times \partial\Omega \\ \nabla \mu \cdot \mathbf{n} = 0 & \text{in } (0, T) \times \partial\Omega \\ \nabla \mu \cdot \mathbf{n} = \mu^N & \text{in } (0, T) \times \partial\Omega \\ c(0, \cdot) = c_0 & \text{in } \Omega, \end{cases}$$

mit  $m = 1$ ,  $\kappa = 5 \times 10^{-3}$  und der chemischen freien Energiedichte  $f(c) = 4.5c(1-c) + c \log(c) + (1-c) \log(1-c)$  und  $c_0 = 0.01$ .

Die Diskretisierung der zwei gekoppelten PDEs mit Finiten-Elementen führt auf das System

$$\begin{aligned} M \partial_t c_h &= -m S \mu_h + m \mu^N \\ M \mu_h &= M f'(c_h) + \kappa S c_h. \end{aligned}$$

Dieses Problem wird mit Hilfe eines *MATLAB*-ODE-Löser gelöst und die theoretische und tatsächliche Energiedichte gegenüber dem Ladezustand geplottet.

#### Ergebnis

Da hier ein steifes Problem vorliegt wird der Löser *ODE15s* verwendet. Mit diesem erhält man die Lösung  $u_h$ , zu verschiedenen Zeitpunkten, die man in *Abbildung 1* sehen kann. Man kann die zeitliche Entwicklung der Einlagerung von Lithium in das Elektrodenpartikel deutlich erkennen. Das Gebiet ist zu jedem Zeitpunkt in zwei Teile geteilt.

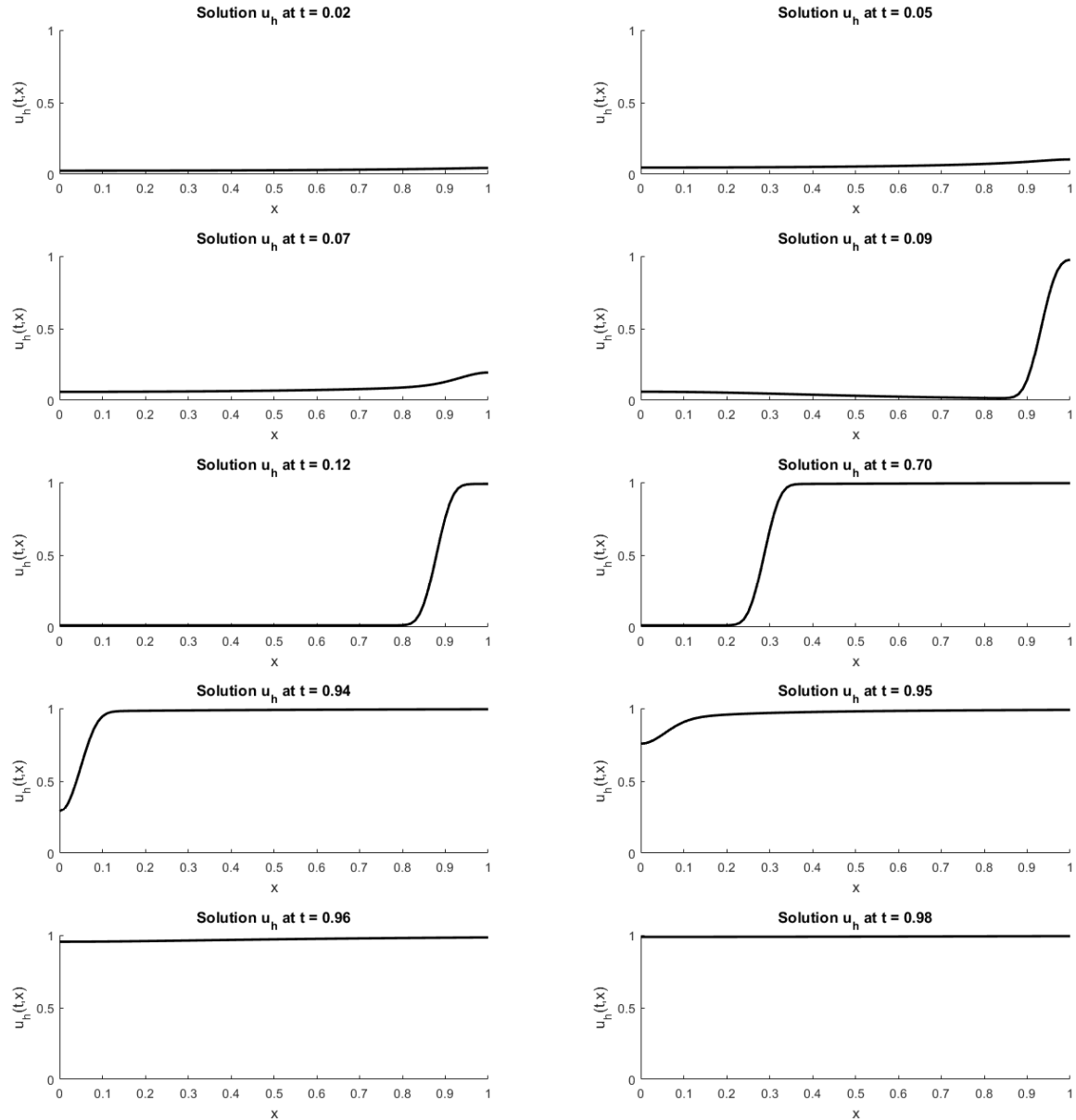


Abbildung 1: numerische Lösung  $u_h$  zu verschiedenen Zeiten

Verwendet wurde der Polynomgrad  $pd = 2$  und  $n_{cpd} = 50$  Zellen pro Raumdimension. Diese Triangulierung zeigt das erste Bild in *Abbildung 2*. Die weiteren Bilder in dieser Abbildung sind beispielhaft für  $pd = 1$  mit  $n_{cpd} = 10$  und  $pd = 2$  mit  $n_{cpd} = 10$ . Hier kann man erkennen, dass man bei höherem Polynomgrad Zwischenstellen erhält.

Da die Faustregel gilt, dass die Breite des Phasenübergangs  $\sim \sqrt{\kappa}$  mindestens mit 10 Freiheitsgraden aufgelöst sein soll, ergibt sich für lineare Finite Elemente ( $pd = 1$ ) eine Schranke  $n_{cpd} = \frac{10}{\sqrt{\kappa}}$ . Für größere Polynomgrade braucht man aufgrund der hinzukommenden Zwischenstellen weniger Zellen pro Raumdimension ( $n_{cpd}$ ).

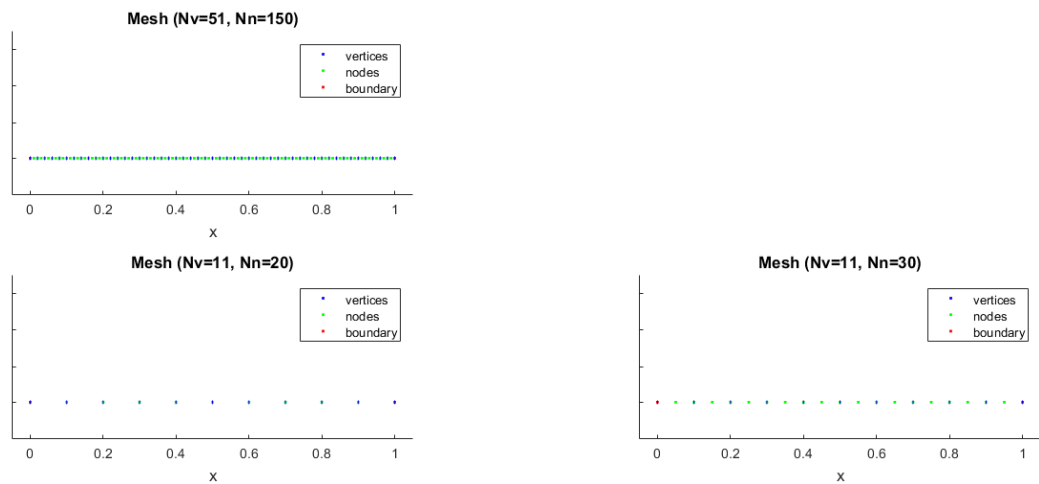


Abbildung 2: verschiedene Triangulierungen

In *Abbildung 3* ist die theoretische chemische freie Energiedichte und die tatsächliche freie Energiedichte des Systems gegenüber dem Ladezustand des Partikels in einem Plot aufgetragen.

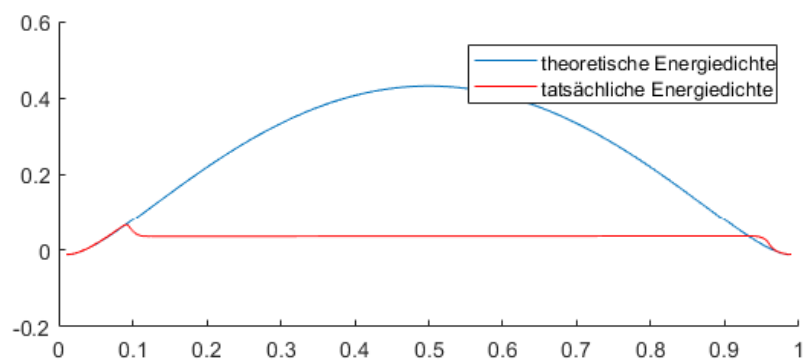


Abbildung 3: theoretische und tatsächliche Kurve