



Berner Fachhochschule  
Haute école spécialisée bernoise  
Bern University of Applied Sciences

# LiFE

## Batteriesimulation mit FEniCS

Autor: Marcel-David Zwahlen

Biel, 19. August 2020

# Inhalt

- ▶ Einleitung
- ▶ Mathematisches Modell
- ▶ Implementation
- ▶ Validierung
- ▶ Schlussbemerkung

# Einleitung

# Einleitung

- ▶ Simulationen werden in vielen Ingenieursdisziplinen verwendet, um neue Produkte zu entwickeln und um das Verständnis über diese Produkte zu erhöhen
- ▶ Simulationen können den Entwicklungsprozess folgendermassen vereinfachen:
  - ▶ Vermindern der Anzahl nötigen Prototypen
  - ▶ Schnelles und sicheres Testen von neuen Ideen

# Einleitung

- ▶ Simulationen werden in vielen Ingenieursdisziplinen verwendet, um neue Produkte zu entwickeln und um das Verständnis über diese Produkte zu erhöhen
- ▶ Simulationen können den Entwicklungsprozess folgendermassen vereinfachen:
  - ▶ Vermindern der Anzahl nötigen Prototypen
  - ▶ Schnelles und sicheres Testen von neuen Ideen
- ▶ Auch für die Batterieentwicklung können Simulationen von grossem Nutzen sein

# Mathematisches Modell

# Batteriemodelle

# Batteriemodelle

- ▶ Es gibt vier Grundtypen von Batteriemodellen:
  - ▶ Analytische Modelle
  - ▶ Elektrische Ersatzschaltungsmodelle (ECM)
  - ▶ Elektrochemische Modelle
  - ▶ Datenbasierte Modelle



# Batteriemodelle

- ▶ Es gibt vier Grundtypen von Batteriemodellen:
  - ▶ Analytische Modelle
  - ▶ Elektrische Ersatzschaltungsmodelle (ECM)
  - ▶ Elektrochemische Modelle
  - ▶ Datenbasierte Modelle
- ▶ Für die Forschung bieten die elektrochemischen Modelle den grössten Nutzen

# P2D-Modell

# P2D-Modell

- ▶ Das P2D-Modell wurde in den 1990ern Jahren von Doyle, Fuller und Newman entwickelt und wurde seitdem in vielen wissenschaftlichen Arbeiten verwendet

## P2D-Modell

- ▶ Das P2D-Modell wurde in den 1990ern Jahren von Doyle, Fuller und Newman entwickelt und wurde seitdem in vielen wissenschaftlichen Arbeiten verwendet
- ▶ Insgesamt müssen vier partielle Differentialgleichungen gelöst werden, die mit einer Butler-Volmer-Gleichung gekoppelt sind

## P2D-Modell

- ▶ Das P2D-Modell wurde in den 1990ern Jahren von Doyle, Fuller und Newman entwickelt und wurde seitdem in vielen wissenschaftlichen Arbeiten verwendet
- ▶ Insgesamt müssen vier partielle Differentialgleichungen gelöst werden, die mit einer Butler-Volmer-Gleichung gekoppelt sind
- ▶ Das Modell kann mit einer Wärmeleitungsgleichung erweitert werden, um die Temperaturabhängigkeiten der Batterie abzubilden

# P2D-Modell

## Geometrie

Das P2D-Modell betrachtet eine Dimension  $x$  in der Zellebene und eine Dimension  $r$  in der Partikelebene

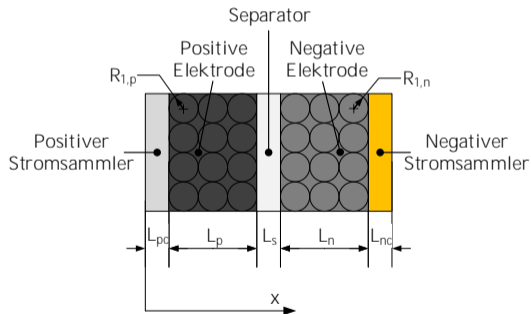


Abbildung 1: Geometrie für das P2D-Modell

## P2D-Modell: Gleichungen

Lithiumkonzentration in den Aktivmaterialpartikeln  $c_1$

Die Diffusion von Lithium in den Aktivmaterialpartikeln lässt sich durch das erste Ficksche Gesetz in sphärischen Koordinaten beschreiben:

$$\frac{\partial c_{1,i}}{\partial t} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( D_{1,i} r^2 \frac{\partial c_{1,i}}{\partial r} \right), \quad i = p, n \quad (1)$$

## P2D-Modell: Gleichungen

### Lithiumkonzentration in den Aktivmaterialpartikeln $c_1$

Die Diffusion von Lithium in den Aktivmaterialpartikeln lässt sich durch das erste Ficksche Gesetz in sphärischen Koordinaten beschreiben:

$$\frac{\partial c_{1,i}}{\partial t} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( D_{1,i} r^2 \frac{\partial c_{1,i}}{\partial r} \right), \quad i = p, n \quad (1)$$

Die nötigen Randbedingungen sind:

$$-D_{1,i} \frac{\partial c_{1,i}}{\partial r} \Big|_{r=0} = 0, \quad i = p, n \quad (2a)$$

$$-D_{1,i} \frac{\partial c_{1,i}}{\partial r} \Big|_{r=R_{1,i}} = \frac{J_i}{a_i F}, \quad i = p, n \quad (2b)$$



## P2D-Modell: Gleichungen

Lithiumionenkonzentration im Elektrolyt  $c_2$

Der Transport von Lithiumionen im Elektrolyt wird hervorgerufen durch Migration und Diffusion:

$$\epsilon_{2,i} \frac{\partial c_{2,i}}{\partial t} = \nabla \cdot (D_{2,\text{eff},i} \nabla c_{2,i}) + \frac{1 - T_+^0}{F} J_i - \frac{\mathbf{i}_2 \cdot \nabla T_+^0}{F}, \quad i = p, s, n \quad (3)$$

## P2D-Modell: Gleichungen

### Lithiumionenkonzentration im Elektrolyt $c_2$

Der Transport von Lithiumionen im Elektrolyt wird hervorgerufen durch Migration und Diffusion:

$$\epsilon_{2,i} \frac{\partial c_{2,i}}{\partial t} = \nabla \cdot (D_{2,\text{eff},i} \nabla c_{2,i}) + \frac{1 - T_+^0}{F} J_i - \frac{\mathbf{i}_2 \cdot \nabla T_+^0}{F}, \quad i = p, s, n \quad (3)$$

Die nötigen Randbedingungen sind:

$$- D_{2,\text{eff},p} \frac{\partial c_{2,p}}{\partial x} \Big|_{x=L_{pc}} = 0 \quad (4a)$$

$$- D_{2,\text{eff},n} \frac{\partial c_{2,n}}{\partial x} \Big|_{x=L_{pc}+L_p+L_s+L_n} = 0 \quad (4b)$$

## P2D-Modell: Gleichungen

Elektrisches Potential in der festen Phase  $\phi_1$

Das elektrische Potential in der festen Phase ist gegeben durch das ohmsche Gesetz:

$$\nabla \cdot (\sigma_{\text{eff},i} \nabla \phi_{1,i}) = J_i, \quad i = pc, p, n, nc \quad (5)$$

## P2D-Modell: Gleichungen

### Elektrisches Potential in der festen Phase $\phi_1$

Das elektrische Potential in der festen Phase ist gegeben durch das ohmsche Gesetz:

$$\nabla \cdot (\sigma_{\text{eff},i} \nabla \phi_{1,i}) = J_i, \quad i = pc, p, n, nc \quad (5)$$

Die nötigen Randbedingungen für  $i = p, pc$  sind:

$$-\sigma_{\text{eff},pc} \left. \frac{\partial \phi_{1,pc}}{\partial x} \right|_{x=0} = i_{\text{app}} \quad (6a)$$

$$-\sigma_{\text{eff},p} \left. \frac{\partial \phi_{1,p}}{\partial x} \right|_{x=L_{pc}+L_p} = 0 \quad (6b)$$

mit  $i_{\text{app}}$  als die an die Batterie angelegte Stromdichte.

## P2D-Modell: Gleichungen

Elektrisches Potential in der festen Phase  $\phi_1$

Die nötigen Randbedingungen für  $i = n, nc$  sind:

$$-\sigma_{\text{eff},n} \left. \frac{\partial \phi_{1,n}}{\partial x} \right|_{x=L_{pc}+L_p+L_s} = 0 \quad (7a)$$

$$\phi_{1,nc} \Big|_{x=L_{pc}+L_p+L_s+L_n+L_{nc}} = 0 \quad (7b)$$

Das Setzen des elektrischen Potentials auf 0 bei  $x = L_{pc} + L_p + L_s + L_n + L_{nc}$  ist willkürlich, ist jedoch nötig für eine eindeutige Lösung.

## P2D-Modell: Gleichungen

Elektrisches Potential im Elektrolyt  $\phi_2$

Das elektrische Potential im Elektrolyt folgt aus dem Transport der Lithiumionen:

$$\nabla \cdot (\kappa_{\text{eff},i} \nabla \phi_{2,i}) + \nabla \cdot (\kappa_{D,i} \nabla \ln c_{2,i}) = -J_i, \quad i = p, s, n \quad (8)$$

## P2D-Modell: Gleichungen

### Elektrisches Potential im Elektrolyt $\phi_2$

Das elektrische Potential im Elektrolyt folgt aus dem Transport der Lithiumionen:

$$\nabla \cdot (\kappa_{\text{eff},i} \nabla \phi_{2,i}) + \nabla \cdot (\kappa_{D,i} \nabla \ln c_{2,i}) = -J_i, \quad i = p, s, n \quad (8)$$

Die nötigen Randbedingungen sind:

$$-\kappa_{\text{eff},p} \frac{\partial \phi_{2,p}}{\partial x} \Big|_{x=L_{pc}} = 0 \quad (9a)$$

$$-\kappa_{\text{eff},n} \frac{\partial \phi_{2,n}}{\partial x} \Big|_{x=L_{pc}+L_p+L_s+L_n} = 0 \quad (9b)$$

# P2D-Modell: Gleichungen

## Butler-Volmer-Gleichung

Die Differentialgleichungen sind gekoppelt über die volumetrische Übertragungsstromdichte  $J$ :

$$J_i = \nabla \cdot \mathbf{i}_2 = a_i i_{0,i} \left[ \exp\left(\frac{\alpha_{a,i} F}{RT} \eta_i\right) - \exp\left(-\frac{\alpha_{c,i} F}{RT} \eta_i\right) \right], \quad i = p, n \quad (10)$$

mit der Austauschstromdichte  $i_0$  und dem Überpotential  $\eta$ :

$$i_{0,i} = F k_i (c_{1,i}^{\max} - c_{1,i}^{\text{surf}})^{\alpha_{a,i}} (c_{1,i}^{\text{surf}})^{\alpha_{c,i}} (c_2)^{\alpha_{a,i}}, \quad i = p, n \quad (11)$$

$$\eta_i = \phi_{1,i} - \phi_{2,i} - U_{oc,i}, \quad i = p, n \quad (12)$$



## P2D-Modell: Gleichungen

Temperatur innerhalb der Zelle  $T$

Die Wärmeleitung innerhalb der Zelle:

$$\rho_i C_{p,i} \frac{\partial T_i}{\partial t} = \nabla \cdot (\lambda_i \nabla T_i) + \dot{q}_i, \quad i = pc, p, s, n, nc \quad (13)$$

## P2D-Modell: Gleichungen

Temperatur innerhalb der Zelle  $T$

Die Wärmeleitung innerhalb der Zelle:

$$\rho_i C_{p,i} \frac{\partial T_i}{\partial t} = \nabla \cdot (\lambda_i \nabla T_i) + \dot{q}_i, \quad i = pc, p, s, n, nc \quad (13)$$

Die nötigen Randbedingungen sind:

$$-\lambda_{pc} \frac{\partial T_{pc}}{\partial x} \Big|_{x=0} = h(T_{\text{amb}} - T_{pc}) \quad (14a)$$

$$-\lambda_{nc} \frac{\partial T_{nc}}{\partial x} \Big|_{x=L_{pc}+L_p+L_s+L_n+L_{nc}} = h(T_{\text{amb}} - T_{nc}) \quad (14b)$$

# Implementation

# Implementation des P2D-Modells

- ▶ Das P2D-Modell wird mit dem quelloffenen Softwarepaket *FEniCS* implementiert

## Implementation des P2D-Modells

- ▶ Das P2D-Modell wird mit dem quelloffenen Softwarepaket *FEniCS* implementiert
- ▶ FEniCS nutzt die Finite-Element-Methode (FEM) für das Lösen beliebiger partieller Differentialgleichungen

## Implementation des P2D-Modells

- ▶ Das P2D-Modell wird mit dem quelloffenen Softwarepaket *FEniCS* implementiert
- ▶ FEniCS nutzt die Finite-Element-Methode (FEM) für das Lösen beliebiger partieller Differentialgleichungen
- ▶ Vorteil von FEniCS ist die einfache Syntax

# Implementation des P2D-Modells

- ▶ Das P2D-Modell wird mit dem quelloffenen Softwarepaket *FEniCS* implementiert
- ▶ FEniCS nutzt die Finite-Element-Methode (FEM) für das Lösen beliebiger partieller Differentialgleichungen
- ▶ Vorteil von FEniCS ist die einfache Syntax
- ▶ Ablauf der Simulation:

# Implementation des P2D-Modells

- ▶ Das P2D-Modell wird mit dem quelloffenen Softwarepaket *FEniCS* implementiert
- ▶ FEniCS nutzt die Finite-Element-Methode (FEM) für das Lösen beliebiger partieller Differentialgleichungen
- ▶ Vorteil von FEniCS ist die einfache Syntax
- ▶ Ablauf der Simulation:
  1. Löse Gleichungen für  $c_2$ ,  $\phi_1$ ,  $\phi_2$  und T



# Implementation des P2D-Modells

- ▶ Das P2D-Modell wird mit dem quelloffenen Softwarepaket *FEniCS* implementiert
- ▶ FEniCS nutzt die Finite-Element-Methode (FEM) für das Lösen beliebiger partieller Differentialgleichungen
- ▶ Vorteil von FEniCS ist die einfache Syntax
- ▶ Ablauf der Simulation:
  1. Löse Gleichungen für  $c_2$ ,  $\phi_1$ ,  $\phi_2$  und T
  2. Löse Gleichung für  $c_1$

# Implementation des P2D-Modells

- ▶ Das P2D-Modell wird mit dem quelloffenen Softwarepaket *FEniCS* implementiert
- ▶ FEniCS nutzt die Finite-Element-Methode (FEM) für das Lösen beliebiger partieller Differentialgleichungen
- ▶ Vorteil von FEniCS ist die einfache Syntax
- ▶ Ablauf der Simulation:
  1. Löse Gleichungen für  $c_2$ ,  $\phi_1$ ,  $\phi_2$  und T
  2. Löse Gleichung für  $c_1$
  3. Wiederhole bis Lösungen von Schritt 1 und 2 übereinstimmen

# Implementation des P2D-Modells

- ▶ Das P2D-Modell wird mit dem quelloffenen Softwarepaket *FEniCS* implementiert
- ▶ FEniCS nutzt die Finite-Element-Methode (FEM) für das Lösen beliebiger partieller Differentialgleichungen
- ▶ Vorteil von FEniCS ist die einfache Syntax
- ▶ Ablauf der Simulation:
  1. Löse Gleichungen für  $c_2$ ,  $\phi_1$ ,  $\phi_2$  und T
  2. Löse Gleichung für  $c_1$
  3. Wiederhole bis Lösungen von Schritt 1 und 2 übereinstimmen
- ▶ Das erstellte Programm wird LiFE genannt

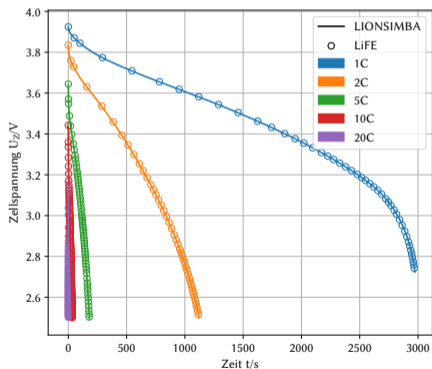
# Validierung

# Validierung

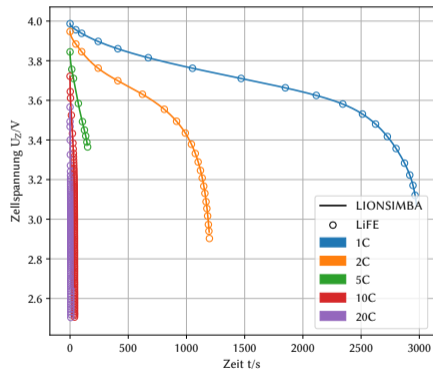
- ▶ Die numerische Implementation wird durch den Vergleich mit LIONSIMBA validiert
- ▶ Es werden isotherme und thermische Simulationen durchgeführt

# Validierung

## Zellspannung beim Entladen



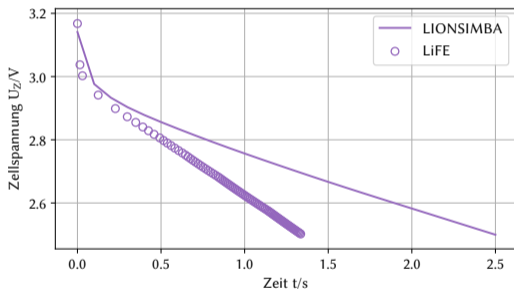
(a) Isotherm



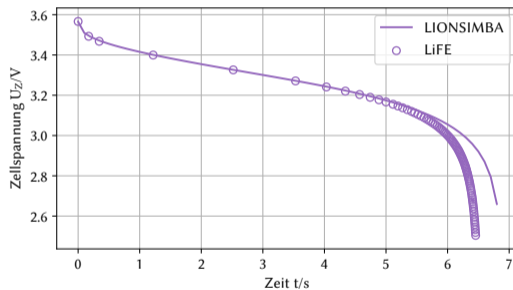
(b) Thermisch

# Validierung

## Zellspannung beim Entladen mit 20C



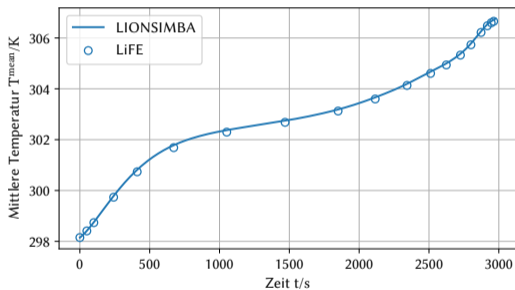
(a) Isotherm



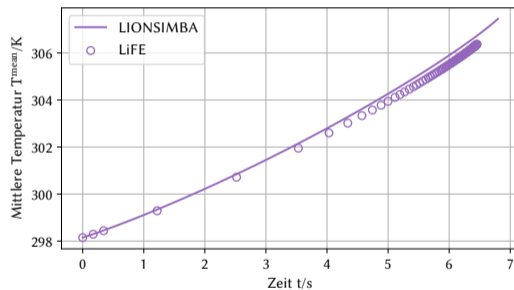
(b) Thermisch

# Validierung

## Temperatur beim Entladen



(a) 1C

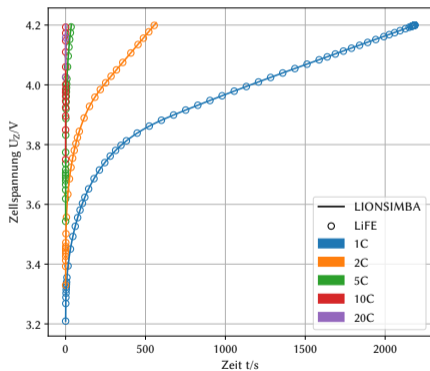


(b) 20C

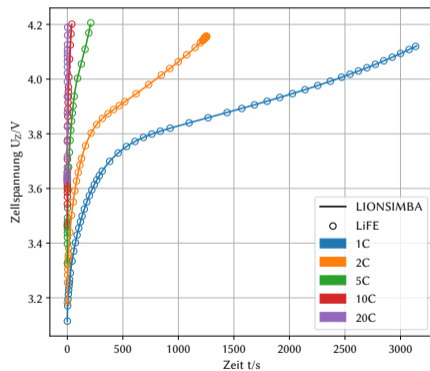


# Validierung

## Zellspannung beim Laden



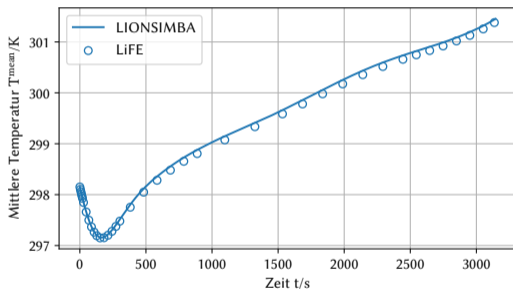
(a) Isotherm



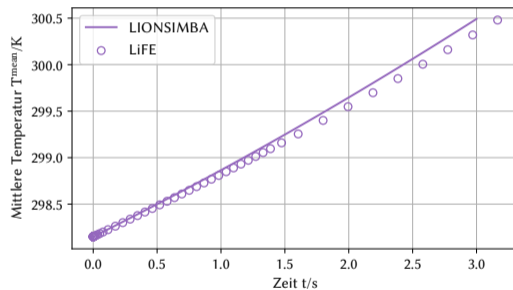
(b) Thermisch

# Validierung

## Temperatur beim Laden



(a) 1C



(b) 20C

# Validierung

## Fazit

- ▶ LiFE stimmt bis 5C sehr gut mit LIONSIMBA überein
- ▶ Bei höheren C-Raten sind Abweichungen zu erkennen

# Schlussbemerkung

## Fazit und Ausblick

- ▶ Ein Programm zur Simulation von Batterien mit quelloffener Software wurde erstellt

## Fazit und Ausblick

- ▶ Ein Programm zur Simulation von Batterien mit quelloffener Software wurde erstellt
- ▶ Das Programm wurde mit anderer Software für C-Raten bis zu 5C validiert

## Fazit und Ausblick

- ▶ Ein Programm zur Simulation von Batterien mit quelloffener Software wurde erstellt
- ▶ Das Programm wurde mit anderer Software für C-Raten bis zu 5C validiert
- ▶ Mögliche Ursachen für die Abweichung bei höheren C-Raten wurden diskutiert

## Fazit und Ausblick

- ▶ Ein Programm zur Simulation von Batterien mit quelloffener Software wurde erstellt
- ▶ Das Programm wurde mit anderer Software für C-Raten bis zu 5C validiert
- ▶ Mögliche Ursachen für die Abweichung bei höheren C-Raten wurden diskutiert
- ▶ LiFE wurde so programmiert, dass es leicht zu erweitern und modifizieren ist



## Fazit und Ausblick

- ▶ Ein Programm zur Simulation von Batterien mit quelloffener Software wurde erstellt
- ▶ Das Programm wurde mit anderer Software für C-Raten bis zu 5C validiert
- ▶ Mögliche Ursachen für die Abweichung bei höheren C-Raten wurden diskutiert
- ▶ LiFE wurde so programmiert, dass es leicht zu erweitern und modifizieren ist
- ▶ In weiteren Arbeiten sollte LiFE in folgenden Punkten verbessert werden:

## Fazit und Ausblick

- ▶ Ein Programm zur Simulation von Batterien mit quelloffener Software wurde erstellt
- ▶ Das Programm wurde mit anderer Software für C-Raten bis zu 5C validiert
- ▶ Mögliche Ursachen für die Abweichung bei höheren C-Raten wurden diskutiert
- ▶ LiFE wurde so programmiert, dass es leicht zu erweitern und modifizieren ist
- ▶ In weiteren Arbeiten sollte LiFE in folgenden Punkten verbessert werden:
  - ▶ Untersuchung der Abweichung bei höheren C-Raten

## Fazit und Ausblick

- ▶ Ein Programm zur Simulation von Batterien mit quelloffener Software wurde erstellt
- ▶ Das Programm wurde mit anderer Software für C-Raten bis zu 5C validiert
- ▶ Mögliche Ursachen für die Abweichung bei höheren C-Raten wurden diskutiert
- ▶ LiFE wurde so programmiert, dass es leicht zu erweitern und modifizieren ist
- ▶ In weiteren Arbeiten sollte LiFE in folgenden Punkten verbessert werden:
  - ▶ Untersuchung der Abweichung bei höheren C-Raten
  - ▶ Restrukturierung des Programmcodes

## Fazit und Ausblick

- ▶ Ein Programm zur Simulation von Batterien mit quelloffener Software wurde erstellt
- ▶ Das Programm wurde mit anderer Software für C-Raten bis zu 5C validiert
- ▶ Mögliche Ursachen für die Abweichung bei höheren C-Raten wurden diskutiert
- ▶ LiFE wurde so programmiert, dass es leicht zu erweitern und modifizieren ist
- ▶ In weiteren Arbeiten sollte LiFE in folgenden Punkten verbessert werden:
  - ▶ Untersuchung der Abweichung bei höheren C-Raten
  - ▶ Restrukturierung des Programmcodes
  - ▶ Erhöhung der Rechengeschwindigkeit

## Fazit und Ausblick

- ▶ Ein Programm zur Simulation von Batterien mit quelloffener Software wurde erstellt
- ▶ Das Programm wurde mit anderer Software für C-Raten bis zu 5C validiert
- ▶ Mögliche Ursachen für die Abweichung bei höheren C-Raten wurden diskutiert
- ▶ LiFE wurde so programmiert, dass es leicht zu erweitern und modifizieren ist
- ▶ In weiteren Arbeiten sollte LiFE in folgenden Punkten verbessert werden:
  - ▶ Untersuchung der Abweichung bei höheren C-Raten
  - ▶ Restrukturierung des Programmcodes
  - ▶ Erhöhung der Rechengeschwindigkeit
  - ▶ Erweiterung der Funktionen (grafische Benutzeroberfläche etc.)



Berner Fachhochschule  
Haute école spécialisée bernoise  
Bern University of Applied Sciences

# Vielen Dank für Ihre Aufmerksamkeit.

Marcel-David Zwahlen | [zlm4@bfh.ch](mailto:zlm4@bfh.ch)

Berner Fachhochschule Technik und Informatik  
Institut für intelligente industrielle Systeme (I3S)  
Pestalozzistrasse 20  
CH-3400 Burgdorf  
[i3s.ti.bfh.ch](http://i3s.ti.bfh.ch)

# Backup

# P2D-Modell: Gleichungen

## Wärmequellterme

Die Erzeugung der Wärme durch den Betrieb der Zelle ist im Wärmequellterm  $\dot{q}_i$  zusammengefasst. Dieser besteht aus folgenden Termen:

$$\dot{q}_i = \dot{q}_{\text{ohm},i} + \dot{q}_{\text{rxn},i} + \dot{q}_{\text{rev},i}, \quad i = pc, p, s, n, nc \quad (15)$$

Wobei nicht alle Terme in allen Unterregionen auftreten.

$\dot{q}_{\text{rxn},i}$  und  $\dot{q}_{\text{rev},i}$  treten nur in den Elektroden ( $p, n$ ) auf und werden wie folgt berechnet:

$$\dot{q}_{\text{rxn},i} = J_i \eta_i, \quad i = p, n \quad (16)$$

$$\dot{q}_{\text{rev},i} = J_i T_i \left. \frac{\partial U_{oc,i}}{\partial T} \right|_{T=T_{\text{ref}}}, \quad i = p, n \quad (17)$$



# P2D-Modell: Gleichungen

## Wärmequellterme

$\dot{q}_{\text{ohm},i}$  tritt in allen Unterregionen auf, wird aber nicht in allen gleich berechnet.

$$\dot{q}_{\text{ohm},i} = \sigma_{\text{eff},i}(\nabla\phi_{1,i})^2, \quad i = pc, nc \quad (18a)$$

$$\dot{q}_{\text{ohm},i} = \sigma_{\text{eff},i}(\nabla\phi_{1,i})^2 + \kappa_{\text{eff},i}(\nabla\phi_{2,i})^2 + \kappa_{D,i}\nabla\phi_{2,i}\nabla\ln c_{2,i}, \quad i = p, n \quad (18b)$$

$$\dot{q}_{\text{ohm},i} = \kappa_{\text{eff},i}(\nabla\phi_{2,i})^2 + \kappa_{D,i}\nabla\phi_{2,i}\nabla\ln c_{2,i}, \quad i = s \quad (18c)$$

## P2D-Modell: Gleichungen

Spezifische Diffusionsleitfähigkeit

$$\kappa_{D,i} = \frac{2RT_i \kappa_{\text{eff},i} (T_+^0 - 1)}{F} \left( 1 + \frac{\partial \ln \gamma_{\pm}}{\partial \ln c_{2,i}} \right), \quad i = p, s, n \quad (19)$$