

## TOP-Forschungsprojekte 2014

**Computational Modeling and Design of Lithium-Ion Batteries**

Professur:	Fakultät Bauingenieurwesen Modellierung und Simulation - Mechanik Prof. Dr.-Ing. Timon Rabczuk
Drittmittelgeber:	EU
Laufzeit:	1. Juni 2014 bis 31. Mai 2019
Fördersumme:	1.975.071,00 Euro

**Beschreibung:**

Lithium-Ionen-Batterien (LIB) gehören zu den vielversprechendsten Lösungen für die Energiespeicherung. Im Vergleich zu anderen Ressourcen wie Bio-Kraftstoff, Solarzellen, Brennstoffzellen oder Blei- Säure-Batterien, ermöglichen sie eine schnelle Energie-Speicherung und Freisetzung. Aufgrund der höheren Leistung und Energiedichte und der schnellen Ladegeschwindigkeiten eignen sich LIB bspw. als Energiequelle für tragbare elektrische Geräte und Automobile. Probleme derzeitiger LIB-Designs betreffen u.a. deren Sicherheit, Alterung und dem damit verbundenen Kapazitäts- und Leistungsverlust. Modellierung und Simulation ist ein effektives ‚Werkzeug‘ zur Weiterentwicklung und Optimierung zukünftiger LIB-Designs.

In diesem Projekt soll eine numerische Mehrskalen- und Mehrfeld-Umgebung zur Entwicklung und Optimierung neuer Batterien entwickelt werden. Zum einen soll diese numerische Plattform die Entwicklung neuer Materialien (insbesondere für Kathoden und Anoden) einsetzbar sein. Zum anderen soll sie die Topologie der Feinskalen-Struktur bez. der Leistungssteigerung von LIB optimieren. Am Ende des Forschungsprojektes soll ein Open-Source-Software Paket zum Design und zur Optimierung von LIBs zur Verfügung stehen.

In diesem Zusammenhang sind verschiedene (mechanisch- thermisch- elektrochemische) Felder über mehrere Raum- und Zeitskalen zu koppeln. Es sollen Unsicherheiten aller wesentlichen Eingangsparameter bzw. gewisser Ausgangsparameter quantifiziert werden und obere und untere Schranken der Vorhersagen ermittelt werden. Zielgerichtete Fehlerschätzer sollen zur Modell- und Diskretisierungsadaptivität entwickelt werden. Letztendlich sollen die Vorhersagen anhand von Experimenten validiert werden und ein neuer Batterie Prototyp hergestellt und getestet werden.

Lithium-ion batteries (LIBs) are among the most promising solutions for energy storage. Compared with other resources such as bio-fuel, solar cells, fuel cells or lead acid batteries, rechargeable batteries are more portable and allow for quick energy storage and release. The higher power and energy density make batteries suitable as the energy resource for most portable elect. devices including future vehicles. Among the rechargeable batteries, LIBs have the

**Kontakt:**

Bauhaus-Universität Weimar  
Professur Modellierung und Simulation – Mechanik  
Prof. Dr.-Ing. Timon Rabczuk  
timon.rabczuk@uni-weimar.de

Marienstraße 15  
99423 Weimar  
Tel. 03643/ 58 45 04

## TOP-Forschungsprojekte 2014

most potential because of their quick charging rate and high power and energy density. However, ageing of LIBs and the related capacity and power fade is a major concern. For the improvement and future development of batteries, computational modeling and design is an important complementary part to experimental testing which is expensive, time-consuming and sometimes unfeasible.

In this project, the PI proposes to develop, implement, verify and validate a computational multifield and multiscale framework to support the design and optimization of new batteries. The computational framework will support the design and optimization of new anode, separator and cathode materials as well as their structure inside the battery. The measurable outcome of this research will be an open-source software package that can be used to support the design and optimization of LIBs.

Within the computational framework, different (mechanical-thermal-electro-chemical) fields will be linked over multiple scales: from fundamental physics to the design of new battery materials. We will quantify uncertainties in order to provide upper and lower bounds of our predictions and use graph-theory, error-estimation and adaptivity to choose the appropriate model and discretization. The computational framework will be verified and validated by comparison to experiments. Finally, multi-objective optimization over multiple scales will provide a new battery prototype that will be manufactured, tested and compared to the computational predictions.

Weitere Informationen: [Institut für Strukturmechanik](#)

### Kontakt:

Bauhaus-Universität Weimar  
Professur Modellierung und Simulation – Mechanik  
Prof. Dr.-Ing. Timon Rabczuk  
[timon.rabczuk@uni-weimar.de](mailto:timon.rabczuk@uni-weimar.de)

Marienstraße 15  
99423 Weimar  
Tel. 03643/ 58 45 04