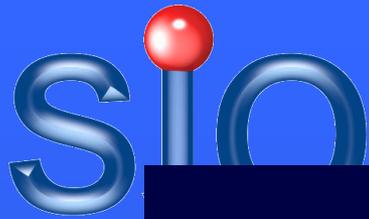




About the modeling of quasi-static diffusion fields (in German)

N. Schwarzer, SIO, Ummanz

- Introduction
- Diffusion through an ensemble of elliptic pores
- Interaction between various pores
- The influence of the length and shape of the pores
- Possible applications (from automotive, via medicine to military)



About the modeling of quasi-static

Because of severe pressure from external forces we have been convinced to adapt this presentation from its original version

- Intro
- Diff
- Inter
- The
- Poss
- military)

ne to

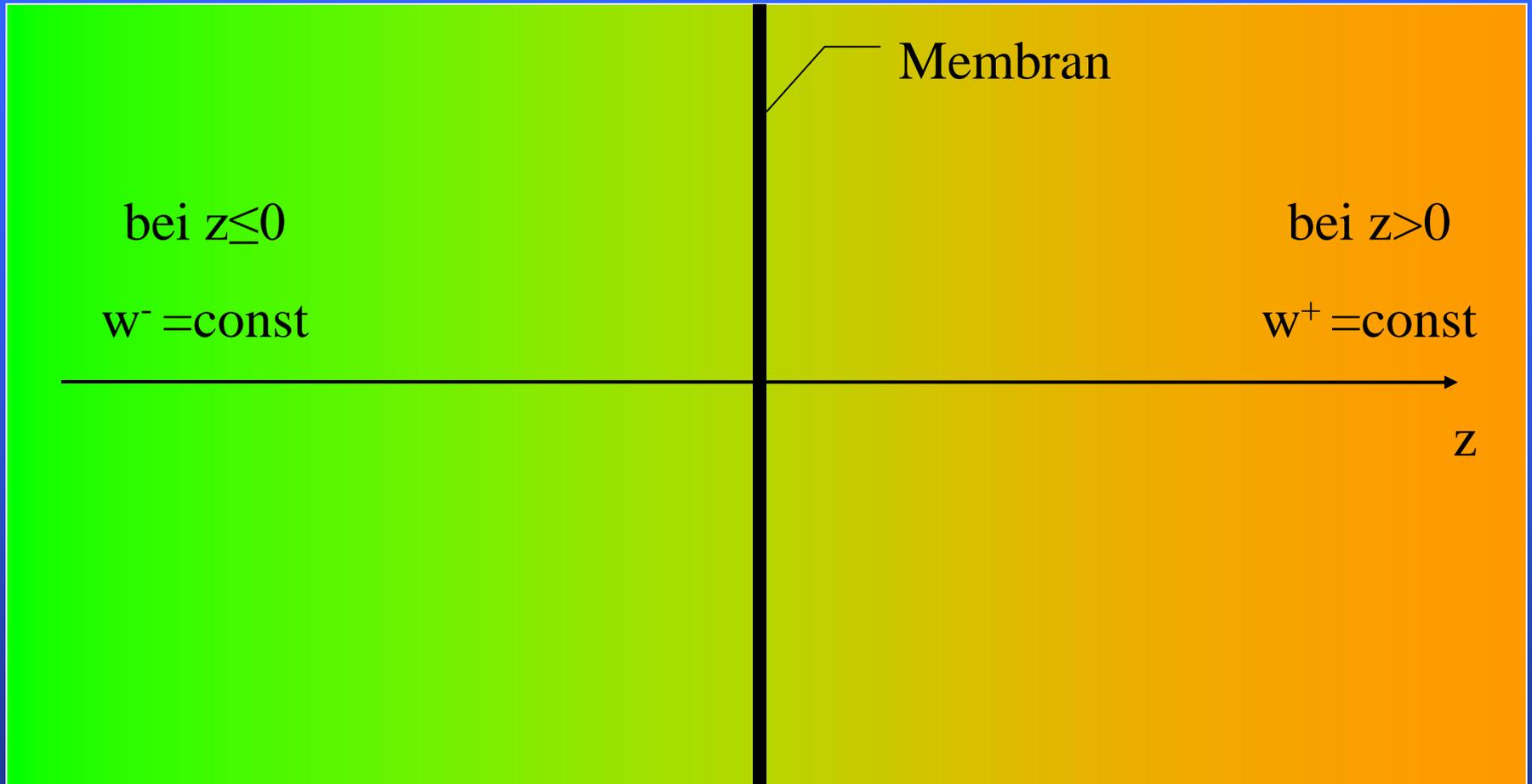


Zur Modellierung von quasistatischen Diffusionsfeldern

N. Schwarzer, SIO, Ummanz

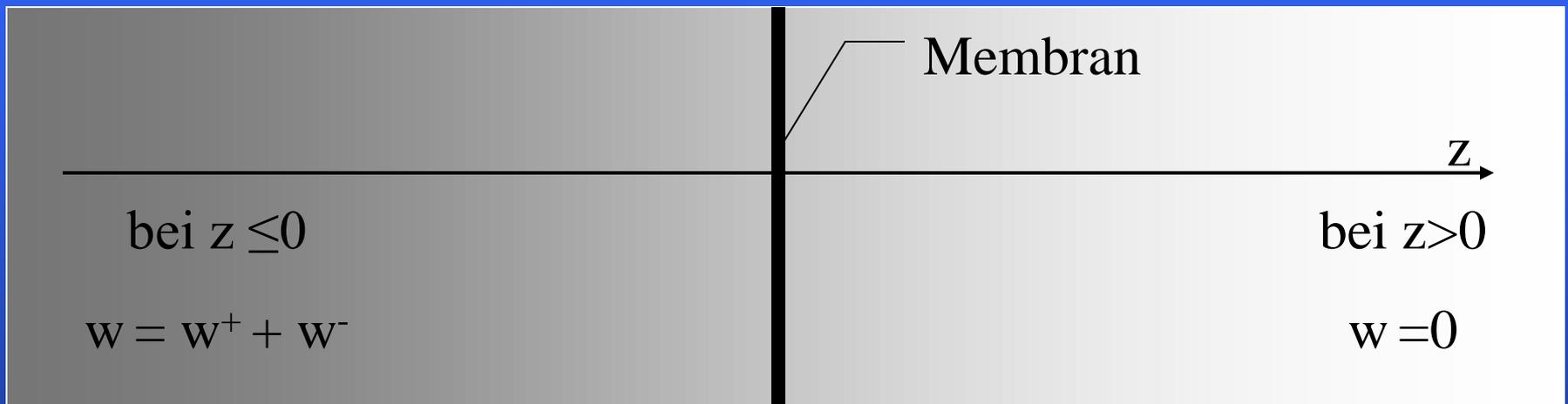
- Einführung in die Problematik
- Diffusion durch eine Membran mit mehreren elliptischen Poren
- Die Wechselwirkung zwischen kreisförmigen Poren
- Der Einfluss der Porenlänge (und –form)
- Zusammenfassung und Ausblick

Zwei Spezies mit den Konzentrationen w^+ und w^-



Mathematisch äquivalent (for the sake of convenience)

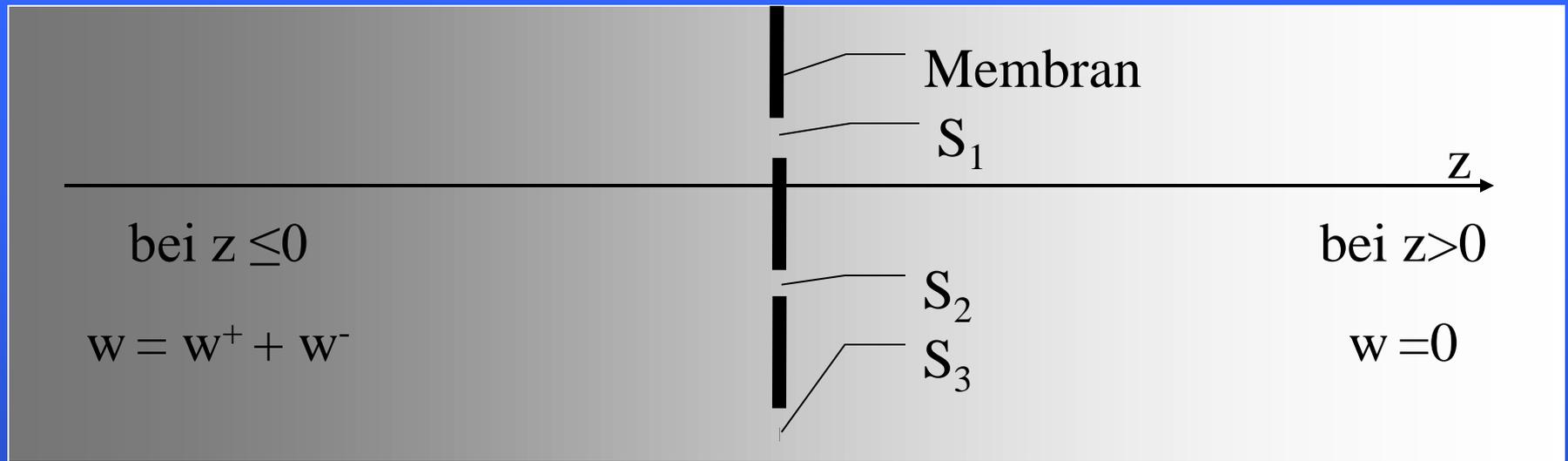
$$Dgl.: \quad \partial_t W - D\Delta W = Q_w \quad \rightarrow \quad -D\Delta W = Q_w$$



✦ Ansatz: Newtonsches Potential



Mathematische Formulierung:



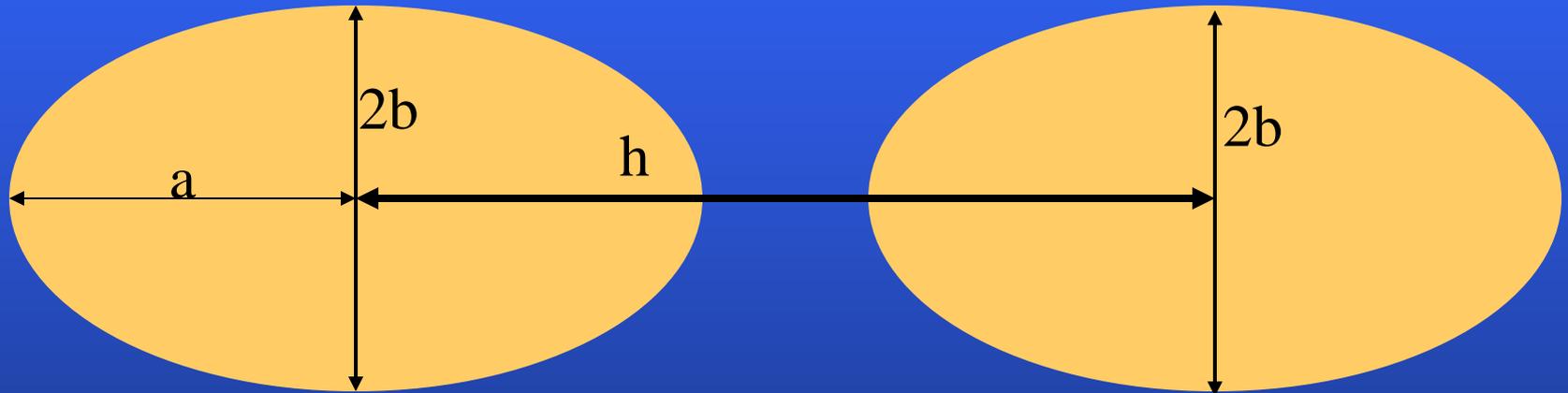
$$W(Q) = \sum_{n=1}^N w_n(Q) = D \sum_{n=1}^N \iint_{S_n} \frac{\sigma_n}{R(T_n, Q)} dS_n \longrightarrow \begin{array}{l} \text{Newtonsches Potential} \\ D \dots \text{Diffusionskoeffizient} \\ N \dots \text{Porenzahl} \end{array}$$

mit den Randbedingungen:

$$W(M) = \sum_{n=1}^N w_n(M) \quad \text{für } M \in S_n$$

$$\sigma_n(M) = - \left. \frac{\partial w_n}{\partial z} \right|_M = 0 \quad \text{für } M \notin S_n \longrightarrow \text{Lokaler Fluss}$$

Fluss durch zwei elliptische Poren als Funktion vom Abstand ihrer Mittelpunkte



Minimaler Abstand: $h=2a$



„Lösung“ durch Näherung:

$$W(Q) = \sum_{n=1}^N w_n(Q) = D \sum_{n=1}^N \iint_{S_n} \frac{\sigma_n}{R(T_n, Q)} dS_n$$

Herausgreifen einer Pore:

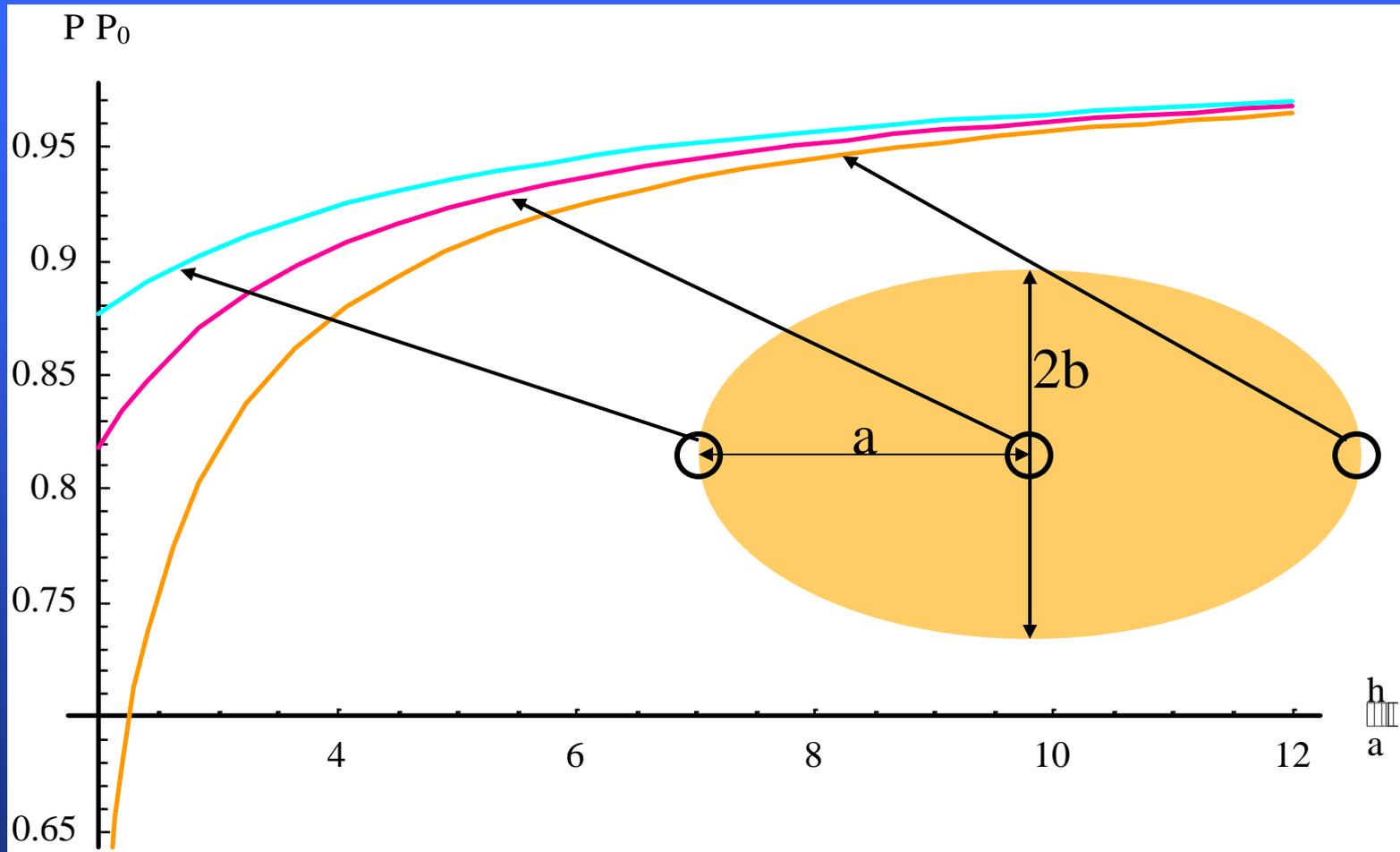
$$\iint_{S_1} w_1(Q_1) \sigma_0(Q_1) dS_1 = D \left(P_1 + \sum_{n=2}^N \iint_{S_n} w_{n1}(T_n) \sigma_n(T_n) dS_n \right)$$

Verallgemeinerter Mittelwertsatz: $\int_a^b f(x) g(x) dx = f(\xi) \int_a^b g(x) dx$

$$\iint_{S_1} w_1(Q_1) \sigma_0(Q_1) dS_1 = D \left(P_1 + \sum_{n=2}^N w_{n1}(\xi_n) P_n \right)$$

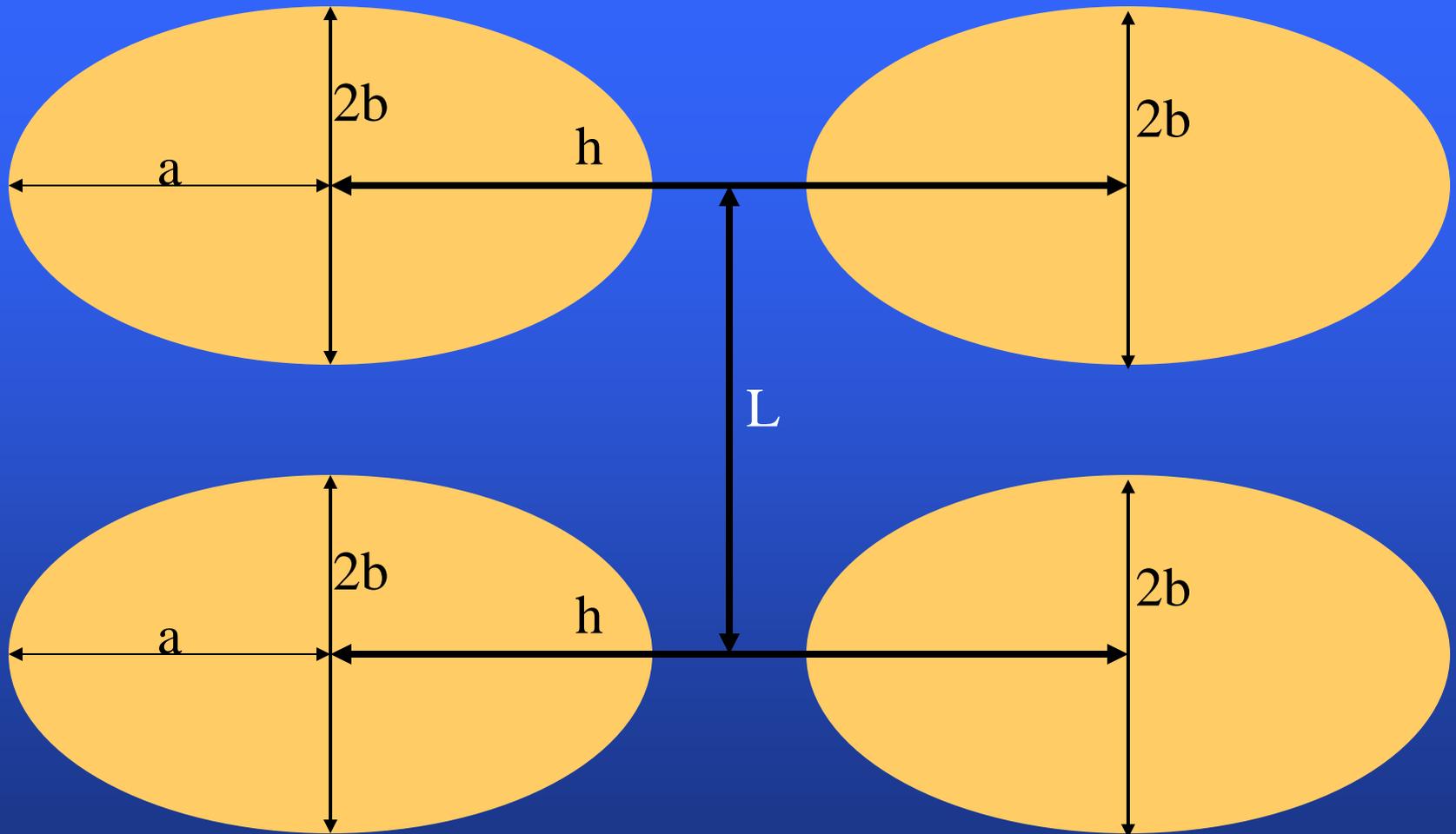
 N lineare algebraische Gleichungen

Hauptwertabschätzung für den Fluss durch zwei elliptische Poren als Funktion vom Abstand ihrer Mittelpunkte



$$\iint_{S_1} w_1(Q_1) \sigma_0(Q_1) dS_1 = D(P_1 + w_{21}(\xi_2) P_2)$$

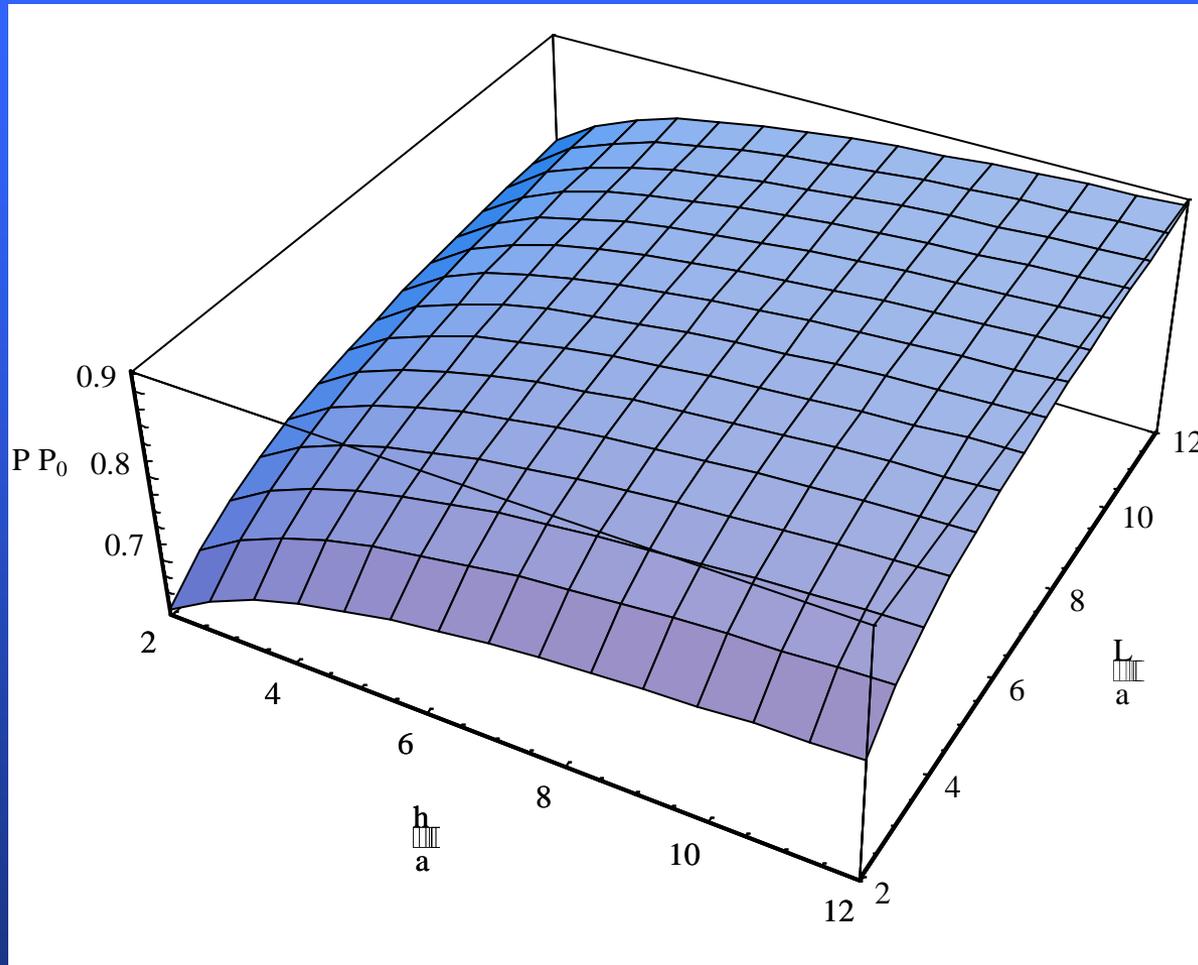
Fluss durch vier elliptische Poren als Funktion der Abstände ihrer Mittelpunkte



Minimale Abstände: $h=2a$, $L=2b$



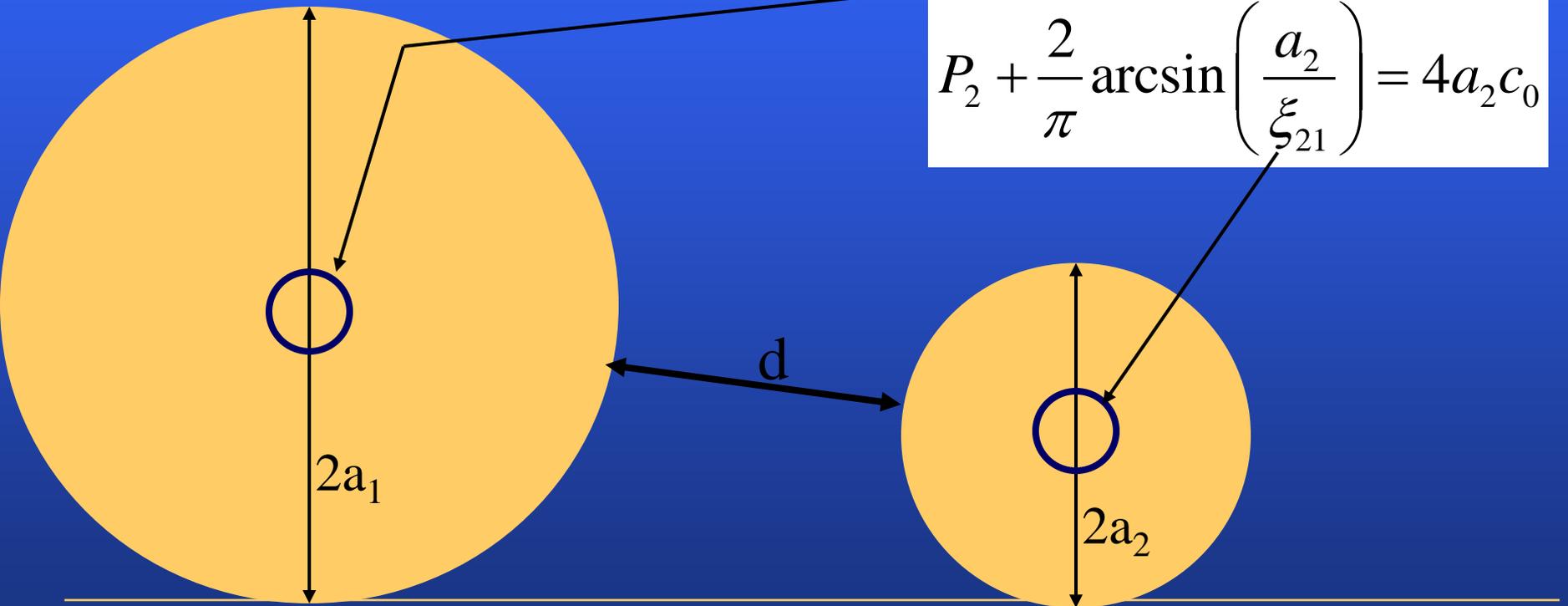
Zentralwertabschätzung für den Fluss durch vier elliptische Poren als Funktion der Abstände ihrer Mittelpunkte



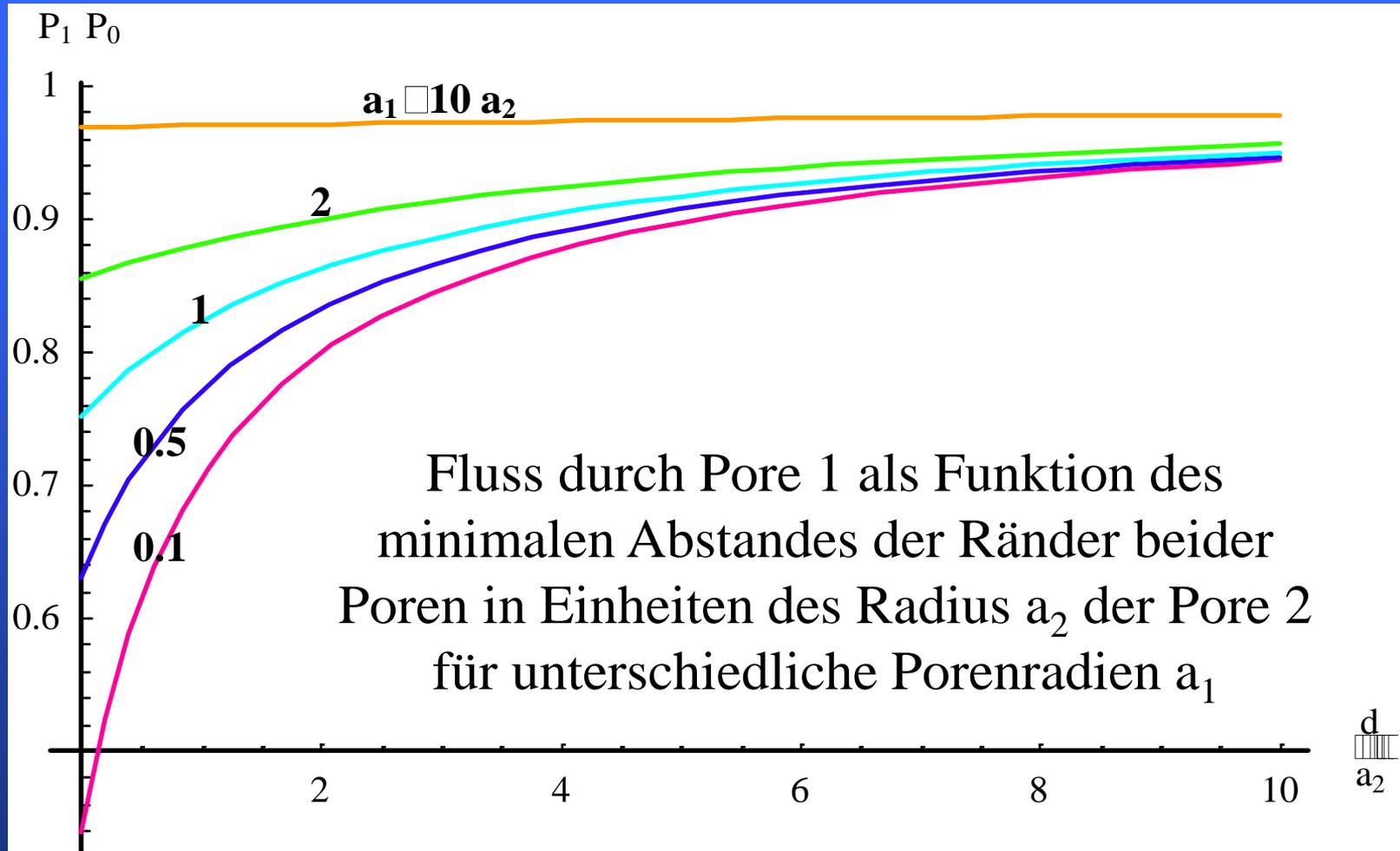
Wechselwirkung zwischen zwei kreisförmige Poren

$$P_1 + \frac{2}{\pi} \arcsin\left(\frac{a_1}{\xi_{12}}\right) = 4a_1c_0$$

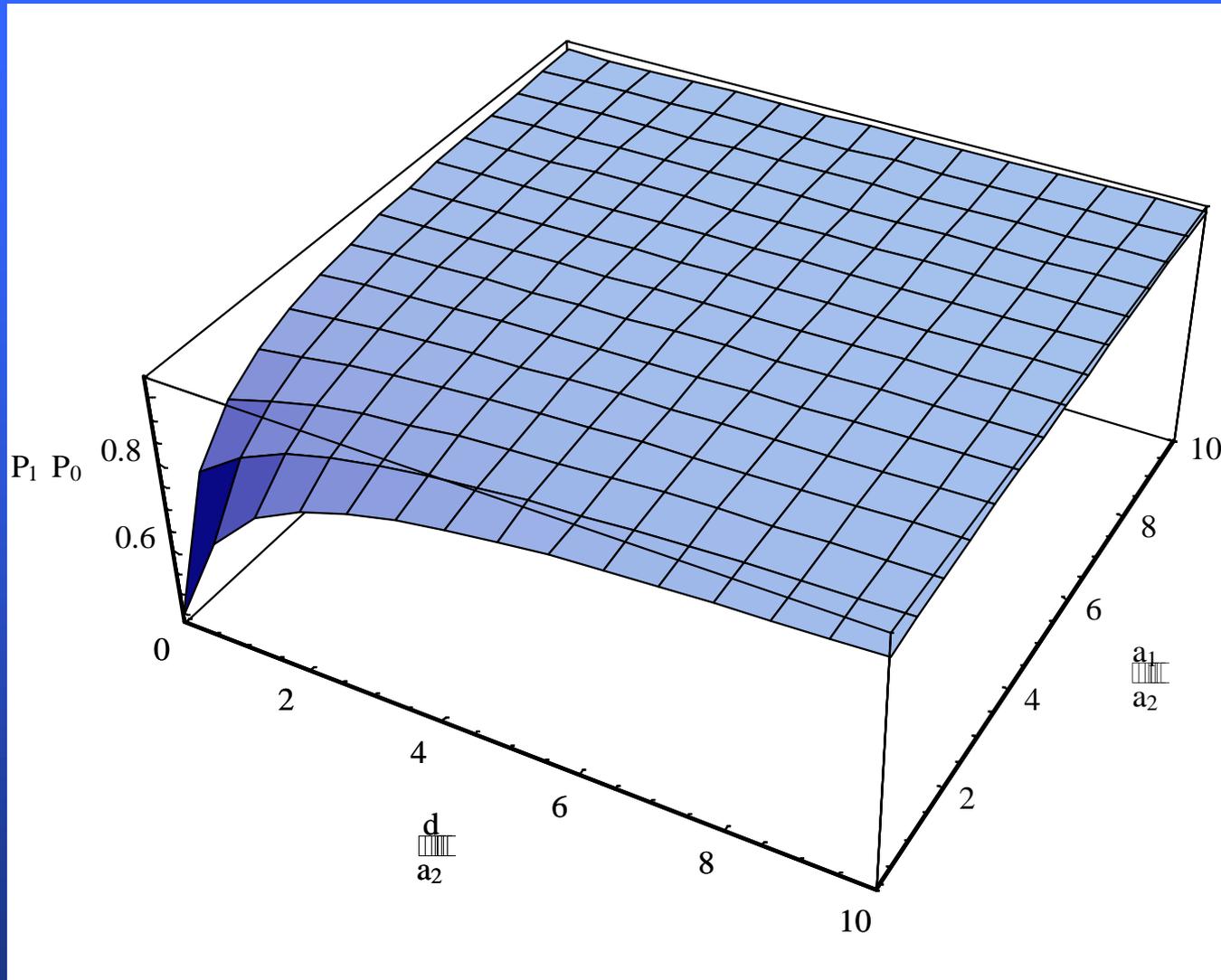
$$P_2 + \frac{2}{\pi} \arcsin\left(\frac{a_2}{\xi_{21}}\right) = 4a_2c_0$$



Wechselwirkung zwischen zwei kreisförmigen Poren

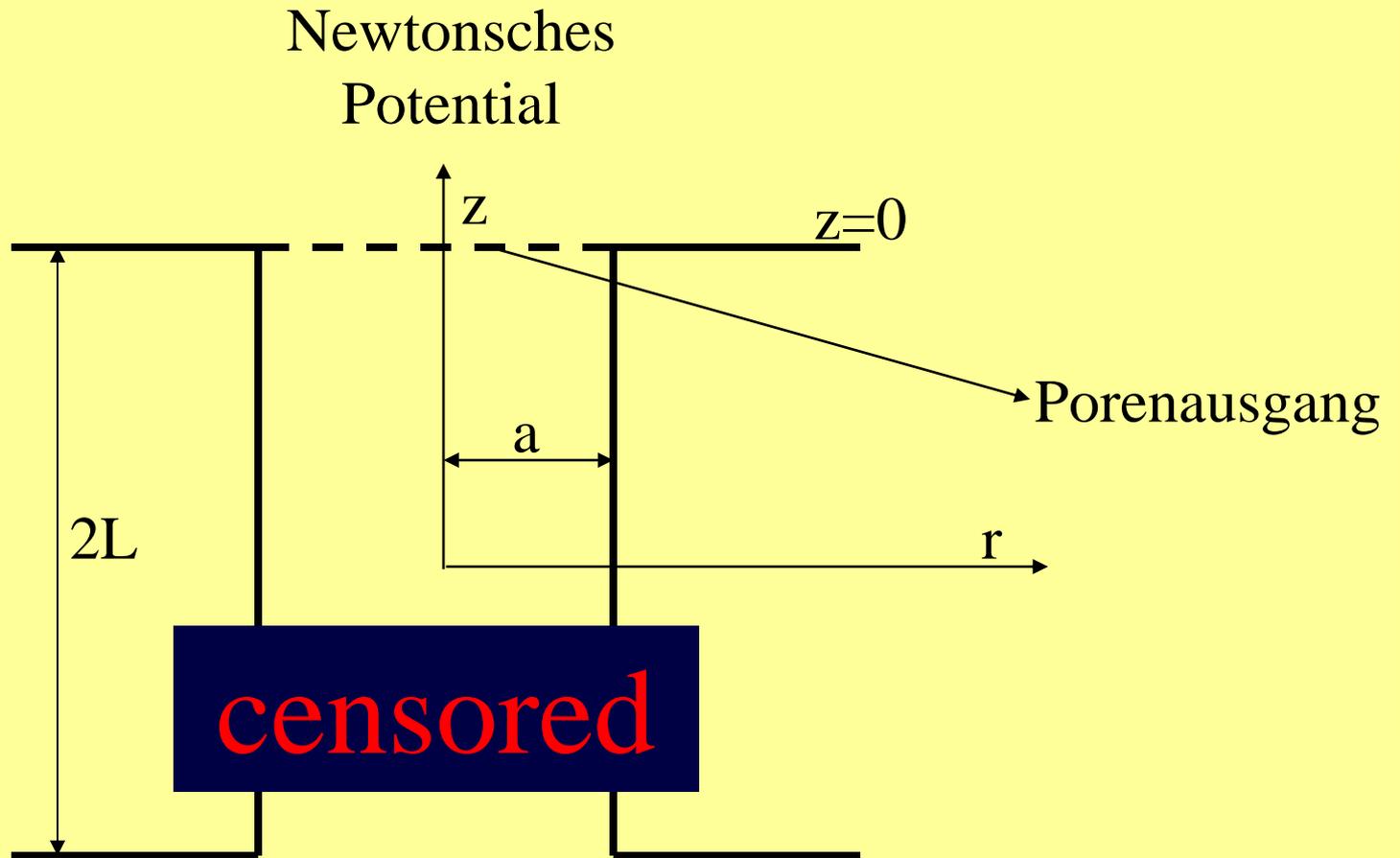


Wechselwirkung zwischen zwei kreisförmigen Poren



Fluss durch Pore 1 als Funktion des minimalen Abstandes der Ränder beider Poren und des Porenradius a_1 in Einheiten des Radius a_2

Einfluss der Porenlänge



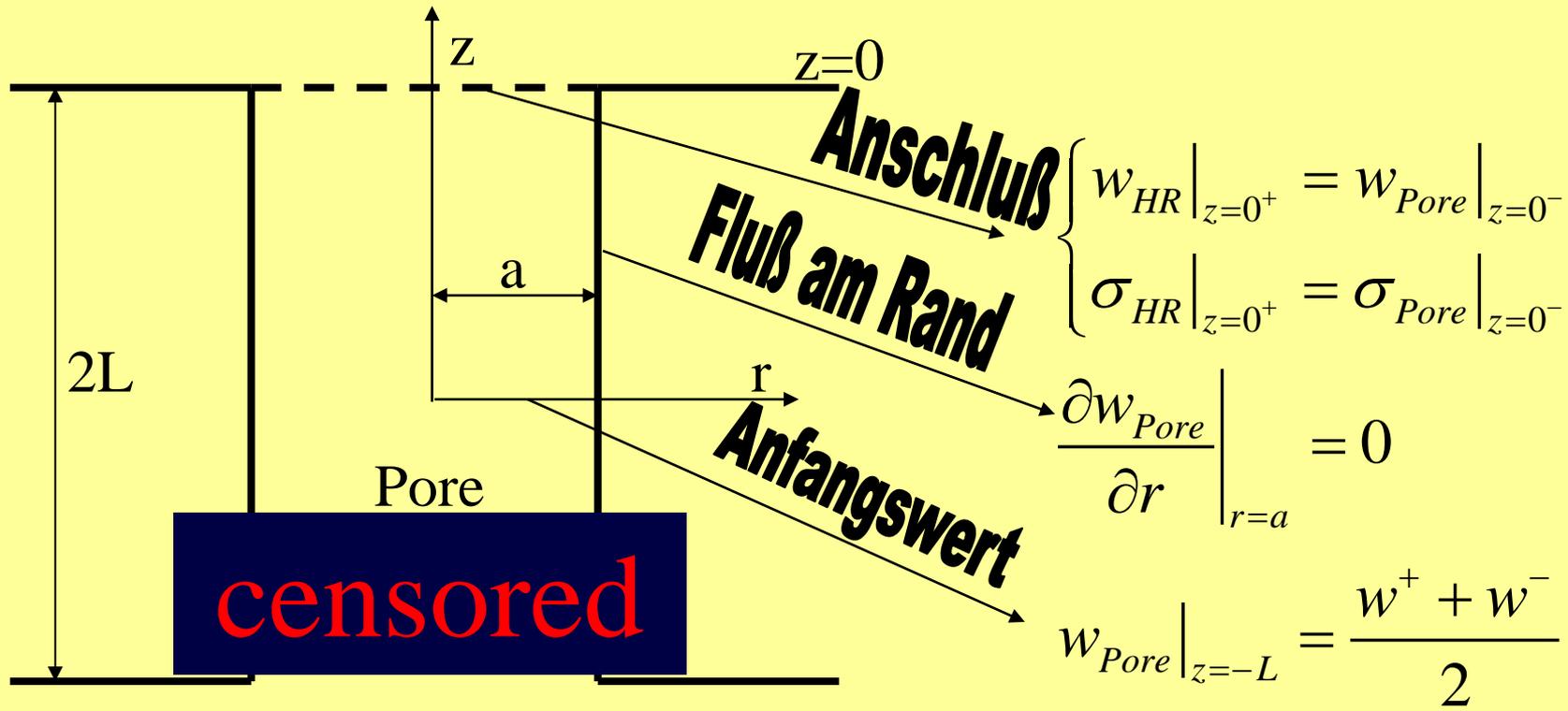
Formulierung der Randbedingungen

Halbraum=HR
 → Newtonsches
 Potential

$$\Delta w_{HR} = 0$$

$$\Delta w_{Pore} = 0$$

$$w_{HR} \rightarrow w^+ \quad \text{für } \sqrt{r^2 + z^2} \rightarrow \infty, z > 0$$



Lösung durch „Verkomplizierung“:

$$w(Q) = D \iint_S \frac{\sigma}{R(T, Q)} dS$$

$$\frac{1}{R} = \frac{2}{\pi} \int_0^{l_1} \frac{dx}{\left\{ (r^2 - x^2)(\rho^2 - g^2(x)) \right\}^{1/2}} L\left(\frac{x^2}{r\rho}, \varphi - \varphi_0 \right)$$

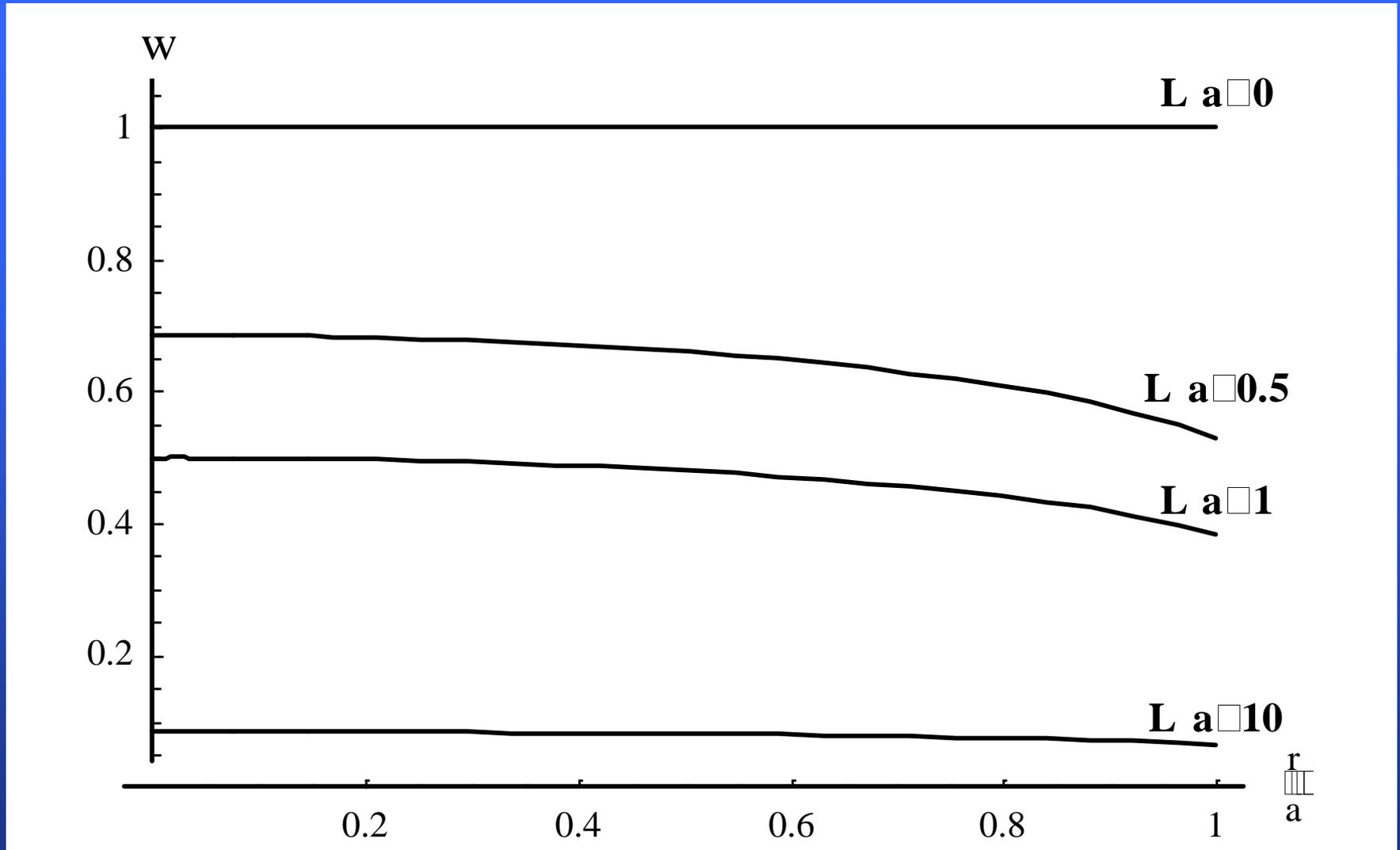
mit:

$$L\left(\frac{x^2}{r\rho}, \varphi - \varphi_0 \right) = \frac{1 - \left(\frac{x^2}{r\rho} \right)^2}{1 + \left(\frac{x^2}{r\rho} \right)^2 - 2 \frac{x^2}{r\rho} \cos(\varphi - \varphi_0)}$$

$$g^2(x) = x^2 \left[1 + \frac{z^2}{r^2 - x^2} \right]$$

$$l_1 = \frac{1}{2} \left(\sqrt{(r+a)^2 + z^2} - \sqrt{(r-a)^2 + z^2} \right).$$

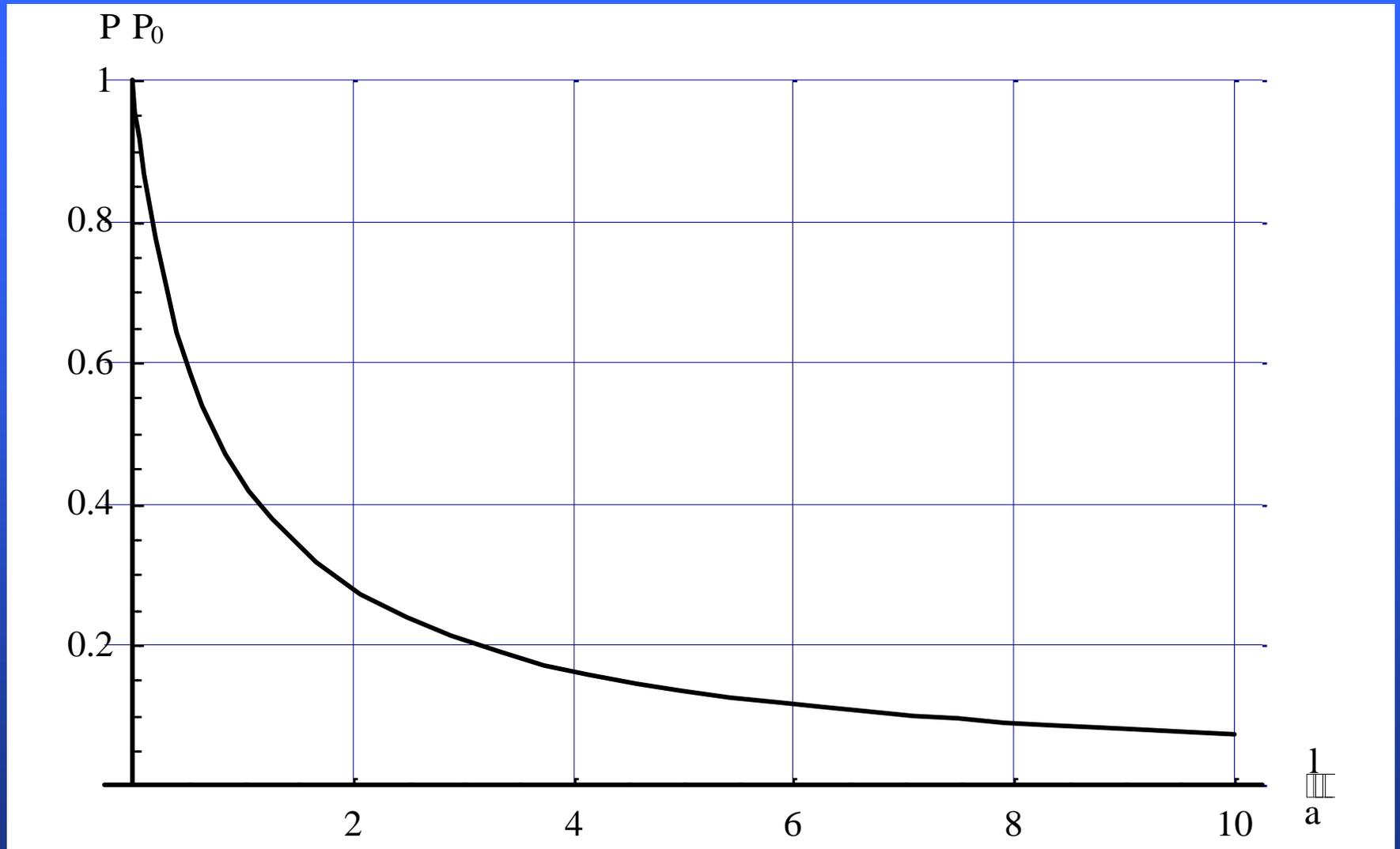
Einfluss der Porenlänge



Konzentrationsprofile am Porenausgang als Funktion des Abstandes von der Porenachse in Einheiten des Porenradius a für unterschiedliche Porenängen

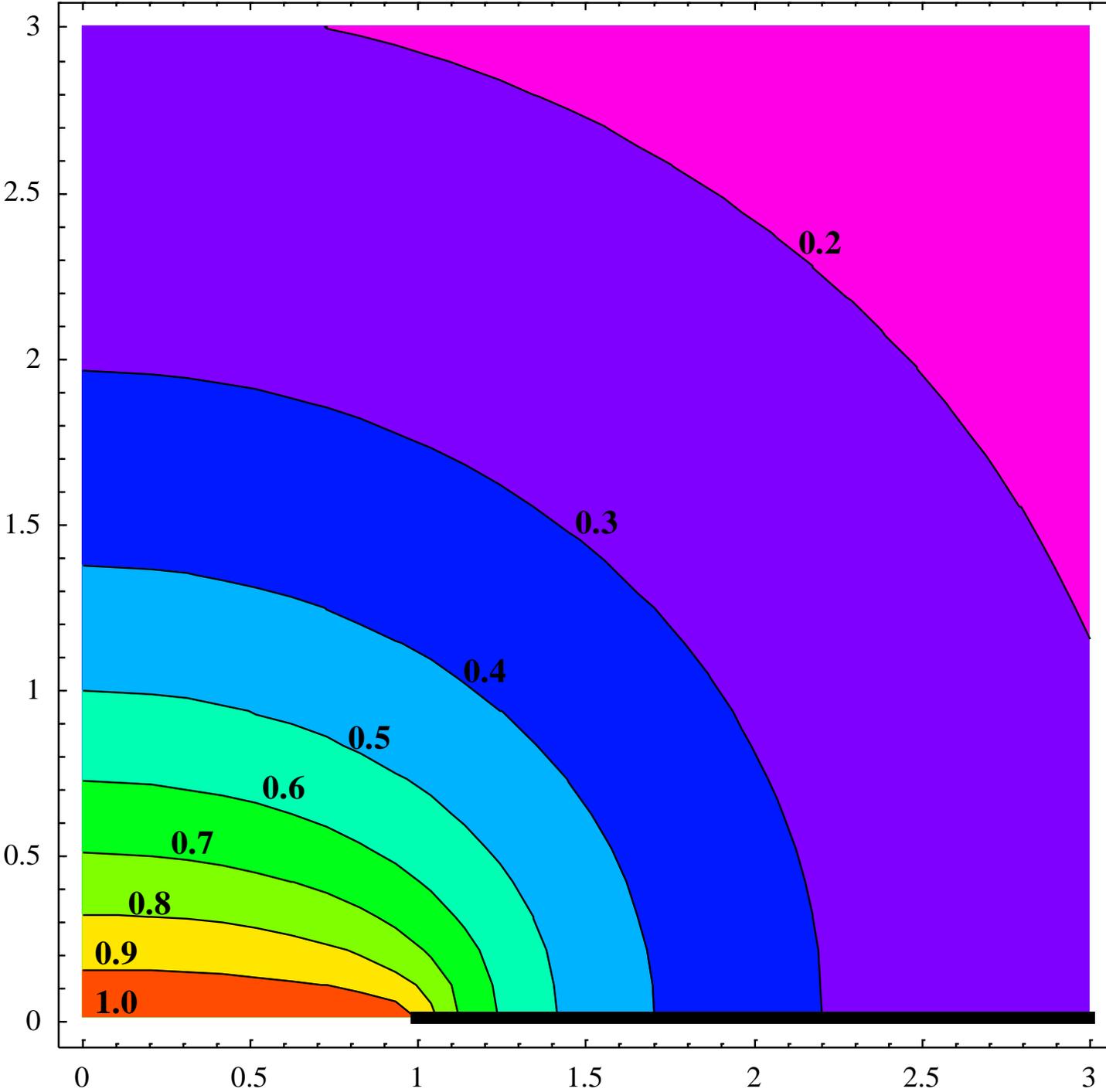


Einfluss der Porenlänge

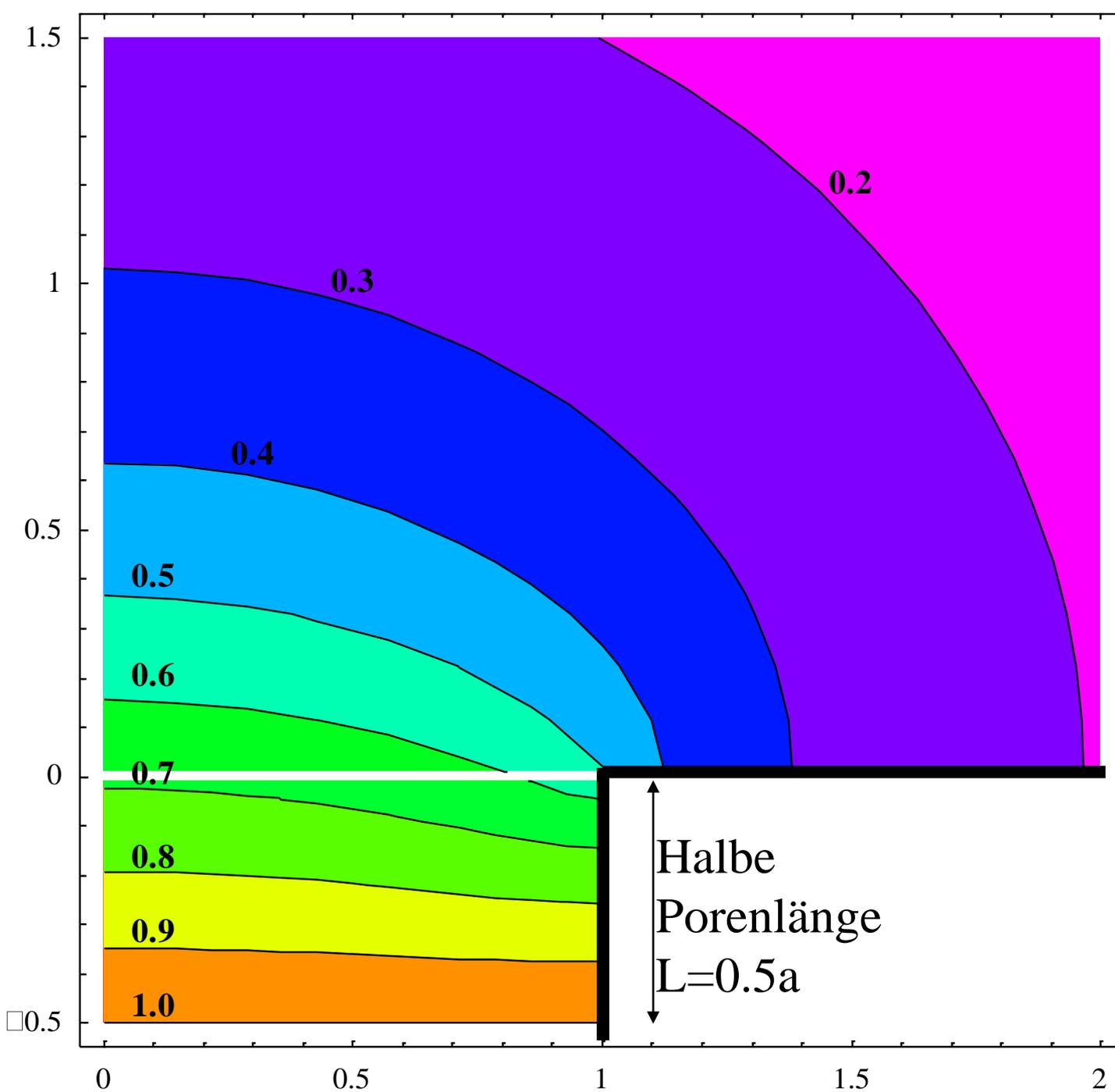


Fluss durch eine Pore (normiert auf den Fluss einer unendlich dünnen Membran) als Funktion der halben Porenlänge in Einheiten des Porenradius a

Konzentrationsprofil
einer unendlich
dünnen Pore mit dem
Radius $a=1$

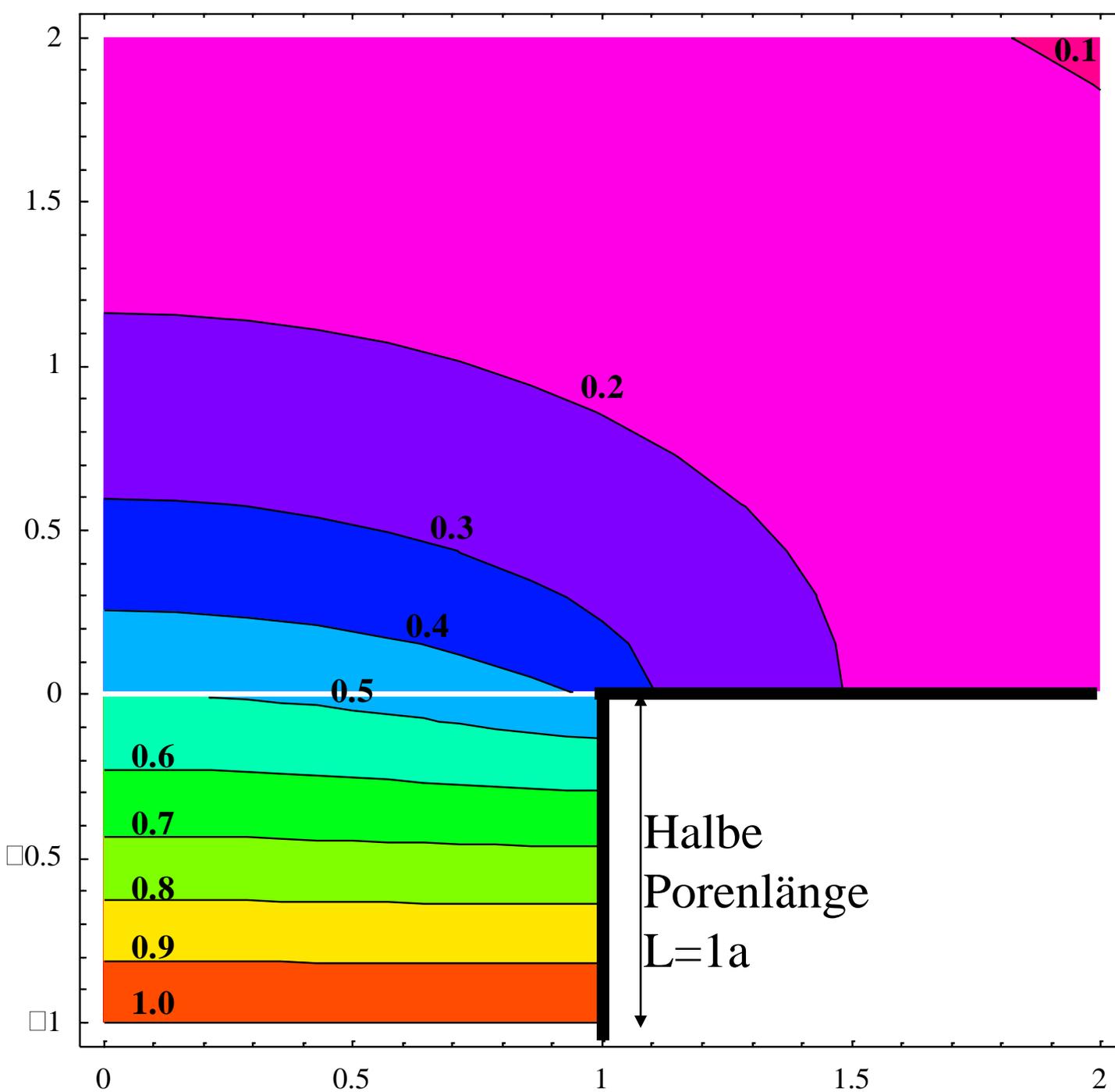


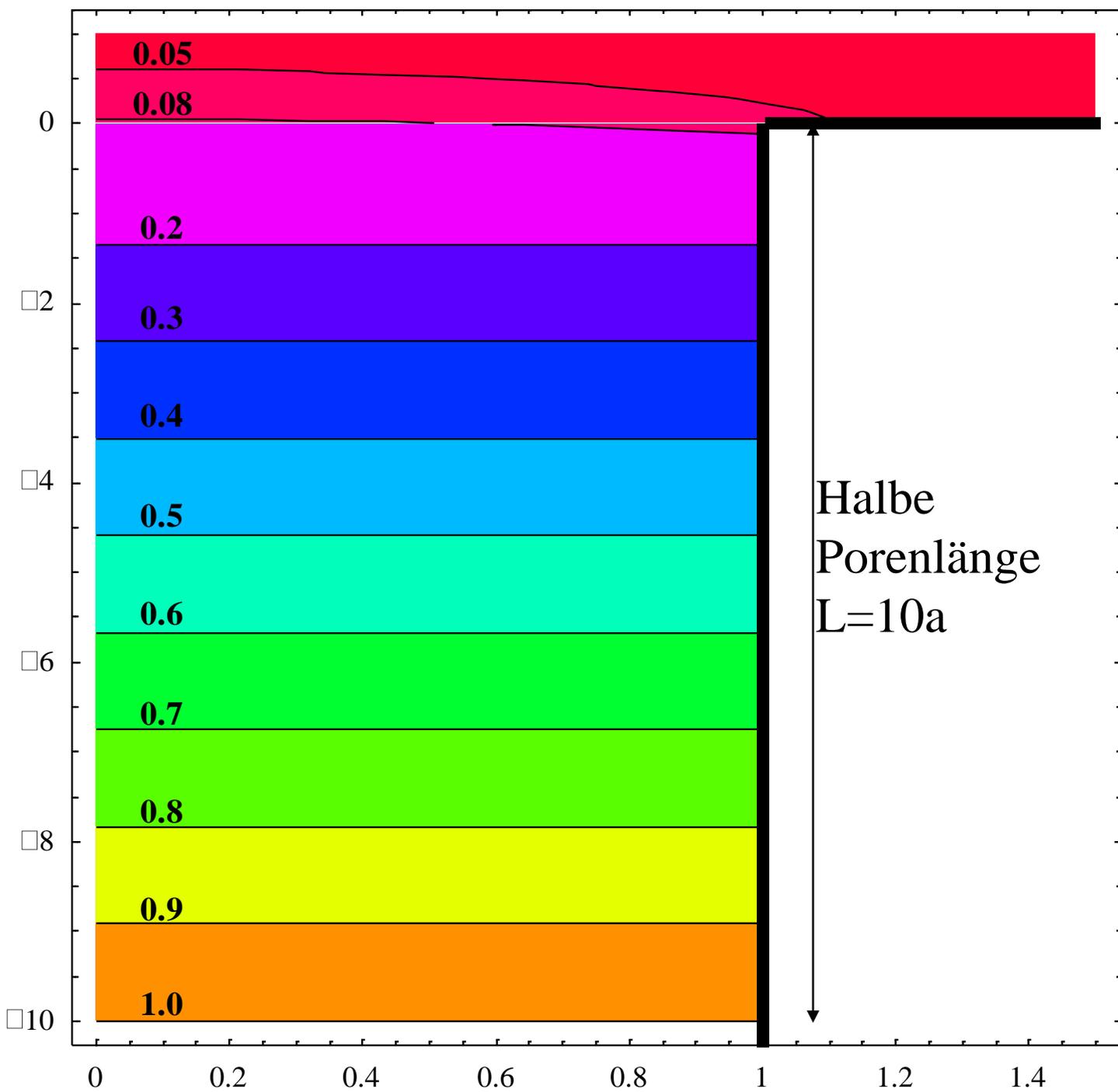
Konzentrationsprofil
einer Pore mit dem
Radius $a=1$ und der
Länge 1



□ 0.5

Konzentrationsprofil
einer Pore mit dem
Radius $a=1$ und der
Länge 2

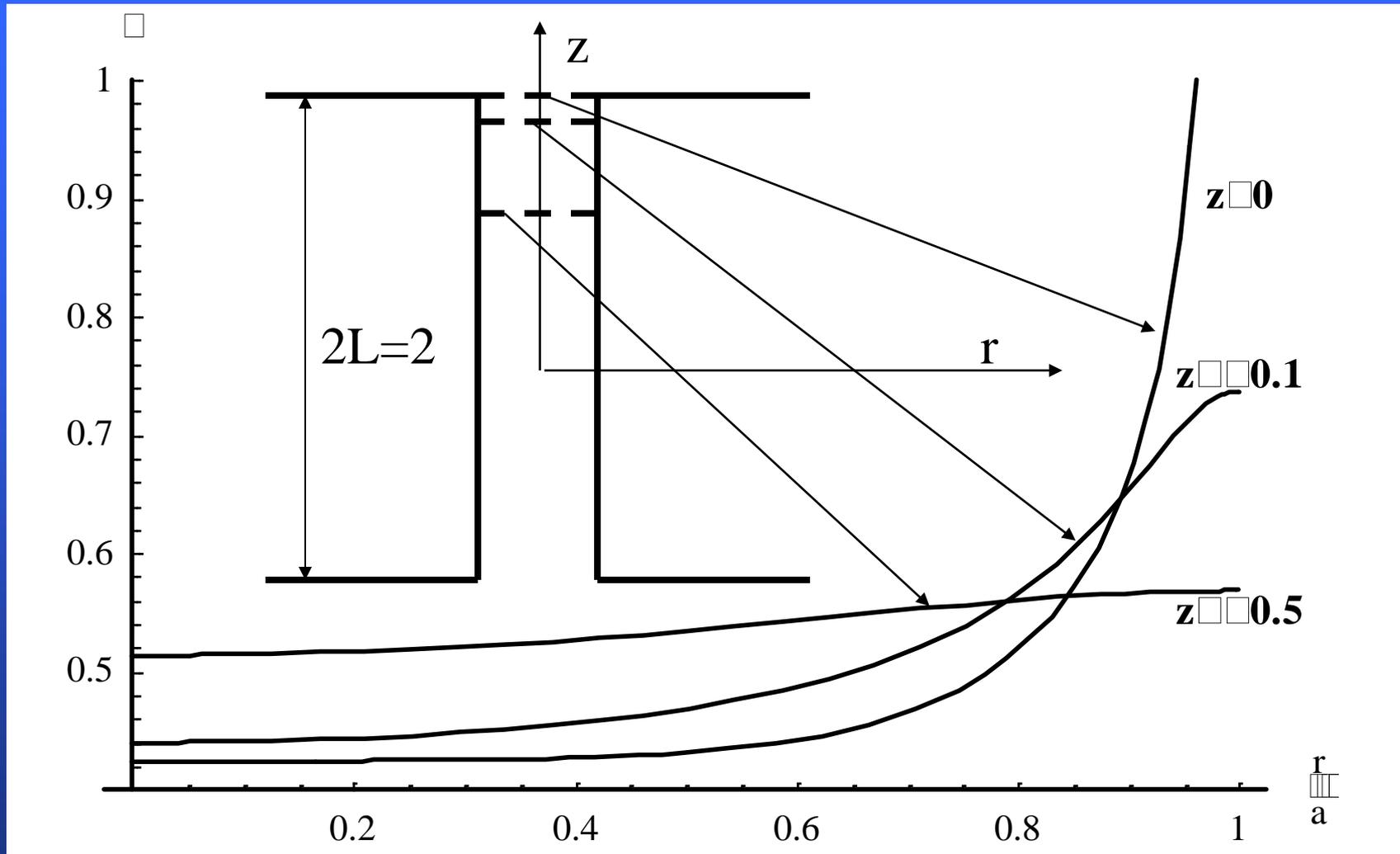




Konzentrationsprofil einer Pore mit dem Radius $a=1$ und der Länge 20



Lokaler Fluss an unterschiedlichen Positionen innerhalb der Pore



Erweiterung des vorhandenen Ansatzes

Halbraum=HR
 → Newtonsches
 Potential

$$\begin{cases} w_{HR}|_{z=0^+} = w_{Pore}|_{z=0^-} \\ \sigma_{HR}|_{z=0^+} = \sigma_{Pore}|_{z=0^-} \end{cases}$$

Anschluß

$$\begin{cases} w_{Pore}|_{z=-z_0+0} = w_{Pore}|_{z=-z_0-0} \\ \sigma_{Pore}|_{z=-z_0+0} = \sigma_{Pore}|_{z=-z_0-0} \end{cases}$$

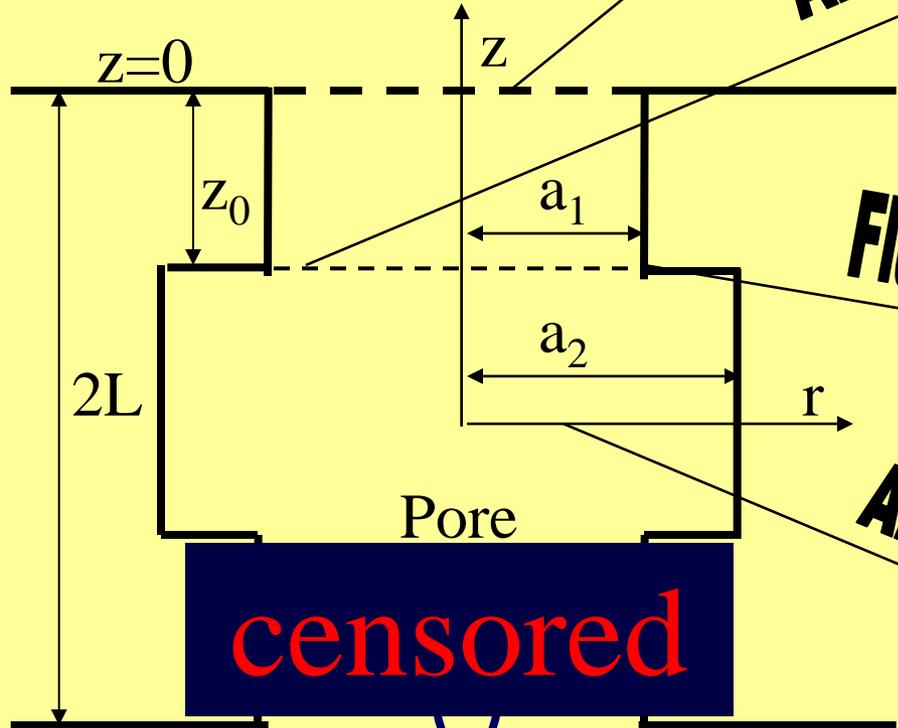
Fluß am Rand

$$\left. \frac{\partial w_{Pore}}{\partial r} \right|_{r=a_1, a_2} = 0$$

Anfangswert

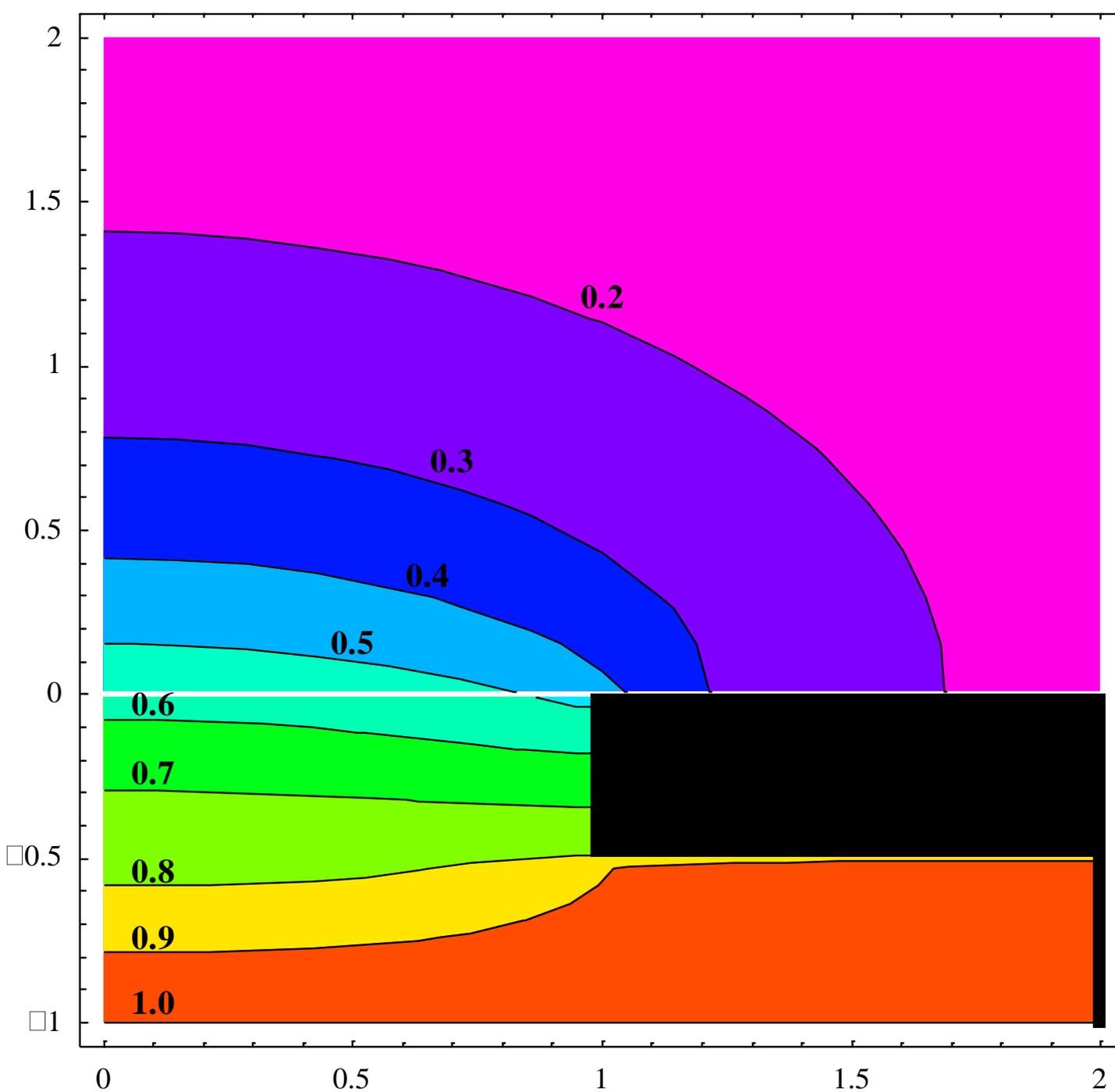
$$\text{und } \left. \frac{\partial w_{Pore}}{\partial z} \right|_{z=-z_0, r>a_1} = 0$$

$$w_{Pore}|_{z=-L} = \frac{w^+ + w^-}{2}$$



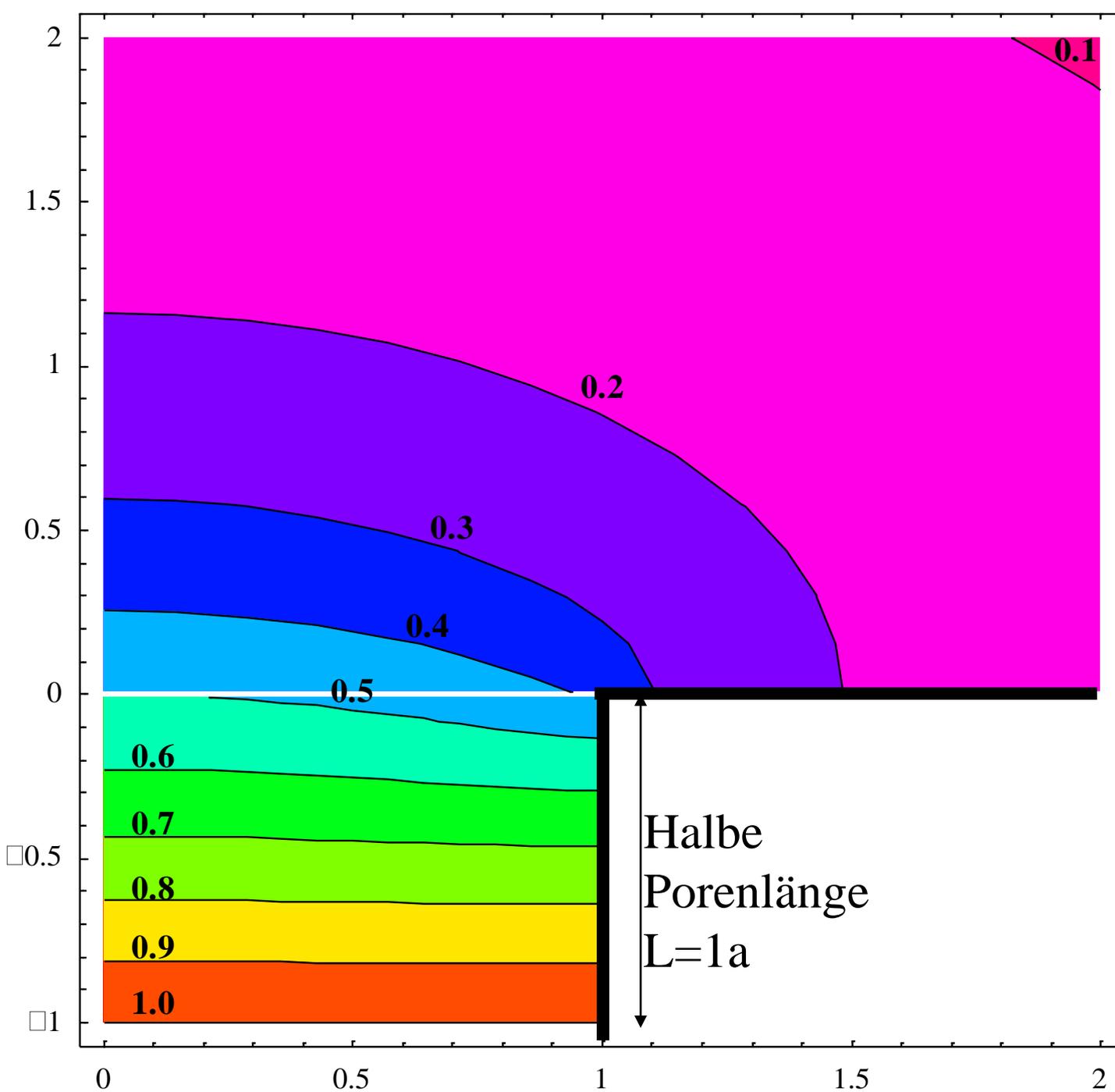
censored

Konzentrationsprofil
einer randverjüngten
Pore



Halbe
Porenlänge
 $L=1a$

Konzentrationsprofil
einer Pore mit dem
Radius $a=1$ und der
Länge 2



Zusammenfassung und Ausblick

- Diffusion durch eine unendlich dünne Membran mit der Schwerpunktabschätzung
 - mehrere kreisförmige und elliptische Poren
 - Wechselwirkungen zwischen den Poren (Porengröße)
 - einfache Lösungen für alle Polygonanordnungen
 - Spezieller Lösungsansatz für Poren- und Halbraum:
 - analytische Lösung für zylinderförmige Poren
 - Porenlänge
 - Porenform (durch Erweiterung des vorhandenen Ansatzes)
-



Applications

- Diffusion based devices (optimum structural solutions)
 - W **censored** ed
 - Next generation of rechargeable batteries (e-car)
 - Light weight fuel storage
 - Better understanding of bio-processes
 - Bionical, biotechnical and medical applications
 - Optimized freshwater cleaning
 - Optimized desalination of sea water
 - ... and more
-

