

## Einführung in das Wissenschaftliche Rechnen (SS 2020)

### Praktikumsblatt 10

Bearbeitungszeitraum: 02.07.2020 – 10.07.2020

#### **Aufgabe 21** *Poisson-Problem mit gemischten Randbedingungen*

Wir betrachten das Poisson-Problem

$$\begin{cases} -\Delta u = f & \text{in } \Omega, \\ u = 0 & \text{auf } \partial\Omega^D, \\ \nabla u \cdot \mathbf{n} = 0 & \text{auf } \partial\Omega^N, \end{cases}$$

Als Gebiet verwenden wir  $\Omega = (0, 1)^2$  mit dem Dirichlet-Rand  $\partial\Omega^D = [0, 1] \times \{0\} \cup \{0\} \times [0, 1]$  und dem Neumann-Rand  $\partial\Omega^N = (0, 1) \times \{1\} \cup \{1\} \times (0, 1)$ . Die rechte Seite  $f: \Omega \rightarrow \mathbb{R}$  sei so gewählt, dass die exakte Lösung durch  $u(x, y) = \sin(\pi/2x) \sin(\pi/2y)$  gegeben ist.

Für dieses Beispiel wollen wir mit Hilfe der Finite-Elemente-Methode eine Lösung berechnen und die experimentelle Konvergenzordnung bestimmen.

- (a) Erstellen Sie für das Problem eine Datenkarte. Definieren Sie die Funktion `fun_f` für die rechte Seite sowie die exakte Lösung `fun_uEx` und deren Gradient `fun_grad_uEx`.

Definieren Sie für die Dirichlet-Randbedingung die Funktionen

```
fun_xD = @(y) (y(:,1) < 1e-8 | y(:,2) < 1e-8),  
fun_uD = @(y) zeros(size(y,1),1).
```

Hierbei gibt `fun_xD` den Dirichlet-Rand an und `fun_uD` definiert die eigentliche Dirichlet-Randbedingung. Erstellen Sie ebenso für die Neumann-Randbedingung die zugehörigen Funktionen `fun_xN` und `fun_uN`.

- (b) Berechnen Sie die Lösung des Poisson-Problems mit verschiedenen Polynomgraden und bestimmen Sie die experimentellen Konvergenzordnungen.

## Aufgabe 22 (P) Singuläre Lösung

Wir betrachten erneut das Poisson-Problem

$$\begin{cases} -\Delta u = f & \text{in } \Omega, \\ u = u^D & \text{auf } \partial\Omega, \end{cases}$$

wobei wir für  $\Omega$  ein Gebiet mit einer einspringenden Ecke verwenden. Die rechte Seite  $f$  und die inhomogene Dirichlet-Randbedingung  $u^D$  seien dabei so gewählt, dass die exakte Lösung durch

$$u(r, \varphi) = r^{2/3} \cos(2/3 \varphi)$$

gegeben ist. Beachten Sie die Darstellung der Lösung in Polarkoordinaten.

In dieser Aufgabe wollen wir für dieses Beispiel eine Lösung mit Hilfe der Finite-Elemente-Methode berechnen und die experimentelle Konvergenzordnung bestimmen.

- Erstellen Sie eine neue Datenkarte, in der Sie als Gebiet 'C', für das *Corner-Gebiet*, angeben und die Daten zum Problem speichern. Wie zuvor können Sie die exakte Lösung, deren Gradienten und die Dirichlet-Bedingung in eigenen m-Dateien als `function` speichern.
- Berechnen Sie eine Lösung des Poisson-Problems und bestimmen Sie die experimentelle Konvergenzordnung. Wiederholen Sie die Konvergenzanalyse für verschiedene Polynomgrade ( $p_d > 1$ ).

Beschreiben Sie Ihre Beobachtungen zur Konvergenzordnung. Stehen die beobachteten Konvergenzordnungen im Widerspruch zur theoretischen Fehlerschranke der Finite-Elemente-Methode?

Vergleichen Sie gegebenenfalls die experimentelle Konvergenzordnung mit Ihren Resultaten aus Aufgabe 14, in der Sie die Finite-Differenzen-Methode verwendet haben.

- Anstatt das Gitter in jedem Schritt global zu verfeinern, wollen wir nun eine adaptive Gitterverfeinerung implementieren.

- Implementieren Sie hierzu im Steuer-Skript nach dem Abschnitt *% A posteriori data* eine Funktion `hf = @(x) ...`, welche den Abstand zur Ecke bestimmt.
- Implementieren Sie weiter eine Funktion

```
fun_mark = @(xmsh) refine_down_to_h(xmsh,hf);
```

welche diejenigen Zellen markiert, deren Diameter  $dx = dGmeshdiams(msh)$  größer ist, als der Abstand zur einspringenden Ecke ( $hxc = hf(dGmeshpoints(msh))$ ), also einen Vektor mit Werten 1, falls  $dx > hxc$  und 0 sonst, zurückgibt.

- Anstelle des Skripts `run_multiple`, führen Sie das Löser-Skript `stationary_cG_2d.m` in einer Schleife mit dem Index `prerefssteps`, neun Mal aus. Speichern Sie die Anzahl an Freiheitsgraden und die Fehler. Rufen Sie zusätzlich in jedem Schleifendurchlauf die Funktion `dGmeshdiagnosis(msh)` auf, um Informationen über das Gitter zu erhalten.
- Bestimmen Sie schließlich die experimentelle Konvergenzordnung der Fehler `ERR` mit der Anzahl an Freiheitsgraden `NN`.
- Was beobachten Sie? Welche Konvergenzordnung erhalten Sie? Beachten Sie, dass diese nun mit Hilfe der Anzahl an Freiheitsgraden bestimmt wurde ( $ERR \sim N^{eoc/2}$ ).

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

In dieser Aufgabe modellieren wir die Einlagerung von Lithium in Elektrodenpartikel von Lithium-Ionen Batterien. Während dieses Prozesses kann es aufgrund von Umstrukturierungen im Elektrodenmaterial energetisch vorteilhaft sein, dass sich zwei Phasen mit hoher und niedriger Lithium-Konzentration ausbilden.

Sei  $\Omega = (0, 1)$  das Gebiet des Elektrodenpartikels mit innerem Rand  $\Gamma_0 = \{0\}$  und äußerem Rand  $\Gamma_1 = \{1\}$ , über den die Einlagerung stattfindet. Bis zur Zeit  $T = 0.98$  werde das Partikel mit einem uniformen Ladestrom vollständig geladen. Als Modellgleichung betrachten wir das Anfangsrandwertproblem: Finde die Lithium-Konzentration  $c: [0, T] \times \overline{\Omega} \rightarrow [0, 1]$  und das chemische Potential  $\mu: [0, T] \times \overline{\Omega} \rightarrow \mathbb{R}$ , sodass gilt

$$\begin{cases} \partial_t c = \nabla \cdot (m \nabla \mu) & \text{in } (0, T) \times \Omega \\ \mu = f'(c) - \kappa \Delta c & \text{in } (0, T) \times \Omega \\ \nabla c \cdot \mathbf{n} = 0 & \text{in } (0, T) \times \partial\Omega \\ \nabla \mu \cdot \mathbf{n} = 0 & \text{in } (0, T) \times \Gamma_0 \\ \nabla \mu \cdot \mathbf{n} = \mu^N & \text{in } (0, T) \times \Gamma_1 \\ c(0, \cdot) = c_0 & \text{in } \Omega, \end{cases}$$

mit dem Diffusionskoeffizienten  $m = 1$ , dem Phasenfeld-Parameter  $\kappa = 5 \times 10^{-3}$  und der chemischen freien Energiedichte  $f(c) = 4.5c(1 - c) + c \log(c) + (1 - c) \log(1 - c)$ . Als uniformen Ladestrom verwenden wir  $\mu^N = -1$  und als Anfangskonzentration  $c_0 = 0.01$ .

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

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

mit der Masse-Matrix  $M = (\varphi_i, \varphi_j)$  und der Steifigkeits-Matrix  $S = (\nabla \varphi_i, \nabla \varphi_j)$ .

Zur Lösung des Problem stellen wir Ihnen das Löser-Skript `cahn_hilliard_1d.m` zur Verfügung, welches Sie an geeigneten Stellen ergänzen sollen. Zusätzlich erhalten Sie die Datenkarte `data_ch_1d.m` und das Steuer-Skript `demo_ch_1d.m`.

- (a) Eliminieren Sie formal die Variable  $\mu_h$  für das chemische Potential in der diskreten Formulierung und stellen Sie eine Gleichung der allgemeinen Form  $y' = f(t, y)$  für das semi-diskrete zeitabhängige Problem auf. Ergänzen Sie im Löser-Skript die Funktion

$$\text{odeF} = @(\mathbf{t}, \mathbf{x}) \dots$$

Verwenden Sie für die Inverse der Masse-Matrix `invMc = inv(Mc)`. Die Steifigkeits-Matrix erhalten Sie mit `Sc` und die Neumann-Bedingung ist gegeben durch `muN`. Die chemische freie Energiedichte und deren Ableitung sind als  $f = \text{fun\_F}$  und  $f' = \text{fun\_G}$  gespeichert.

- (b) Wählen Sie einen geeigneten *MATLAB*-ODE-Löser und übergeben Sie diesem die ODE-Funktion `odeF`, das Zeitintervall `[Tini, Tend]`, die Anfangsbedingung `u0`, sowie zusätzliche Optionen. Setzen Sie die relative (`1e-6`) und absolute (`1e-8`) Toleranz.

Probieren Sie mehrere Löser aus und variieren Sie die Toleranzen. Welcher Löser eignet sich am besten?

- (c) Lösen Sie das Anfangsrandwertproblem und beobachten Sie die zeitliche Entwicklung der Einlagerung von Lithium in das Elektrodenpartikel. Beobachten Sie insbesondere die Phasen-Separation. Was passiert gegen Ende mit den beiden Phasen wenn das Partikel vollständig gefüllt ist?

Als Faustregel gilt: Die Breite des Phasenübergangs  $\sim \sqrt{\kappa}$  sollte mindestens mit 10 Freiheitsgraden aufgelöst sein. Bestimmen Sie für lineare Finite-Elemente ( $pd=1$ ) eine untere Schranke für  $n_{cpd}$ . Wie ändert sich die Schranke für größere Polynomgrade  $pd$ ?

- (d) Abschließend wollen wir noch die Entwicklung der freien Energiedichte  $eng$  des Systems betrachten. Tragen Sie dazu in das `figure` mit der Nummer `fig.eng` die theoretische chemische freie Energiedichte  $f$  und die tatsächliche freie Energiedichte des Systems gegenüber dem Ladezustand  $soc$  des Partikels auf. Aufgrund der Annahme eines uniformen Ladestroms kann der Ladezustand durch  $soc = 0.01 + ts$  angegeben werden.

Wie verhalten sich die theoretische und die tatsächliche Kurve?