

**Anwendung der  
Finite-Elemente-Heterogene-Multiskalen-Methode auf  
thermische Prozesse in großformatigen  
Lithium-Ionen-Batterien**

Zur Erlangung des akademischen Grades eines

DOKTORS DER NATURWISSENSCHAFTEN

von der KIT-Fakultät für Mathematik des  
Karlsruher Instituts für Technologie (KIT)  
genehmigte

DISSERTATION

von

Zoltan Veszelka

Tag der mündlichen Prüfung: 22.02.2022

1. Referent: Prof. Dr. Willy Dörfler
2. Referent: Prof. Dr. Christian Wieners

# Danksagung

Die vorliegende Dissertation ist zwischen 2016 und 2022, während meiner Zeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Angewandte und Numerische Mathematik (IANM) am Karlsruher Institut für Technologie (KIT), entstanden. Im Folgenden möchte ich mich bei denjenigen bedanken die mich während dieser Zeit begleitet und mir beim Erstellen der Arbeit geholfen haben.

An erster Stelle möchte ich meinem Erstbetreuer und Leiter der Arbeitsgruppe Prof. Dr. Willy Dörfler dafür danken, dass ich an diesem Thema im Rahmen des SiMET-Graduiertenkollegs arbeiten durfte. Ich schätze die Freiheiten, die ich während der Arbeit bekommen habe, sehr. Er war wortwörtlich immer erreichbar. Ohne seiner Geduld, Erfahrung und Rat wäre diese Arbeit nicht zustande gekommen. Unsere sowohl fachliche als auch nicht-fachliche Gespräche waren immer sehr interessant.

Prof. Dr. Christian Wieners möchte ich für die Übernahme der Rolle des Zweitbetreuers danken. Seine Expertise und Kommentare in der Endphase der Arbeit haben dazu geführt, dass ich verschiedene Aspekte aus einem anderem Blickwinkel sehen und diese umfassender untersuchen konnte.

Weiter möchte ich mich bei allen aktuellen und ehemaligen Mitarbeitern der Arbeitsgruppe und des Instituts bedanken. Die Kicker-Duelle werden genauso für immer in Erinnerung bleiben wie die sowohl fachliche als auch nicht-fachliche Diskussionen im Büro im Mathebau, in den Kaffeepause oder in letzter Zeit online. Sie haben dazu beigetragen, dass mit Freude ins Büro gegangen bin. Dieses habe ich jahrelang mit Fabian Castelli geteilt. Wir haben uns immer gut verstanden und hatten viel Spaß zusammen. Ich bin dankbar, dass ich während meiner Zeit zahlreiche Studenten in der Lehre und der Forschung betreuen durfte. Sie haben die Arbeit viel leichter gemacht. Insbesondere viel bedeutet hat mir die Betreuung der Masterarbeit von Martin Gontscharow, die das Ergebnis einer mehrjährigen erfolgreichen Zusammenarbeit war.

Ich kann gar nicht hoch genug schätzen, dass ich als Assoziierter Teil des SiMET-Graduiertenkollegs sein durfte. Während den zahlreichen Events und Workshops habe ich Leute kennenlernen dürfen mit denen ich mich nicht nur auf fachlicher, sondern auch auf persönlicher Ebene sehr gut verstanden habe. Mit vielen verbindet mich auch noch nach dem Ausscheiden aus dem Kolleg eine Freundschaft. Was die fachliche Zusammenarbeit betrifft bedanke ich mich bei Sabine Paarmann und für die jahrelange Zusammenarbeit bei Oliver Queisser. Ohne seinem Modell wäre die Arbeit nicht zustande gekommen.

---

Außerhalb des KITs möchte ich mich bei den aktuellen und ehemaligen Mitgliedern der Tennisabteilung des KIT-SCs und meiner WG bedanken. Mit vielen Spielern und Spielerinnen stehe ich schon seit fast 10 Jahren auf dem Platz. Die gemeinsam auf und neben den Platz verbrachte Zeit hat für mich immer als Ausgleich zu der Arbeit am KIT gedient und somit erheblich zum Erfolg der Promotion beigetragen. Meine Mitbewohner in der WG haben mich insbesondere in den letzten zwei Jahren in der Corona-Zeit praktisch durchgehend ertragen müssen. Dass sie das gemacht haben und wir auch noch viel Spaß hatten, dafür bin ich sehr dankbar. Unvergessen bleiben werden die gemeinsamen Spikeball-Spiele und die Football-Abende.

Als Abschluss möchte ich meiner Familie danken. Ohne der Unterstützung meiner Eltern hätte ich nicht in Deutschland studieren, geschweige promovieren können. Sie haben mich aus der Ferne ermutigt diesen Weg am KIT zu gehen. Zu guter Letzt möchte ich ausdrücklich meiner Schwester Dalma danke! Sie hat mich immer motiviert, aber wenn es nötig war auch kritisiert und hinterfragt. Danke!

Karlsruhe, im März 2022  
Zoltan Veszelka

# Inhaltsverzeichnis

<b>1. Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>2. Grundlegendes</b>	<b>6</b>
2.1. Mathematische Notationen . . . . .	6
2.2. Definitionen, Lemmata und Sätze . . . . .	8
<b>3. Batteriemodell</b>	<b>10</b>
3.1. Funktionsweise einer Batterie . . . . .	10
3.2. Geometrie . . . . .	11
3.3. Modellgleichung . . . . .	14
<b>4. Homogenisierung</b>	<b>19</b>
4.1. Motivation der Homogenisierung . . . . .	19
4.1.1. Problemstellung . . . . .	19
4.1.2. Lösung des Problems . . . . .	20
4.1.3. Das homogenisierte Problem . . . . .	22
4.2. Analytische Homogenisierung . . . . .	22
4.2.1. Ergebnisse – lineares 1D-Problem . . . . .	23
4.2.2. Ergebnisse – mehrdimensionale lineare elliptische Probleme . . . . .	24
4.2.3. Parabolische quasilineare Probleme . . . . .	27
4.3. Numerische Homogenisierung quasilinearere Probleme mit FE/DG-HMM . . . . .	30
4.3.1. Problemstellung . . . . .	30
4.3.2. Mikroskala . . . . .	32
4.3.3. Makroskala . . . . .	33
4.3.4. Fehleranalyse für die FE-HMM . . . . .	37
4.3.5. Adaptives FE-HMM . . . . .	40
<b>5. Implementierung in deal.II</b>	<b>43</b>
5.1. Implementierung anhand der FE-HMM-Bilinearform . . . . .	46
5.2. Optimierung der Implementierung der FE-HMM . . . . .	51
5.3. DG-HMM . . . . .	59
5.4. Adaptives FE-HMM . . . . .	66

<b>6. Parabolische Probleme mit nichtlinearen Multiskalen-Koeffizienten</b>	<b>69</b>
6.1. Homogenisierung der erweiterten nichtlinearen elliptischen Gleichung . . .	71
6.1.1. Aufstellung des homogenisierten Problems . . . . .	71
6.1.2. Lösen des homogenisierten Problems . . . . .	76
6.1.3. Validierung der Fehlerabschätzungen . . . . .	82
6.2. Homogenisierung der parabolischen Gleichung . . . . .	84
6.2.1. Validierung der Konvergenzordnung in der Zeit . . . . .	87
<b>7. Numerische Ergebnisse – Lösung des Batterieproblems</b>	<b>89</b>
7.1. Homogenisierung und Lösung der Gleichung . . . . .	90
7.2. Ergebnisse – Stack . . . . .	94
7.2.1. Bodenkühlung . . . . .	97
7.2.2. Tabkühlung . . . . .	102
7.2.3. Adaptive Gitterverfeinerung . . . . .	106
7.3. Ergebnisse – Vollständige 2D-Geometrie . . . . .	107
7.3.1. Vergleich der Boden- und der Tabkühlung . . . . .	108
7.3.2. Bodenkühlung unter Robin-Randbedingungen . . . . .	110
7.3.3. Nichtlinearer Wärmequellterm . . . . .	111
7.4. Ergebnisse – 3D . . . . .	114
<b>8. Zusammenfassung</b>	<b>117</b>
<b>A. Modellparameter</b>	<b>119</b>
A.1. Modellparameter . . . . .	119
A.2. Materialeigenschaften . . . . .	120
<b>B. Numerische Methoden – FEM und DG</b>	<b>122</b>
B.1. Kurze Herleitung der FEM . . . . .	122
B.2. Kurze Herleitung der DG . . . . .	124
B.3. Quadraturformeln . . . . .	125
<b>C. Vergleichsprinzip für quasilineare parabolische PDGln</b>	<b>127</b>

# 1. Einleitung

Seit Anfang der 1970er Jahre, als die Funktionsweise von Lithium-Ionen-Batterien (LIB) in München erforscht wurde [38, 39], haben sie sich zu einer Schlüsseltechnologie der heutigen Zeit entwickelt. Die seit 1980 funktionierende Technologie [110] wurde nach einer zehnjährigen Unterbrechung wegen mangelnder kommerziellen Nachfrage erst in 1991 von Sony auf den Markt gebracht. Seitdem ist ihre Verbreitung rasant gestiegen und sie ist heutzutage unter anderem wegen ihrer hohen Energiedichte und ihrer vielseitigen Einsatzbarkeit [134] der am meisten verwendete wiederaufladbare Energiespeicher. LIB sind in fast jedem elektrischen Endgerät zu finden, von Smartphones über Tablets und Laptops bis hin zu Powerbanks. Seit einigen Jahren werden sie auch im Bereich der Elektromobilität eingesetzt.

Um LIB abzubilden, ihr Verhalten zu untersuchen und besser verstehen zu können, wurden in den letzten Jahrzehnten verschiedene Modelle entwickelt. Die elektrochemischen Prozesse werden auf der Partikelskala (Mikroskala) im klassischen Newman-Modell [114] von 1975 mit Hilfe der Porösen-Elektroden-Theorie modelliert. Das Latz-Zausch-Modell [101] aus dem Jahr 2011 benutzt dafür Nicht-Gleichgewichts-Thermodynamik. Allerdings wird das Verhalten der LIB auch von Prozessen auf den höheren Skalen, der Elektroden- (Meso-) und der Zellskala (Makroskala), beeinflusst. Um die verschiedenen Skalen in einem Modell abzubilden, sind basierend auf den existierenden Ansätzen neue Multiskalenmodelle [69] entstanden. Einige koppeln nur die zwei kleineren Skalen [32, 31, 60], andere alle drei [83, 97, 76, 42].

Diese Modelle dienen als Grundlage von numerischen Simulationen, die die verschiedenen Sachverhalte in der Batterie approximativ darstellen und vorhersagen sollen. Die kontinuierlichen Probleme werden mit verschiedenen numerischen Methoden, wie der Finite-Elemente-Methode (FEM), der Finite-Differenzen-Methode (FDM) oder der Finite-Volumen-Methode (FVM) diskretisiert. Die nun diskreten Probleme werden entweder mit Hilfe kommerzieller Software wie MATLAB [90] (z.B. in [60]), Abaqus [91] (z.B. in [32]), COMSOL [89] (z.B. in [31, 41]) oder mit auf C++ oder Python basierten Codes wie z.B. DENIS [40] in [83] implementiert und die resultierenden Systeme gelöst.

In den Anwendungen, unter anderem in der Elektromobilität, werden allerdings um die Menge der gespeicherten Energie zu erhöhen, immer größere LIB benötigt. Diese enthalten eine Vielzahl dünner Elektrodenpaare. Das resultiert in einem heterogenen Material, welches sich in der Richtung senkrecht zu den Schichten in geringen Abständen häufig ändert. Um die im mathematischen Sinne richtige Lösung der Simulationen solcher LIB zu erhalten, müssen in den oben genannten klassischen Ansätzen sowohl die Schichten als auch die feineren Skalen mit einem sehr feinen Gitter aufgelöst werden [69]. Das hat eine hohe Anzahl an Frei-

heitsgraden und somit trotz Parallelisierbarkeit hohe Rechenzeiten zur Folge [136]. Deshalb werden für die numerischen Simulationen verbesserte Methoden benötigt.

Eine Möglichkeit ist die Modellreduktion, bei der die Komplexität des Systems basierend entweder auf Proper Orthogonal Decomposition (POD) [50, 99] oder auf die Reduzierte-Basis-Methode [127, 128, 122] reduziert wird. Zum Ersteren gehören unter anderem die Arbeiten von Cai und White [48, 47], zum Letzteren die Arbeiten von Ohlberger und Rave [117] oder von Volkwein und Wesche [137]. Diese Methoden sind vor allem für Parameterstudien geeignet, d.h. in Fällen bei denen dasselbe Modell für eine Vielzahl von Simulationen benutzt wird.

Eine andere Möglichkeit ist das Aufstellen homogener Modelle, die das effiziente Rechnen einzelner Simulationen unter Berücksichtigung der Prozesse aller Skalen bietet. Diese Modelle können mit weniger Rechenaufwand gelöst werden. Die Idee dabei ist, dass nicht das ursprüngliche System gelöst wird, sondern eines, welches unter der Annahme, dass die kleinste Skala unter bestimmten Voraussetzung, wie z.B. Periodizität, gegen Null konvergiert, aufgestellt wird. Damit wird unter Berücksichtigung der mikroskopischen Struktur, das makroskopische Verhalten des Problems beschrieben. Die Daten des homogenisierten Systems (z.B. verschiedene Koeffizienten und Materialeigenschaften) werden aus Daten der kleineren Skalen hergeleitet. Die genaue Vorgehensweise wird im Kapitel 4 dieser Arbeit weiter erläutert und diskutiert. Im Falle von LIB wird dieses Vorgehen einerseits für die Homogenisierung zwischen Mikro- und Mesoskala [84, 57, 59] und andererseits für die Homogenisierung zwischen allen Skalen [92] angewendet. Es können dabei nur Teile mit ähnlichen Eigenschaften [27, 124] oder die komplette LIB [58, 103] betrachtet werden.

Obwohl das Ziel dieser Arbeiten die effiziente numerische Simulation von LIB ist, wird ein sehr wichtiger Aspekt kaum behandelt, nämlich die Effizienz sowohl bzgl. der Rechenzeit als auch bzgl. des numerischen Fehlers. Ein Grund dafür ist, dass hauptsächlich Software mit geringer Flexibilität hinsichtlich der Solver-Optimierung benutzt wird, wie z.B. COMSOL in [103] oder OpenFOAM [81] in [124]. Ein anderer Grund ist, dass der Fokus eher auf der Modellentwicklung und nicht auf der optimalen Lösung liegt, wie z.B. in [84] oder in [92]. Es ist auch nicht zu vernachlässigen, dass bei der Solver-Optimierung, bzw. bei dem Vergleich verschiedener Solver viele Faktoren und Kriterien, die die Betrachtung kompliziert und aufwändig machen, eine Rolle spielen. Dazu gehören unter anderem die zeitliche und räumliche Diskretisierung, das zugrunde liegende Gitter, die Parallelisierbarkeit und der benötigte Arbeitsspeicher. Ein solcher Vergleich und Optimierung wurde vom Autor dieser Arbeit in [136] anhand ausgewählter Kriterien durchgeführt. In dieser Arbeit werden diese aufgegriffen und weiter ausgearbeitet.

Alle oben erwähnten Arbeiten zur Homogenisierung von LIB basieren auf zwei Methoden der analytischen mathematischen Homogenisierung, nämlich auf die asymptotische Entwicklung [120, 56] und auf Volume-Averaging [141]. Beim Ersteren wird mit Hilfe einer Reihenentwicklung der Lösung und der Zerlegung der Differentialoperatoren die homogenisierte Gleichung auf der höheren Skala hergeleitet. Bei dieser Vorgehensweise treten Probleme auf der kleineren Skala auf, deren Lösung für die Berechnung der Daten auf der Macroskala benötigt wird. So fließen die Daten der Mikroskala in das homogenisierte Problem ein. Beim

Volume-Averaging werden die Daten der höheren Skala als Integrale über das entsprechende Volumen auf der niedrigeren Skala berechnet. Das entspricht praktisch der Bildung des Mittelwertes, daher auch die Bezeichnung.

Allerdings lassen sich nicht alle Prozesse in LIB effizient mit analytischer Homogenisierung lösen. Das liegt einerseits daran, dass diese nur unter bestimmten Bedingungen an die Koeffizienten der kleinen Skala, z.B. Stetigkeit, möglich ist. Andererseits erfordert die Lösbarkeit des homogenisierten Systems eine explizite punktweise Verfügbarkeit der Daten. Diese ist nur in wenigen Fällen zu gewährleisten [56, Kapitel 5.4] und ist sonst mit einem hohen zusätzlichen Rechenaufwand verbunden. Die genauen Bedingungen werden ebenfalls in Kapitel 4 dieser Arbeit diskutiert.

Zu solchen Prozessen gehören unter anderem die im Fokus dieser Arbeit stehenden thermischen Prozesse von LIB. Diese haben vor allem bei großformatigen Zellen einen großen Einfluss auf die Lebensdauer und auf die Kapazität einer LIB [34, 139, 140]. Deshalb spielen sie in der Batteriemodellierung eine immer wichtigere Rolle. Das wird durch eine Vielzahl solcher Modelle belegt, die in den letzten Jahren entstanden sind. Dazu gehören thermisch-elektrochemische Modelle wie [53, 80], die Erweiterung des Latz-Zausch-Modells mit thermischen Aspekten [100] oder das dieser Arbeit zugrunde liegende und im Kapitel 3 ausführlich diskutierte Modell aus [124, 136].

Wie schon erwähnt lassen sich diese Modelle nicht effizient mit analytischer Homogenisierung lösen. Deshalb wird ein anderer Ansatz benötigt, nämlich die numerische Homogenisierung. Dabei werden die Daten des homogenisierten Modells nicht analytisch, sondern numerisch aus den Daten der feineren Skala hergeleitet. Das erlaubt die Anwendung auf ein größeres Spektrum an Problemen und eine höhere Flexibilität bei der Auswahl der genauen Methode. Dementsprechend existieren viele verschiedene Verfahren, die auf diese Idee basieren. Ohne Anspruch auf Vollständigkeit gehören die Multiskalen-Finite-Elemente-Methode (MS-FEM) [72, 25], die variationelle Multiskalen-Methode [115] oder Wavelets basierte Homogenisierung [65, 74] dazu.

Diese Arbeit basiert auf einer weiteren Methode, auf die Heterogene-Multiskalen-Methode (HMM). Sie eignet sich unter anderem für Probleme, bei denen das homogenisierte Problem, bzw. deren Koeffizient, sich nicht explizit berechnen lässt. Die thermischen Modelle von LIB gehören zu solchen. Die HMM wurde von Weinan E und Bjorn Engquist in [70] eingeführt und in [71] aufgearbeitet. Sie bietet ein Framework für das Lösen von Multiskalenproblemen. Dieses beinhaltet je ein numerisches Verfahren auf der Mikro- und Makroskala und die Kopplung dieser über verschiedene mathematische Operatoren. Sie bietet auch eine a-priori Fehlerabschätzung, welche für die Anwendbarkeit eine wichtige Rolle spielt, da sich so Aussagen über den Fehler treffen lassen, ohne die Lösung explizit zu kennen. Da für die verwendeten Methoden auf der Mikro- und Makroskala verschiedene Möglichkeiten existieren, die sich miteinander auch kombinieren lassen, gibt es für die genaue Umsetzung von der HMM viele Optionen. Zum Beispiel kann auf beiden Skalen die Finite-Differenzen-Methode (FDM) verwendet werden, was in FD-HMM resultiert [9]. Analog ist die Reduzierte-Basis-Finite-Elemente-HMM (RB-FE-HMM) [7, 8] und die Pseudospektrale-Finite-Elemente-HMM (FES-HMM) [10] aufgebaut. Eine weitere, zu diesen von der Struktur her ähnliche Methode



ist die *Heterogene-Zwei-Skalen-Finite-Elemente-Methode* ( $FE^2$ -Methode) [132]. Sie wurde für Multiskalenprobleme im Bereich der Elastizität und der Plastizität entwickelt.

Zwei weitere Möglichkeiten der HMM resultieren aus der Verwendung der FEM auf der Mikroskala. Falls sie auch auf der Makroskala benutzt wird, erhält man die Finite-Elemente-Heterogene-Multiskalen-Methode (FE-HMM). Die Anwendung der Symmetric-Interior-Penalty-Discontinuous-Galerkin-FEM (IP-DG) auf der höheren Skala führt zu der Discontinuous-Finite-Elemente-HMM (DG-HMM). Beide wurden von Abdulle in [17] bzw. in [3] für elliptische Probleme eingeführt und werden in dieser Arbeit als Grundlage benutzt. Ihre Wahl basiert auf der Anwendbarkeit auf das zu bearbeitende Problem und der Implementierbarkeit in der Open Source Finite-Elemente-Bibliothek *deal.II* [35, 29]. Beide Gründe werden ausführlich in späteren Kapiteln behandelt. Seit ihrer Einführung wurde vor allem die FE-HMM von Abdulle und auch von anderen Autoren sowohl auf Probleme der Elastizität [2, 73, 20], auf nichtlineare [14], quasilineare [19], parabolische [13, 6] und hyperbolische [11], als auch auf Probleme auf perforierten Gebieten [87] erweitert und angewendet. Vor allem die Anwendung auf quasilineare Probleme spielt für diese Arbeit eine große Rolle, da es sich bei dem hier behandelten Batterieproblem um ein solches Problem handelt.

Bis jetzt wurden alle Aspekte der Batteriemodellierung und der mathematischen Homogenisierung, die bei der Entstehung dieser Arbeit eine Rolle spielen und weiterhin berücksichtigt werden, kurz erwähnt. Damit kann deren Ziel und Aufgabenstellung formuliert werden.

Das Ziel dieser Arbeit ist eine effiziente numerische Simulation von thermischen Prozessen in großformatiger LIB mit Hilfe von analytischer und numerischer Homogenisierung. Da die Daten auf der Elektrodenkala zur Verfügung stehen – sie basieren auf die Veröffentlichungen [136] und [124] – und man am makroskopischen Verhalten interessiert ist, wird nur zwischen den zwei höheren Skalen homogenisiert. Die Schwierigkeit bei der Lösung des Problems liegt an der Struktur der zeitabhängigen Partiellen Differentialgleichung (PDGL), die diese Prozesse beschreibt. Sowohl alle auftretenden Koeffizienten als auch der Quellterm sind wegen der Abhängigkeit von den verschiedenen Schichten der LIB nichtlinear, unstetig und schnell oszillierend. Daher erfüllen sie die Bedingungen der analytischen Homogenisierung nicht und das Problem lässt sich wegen der Mehrzahl an Multiskalen-Koeffizienten auch nicht direkt mit numerischer Homogenisierung lösen.

So ergeben sich die drei wichtigen Aufgabenstellungen dieser Arbeit, die auch deren Beitrag darstellen:

- Effiziente Implementierung des FE- und DG-HMM Frameworks in *deal.II*.
- Erweiterung dieser auf Probleme mit mehreren unstetigen und nichtlinearen Multiskalen-Koeffizienten.
- Anwendung der entwickelten Methode auf thermische Simulationen in LIB.

Der erste Punkt wird in Kapitel 5 behandelt. Dafür wird ein elliptisches Testproblem mit bekannter expliziter Lösung betrachtet. Die Flexibilität von *deal.II* ermöglicht es ein besonderes Augenmerk auf die effiziente Implementierung zu richten. Deshalb werden die einzelnen

Komponenten von der FE- und der DG-HMM untersucht und nacheinander bzgl. Rechenzeit und Approximationsfehler optimiert. Die aus der Literatur bekannte optimale Konvergenzordnung wird für beide Methoden an geeigneten Testproblemen mit gegebener analytischer Lösung gezeigt.

Für den zweiten Punkt wird das in Kapitel 5 entwickelte Framework in Kapitel 6 mit Hilfe analytischer Homogenisierung für entsprechende Probleme erweitert und weiterentwickelt. Die optimale Konvergenzordnung in Ort und Zeit wird ebenso wie in Kapitel 5 an geeigneten Testproblemen gezeigt. Die dazugehörigen Fehlerabschätzungen im Ort werden auch hergeleitet.

Die Kapitel 5 und 6 zugrunde liegende analytische und numerische Homogenisierung wird in Kapitel 4 vorgestellt. Dabei werden erst die für diese Arbeit wichtigen Ergebnisse der analytischen Homogenisierung beschrieben. Es wird auch darauf eingegangen, warum diese sich nicht auf das zu lösende Problem anwenden lassen. Im Anschluss wird analog bei der numerischen Homogenisierung, insbesondere bei FE- und DG-HMM, vorgegangen. Deren Komponenten werden mit Hinblick auf die Implementierung in *deal.II* betrachtet. Die in diesem und in allen anderen Kapiteln verwendete Notation wird in Kapitel 2 vorgestellt.

Um den dritten und auch letzten Punkt der Aufgabestellung bearbeiten zu können, wird in Kapitel 3 das Batterieproblem dieser Arbeit vorgestellt. Dabei wird erst kurz die Funktionsweise einer LIB mit Schwerpunkt auf den thermischen Prozessen beschrieben. Danach wird die Geometrie der Batterie und ihre Implementierung in *deal.II* beschrieben. Schließlich wird die die thermischen Prozesse beschreibende PDGl diskutiert.

Im siebten Kapitel werden alle Komponenten dieser Arbeit zusammengeführt und die entwickelte Methode auf das Batterieproblem angewendet. Erst wird gezeigt, ab welcher Schichtzahl sich der homogenisierte Ansatz lohnt. Danach werden mit Hilfe einer a-priori Adaptivität verschiedene Kühlmöglichkeiten über die Randbedingungen realisiert. Die wichtigsten Erkenntnisse der Arbeit werden schließlich in Kapitel 8 zusammengefasst.

**Vorveröffentlichungen** Das in Kapitel 3 vorgestellte Batteriemodell wurde in unserem Artikel [136] vereinfacht vorgestellt. Dort wurde allerdings nur der Stack für den 2D-Fall betrachtet. Die Gleichung wurde zwar mit nichtlinearen Koeffizienten und Wärmequellterm definiert, diskutiert wurde ausschließlich der lineare Fall.

## 2. Grundlegendes

In diesem Kapitel werden wichtige grundlegende Aspekte, wie die mathematischen Notationen und Sachverhalte, die während der ganzen Arbeit verwendet werden eingeführt.

### 2.1. Mathematische Notationen

Ein *Gebiet* in  $\mathbb{R}^d$ , welches offen, nichtleer und zusammenhängend ist, wird mit  $\Omega$ , sein Abschluss mit  $\overline{\Omega}$  und sein Rand mit  $\partial\Omega$  bezeichnet. Skalar- und tensorwertige Funktionen können entweder von der *Ortsvariablen*  $x \in \Omega$  oder sowohl von der Orts- als auch von der *Zeitvariablen*  $t \in (0, t_{\text{end}})$  mit  $t_{\text{end}} \in \mathbb{R}_{>0}$  abhängen. Dementsprechend wird der *Zeit-Ort-Zylinder* als  $\Omega_{t_{\text{end}}} := (0, t_{\text{end}}) \times \Omega$  definiert. Mit  $\partial_t v$  wird die *zeitliche Ableitung* einer Funktion  $v : \mathbb{R}_{>0} \times \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ , mit  $\partial_i v$  ihre *partielle Ableitung* nach  $x_i$  und mit  $\partial_{\mathbf{n}} v$ , mit dem *äußeren Normalenvektor*  $\mathbf{n}$ , ihre *Normalenableitung auf dem Rand* bezeichnet. Der *Gradient* von  $v$  ist  $\nabla v = (\partial_i v)_i \in \mathbb{R}^d$  und die *Divergenz*  $\nabla \cdot v = \sum_{i=1}^d \partial_i v \in \mathbb{R}$ . Im eindimensionalen stationären Fall wird die räumliche Ableitung von  $v : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$  mit  $\frac{d}{dx} v$  bezeichnet.

Konstanten werden in dieser Arbeit allgemein mit  $C \in \mathbb{R}$  bezeichnet. Das bedeutet, dass sie trotz derselben Bezeichnung innerhalb einer Gleichung bzw. Herleitung unterschiedliche Werte haben können.

Für  $k \in \mathbb{N} \cup \{0\}$  ist  $C^k(\Omega)$  der Raum der  $k$ -mal stetig differenzierbaren Funktionen. Der Teilraum von  $C^k(\Omega)$  dessen Elemente Null Randwerte haben, wird mit  $C_0^k(\Omega)$  bezeichnet. Für  $1 < p < \infty$  und  $k \in \mathbb{N}$  wird mit  $\mathcal{L}^p(\Omega)$  der *Lebesgue-Raum* und mit  $\mathcal{W}^{k,p}(\Omega)$  der *Sobolev-Raum* in  $\Omega$  bezeichnet. Für den Fall  $p = 2$  wird  $\mathcal{W}^{k,2}(\Omega) = \mathcal{H}^k(\Omega)$  geschrieben. Die Vervollständigung von  $C_0^\infty(\Omega)$  bezüglich der Sobolev-Norm  $\|\cdot\|_{\mathcal{H}^k(\Omega)}$  wird mit  $\mathcal{H}_0^k(\Omega)$  bezeichnet. Dieser Raum ist eine Verallgemeinerung für Funktionen mit Nullrandbedingungen. Der *konjugierte Exponent* von  $p$  ist  $p^* = \frac{p}{p-1}$  und  $\mathcal{W}^*$  steht für den *Dualraum* von einem allgemeinen Raum  $\mathcal{W}$ . Im Spezialfall  $\mathcal{H}^1(\Omega)$  wird aber  $(\mathcal{H}^1)^*(\Omega) = \mathcal{H}^{-1}(\Omega)$  benutzt. Falls der Raum  $\mathcal{W}$  eine *Norm* besitzt, wird für sie  $\|\cdot\|_{\mathcal{W}}$  geschrieben. Die Notation der *schwachen* bzw. der *starken Konvergenz* von  $v$  gegen  $w$  in  $\mathcal{W}$  wird folgendermaßen notiert:  $u \rightharpoonup v$  bzw.  $u \rightarrow v$ . Aus der Definition von  $\mathcal{H}^1(\Omega)$  folgt für alle  $v \in \mathcal{H}^1(\Omega)$

$$\|v\|_{\mathcal{L}^2(\Omega)} \leq \|v\|_{\mathcal{H}^1(\Omega)} \quad \text{und} \quad \|\nabla v\|_{\mathcal{L}^2(\Omega)} \leq \|v\|_{\mathcal{H}^1(\Omega)}. \quad (2.1)$$

Außerdem gilt für alle  $v \in \mathcal{H}_0^1(\Omega)$  nach [43, Satz 1.7]

$$\|v\|_{\mathcal{H}^1(\Omega)} \leq C \|\nabla v\|_{\mathcal{L}^2(\Omega)}. \quad (2.2)$$

Weiter bezeichnet

$$Y := \left[-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right]^d \subset \mathbb{R}^d \quad (2.3)$$

die *Einheitswürfel* und für  $\epsilon > 0$  ist

$$\epsilon Y := \left[-\frac{\epsilon}{2}, \frac{\epsilon}{2}\right]^d \subset \mathbb{R}^d \quad (2.4)$$

ihre skalierte Variante. Für  $Y$  wird der Raum  $\mathcal{H}_{\text{per}}^1(Y)$  als Abschluss des Raumes  $C_{\text{per}}^\infty(Y)$  definiert. Dabei beinhaltet Letzteres die  $Y$ -periodischen Funktionen in  $C^\infty(Y)$ . Im allgemeinen Fall ist  $\mathcal{W}_{\text{per}}^{1,p}(Y)$  der Unterraum von  $\mathcal{W}^{1,p}(Y)$ , dessen Elemente dieselbe Spur auf den gegenüberliegenden Seiten von  $Y$  haben. Die Räume

$$\tilde{\mathcal{H}}_{\text{per}}^1(Y) := \left\{ v \in \mathcal{H}_{\text{per}}^1(Y) \mid \frac{1}{|Y|} \int_Y v(x) \, dx = 0 \right\} \quad (2.5)$$

und

$$\tilde{\mathcal{W}}_{\text{per}}^{1,p}(Y) := \left\{ v \in \mathcal{W}_{\text{per}}^{1,p}(Y) \mid \frac{1}{|Y|} \int_Y v(x) \, dx = 0 \right\} \quad (2.6)$$

sind die Unterräume von  $\mathcal{H}_{\text{per}}^1(Y)$  bzw. von  $\mathcal{W}_{\text{per}}^{1,p}(Y)$  für dessen Elemente zusätzlich  $\frac{1}{|Y|} \int_Y v(x) \, dx = 0$  gilt.

Als Nächstes werden die Notationen, die für die FEM und DG benötigt werden, vorgestellt. Dafür wird für das Gebiet  $\Omega$  eine nach [43, Kap. 2.5] zulässige *Triangulierung*  $\mathcal{T}_h$  betrachtet. Die Elemente von  $\mathcal{T}_h$  werden *Zellen* genannt und werden, wegen der in dieser Arbeit benutzten Finite-Elemente-Bibliothek *deal.II*, als Intervalle in 1D, Vierecke in 2D und Hexaeder in 3D angenommen. Der Parameter  $h$  ist die *Gitterweite* und wird als der maximale Durchmesser der Zellen,  $h := \max_{K \in \mathcal{T}_h} h_K$ , definiert, wobei  $h_K$  der Durchmesser der Zelle  $K \in \mathcal{T}_h$  ist. Die Menge aller *Kanten* von  $\mathcal{T}_h$  ist  $\mathcal{E}$ . Mit der Menge der *inneren Kanten*  $\mathcal{E}_{\text{int}}$  und den *Randkanten*  $\mathcal{E}_b$  gilt  $\mathcal{E} = \mathcal{E}_{\text{int}} \cup \mathcal{E}_b$ . Für  $K, K^+, K^- \in \mathcal{T}_h$  und  $K^+ \neq K^-$ , werden das *Kantenmaß* als

$$h_e := \begin{cases} 2 \left( \frac{1}{|K^+|} + \frac{1}{|K^-|} \right)^{-1}, & e \in \mathcal{E}_{\text{int}}, e = K^+ \cap K^-, \\ |K|, & e \in \mathcal{E}_b, e \in K, \end{cases} \quad (2.7)$$

der *Sprung* bzw. *Mittelwert* einer stückweise glatten Funktion über  $e \in \mathcal{E}$  als

$$\llbracket v \rrbracket_e := \begin{cases} v^+ \mathbf{n}_{K^+} + v^- \mathbf{n}_{K^-}, & e \in \mathcal{E}_{\text{int}}, e = K^+ \cap K^- \\ v \mathbf{n}_K, & e \in \mathcal{E}_b, e \in K, \end{cases} \quad (2.8)$$

und als

$$\{v\}_e := \begin{cases} \frac{1}{2}(v^+ + v^-), & e \in \mathcal{E}_{int}, e = K^+ \cap K^-, \\ v, & e \in \mathcal{E}_b, \end{cases} \quad (2.9)$$

definiert. Dabei bezeichnet  $|K|$  das Volumen von  $K$ ,  $v^+$  bzw.  $v^-$  die Spur von  $v$  in  $K^+$  bzw.  $K^-$  und  $\mathbf{n}_{K^+}$  bzw.  $\mathbf{n}_{K^-}$  den äußeren Normalenvektor von  $K^+$  bzw.  $K^-$ . Auf  $K \in \mathcal{T}_h$  ist  $\mathcal{Q}^l(K)$  der Polynomraum von Grad  $l \in \mathbb{N}$  über  $K$ . Da hier  $K$  als Viereck angenommen wird, beinhaltet  $\mathcal{Q}^l(K)$  alle Polynome, die in jeder Variablen maximal Grad  $l$  haben.

## 2.2. Definitionen, Lemmata und Sätze

Nachdem alle wichtigen Notationen eingeführt wurden, werden im Folgenden die Sätze und Lemmata, die häufiger in der Arbeit verwendet werden, zitiert.

**Definition 2.1 (Lokal periodische Funktion)** [78, Def. 3.2] Eine Funktion  $v^\epsilon \in \mathcal{L}^\infty(\Omega)$  mit  $\epsilon > 0$ , heißt lokal  $\epsilon$ -periodisch, falls es eine in der zweiten Variable 1-periodische Funktion  $v : \Omega \times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$  mit

$$v^\epsilon(x) = v\left(x, \frac{x}{\epsilon}\right) \quad \text{f.f.a } x \in \Omega$$

existiert.

**Bemerkung:** Periodische Funktionen sind auch lokal periodisch, sie hängen aber nicht explizit von der Makrovariablen  $x$  ab. Weiter wird mit  $v : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$  die zu einer  $\epsilon$ -periodischen Funktion  $v^\epsilon \in \mathcal{L}^\infty(\Omega)$  gehörende 1-periodische Funktion bezeichnet. Somit gilt in diesem Fall

$$v^\epsilon(x) = v\left(\frac{x}{\epsilon}\right) \quad \text{f.f.a } x \in \Omega.$$

**Lemma 2.2 (Schwache Konvergenz periodischer Funktionen)** [52, Satz 8.2] Für eine  $\epsilon Y$ -periodische Funktion  $v^\epsilon \in \mathcal{L}^p(\epsilon Y)$  gilt für  $1 < p < \infty$  und alle beschränkten Gebiete  $D \subset \mathbb{R}^d$

$$v^\epsilon \rightharpoonup \int_{\epsilon Y} v^\epsilon(x) dx := \frac{1}{\epsilon^d} \int_{\epsilon Y} v^\epsilon(x) dx = \int_Y v(y) dy \quad \text{in } \mathcal{L}^p(D),$$

wobei  $v$  die nach Definition 2.1 zu  $v^\epsilon$  gehörende  $Y$ -periodische Funktion ist. Das bedeutet, dass die Funktion  $v^\epsilon$  schwach gegen ihren Mittelwert über  $\epsilon Y$  konvergiert.

**Bemerkung:** Die Aussage gilt auch analog für eine lokal periodischen Funktion  $v^\epsilon$  aus Definition 2.1, d.h. es gilt

$$v^\epsilon \rightharpoonup \int_{\epsilon Y} v^\epsilon(\cdot, y) dy \quad \text{in } \mathcal{L}^p(D). \quad (2.10)$$

**Definition 2.3 (Zulässiger Koeffizient)** [78, Kap. 2.1] Ein Koeffizient  $a^\epsilon : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^{d \times d}$  heißt zulässig, falls  $\Theta \geq \theta > 0$  mit

$$\begin{aligned} \theta |\xi|^2 &\leq a^\epsilon(x) \xi \cdot \xi && \text{f.f.a } x \in \Omega, \text{ für alle } \xi \in \mathbb{R}^d, \\ |a^\epsilon(x) \xi| &\leq \Theta |\xi| && \text{f.f.a } x \in \Omega, \text{ für alle } \xi \in \mathbb{R}^d \end{aligned}$$

existieren. Das bedeutet, dass  $a^\epsilon$  koerziv und gleichmäßig beschränkt ist. Koeffizienten, die diese Bedingungen mit  $\theta, \Theta > 0$  erfüllen, werden in  $\mathcal{M}(\Omega, \theta, \Theta)$  zusammengefasst.

**Bemerkung:** Die Definition gilt analog für Koeffizienten  $a^\epsilon : \Omega \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^{d \times d}$ ,  $(x, s) \mapsto a^\epsilon(x, s)$ . In diesem Fall gelten die Bedingungen gleichmäßig für jedes  $s \in \mathbb{R}$ .

**Satz 2.4 (Satz von Lax–Milgram)** [45, Satz 2.7.7] Sei  $B$  eine stetige und koerzive Bilinearform auf dem Hilbertraum  $H$ , d.h. es existieren Konstanten  $\Theta \geq \theta > 0$  so, dass

$$\begin{aligned} |B(u, z)| &\leq \Theta \|u\|_H \|z\|_H && \text{für alle } u, z \in H, \\ B(u, u) &\geq \theta \|u\|_H^2 && \text{für alle } u \in H. \end{aligned}$$

Dann hat für alle  $f \in H^*$  das Problem

$$B(u, z) = \langle f, z \rangle \quad \text{für alle } z \in H \quad (2.11)$$

eine eindeutige Lösung  $u \in H$  und es gilt

$$\|u\|_H \leq \frac{1}{\theta} \|f\|_{H^*}.$$

**Satz 2.5 (Céa's Lemma)** [52, Satz 10.4] Sei  $B$  wie in Satz 2.4 eine stetige und koerzive Bilinearform auf dem Hilbertraum  $H$  mit den Konstanten  $\theta, \Theta > 0$ . Sei  $\hat{H} \subset H$  ein abgeschlossener Unterraum und  $\hat{u} \in \hat{H}$  die Lösung von

$$B(\hat{u}, z) = \langle f, z \rangle \quad \text{für alle } z \in \hat{H}$$

mit  $f \in H^*$ . Dann gilt

$$\|u - \hat{u}\|_H \leq \frac{\Theta}{\theta} \inf_{v \in \hat{H}} \|u - v\|_H.$$

## 3. Batteriemodell

In diesem Kapitel wird das Batteriemodell, welches diese Arbeit motiviert, inklusive seiner Komponenten und besonderen Struktur vorgestellt. Es basiert auf der Arbeit von Oliver Queisser und wurde in seinem [124] und unserem gemeinsamen Artikel [136] kurz vorgestellt. Dabei wird die kommerzielle Zelle SLPB 8043140H5 von Kokam Co., Ltd. modelliert. Ihre Abbildung in *deal.II* wird in Kapitel 3.2 vorgenommen. Ebenfalls wird dort eine erste Vereinfachung des vollständigen Modells eingeführt. Zunächst wird in Kapitel 3.1 kurz die Funktionsweise von LIB erklärt. Nachdem die ablaufenden chemischen Prozesse erklärt und die Zelle modelliert wurde, wird in Kapitel 3.3 die PDGL, die diese Prozesse beschreibt, inklusive all ihrer Abhängigkeiten aufgestellt und charakterisiert. Hier wird auch auf die Wärmeentwicklung in LIB eingegangen und eine Begründung für den Homogenisierungsansatz gegeben.

### 3.1. Funktionsweise einer Batterie

LIB haben vereinfacht gesehen fünf Bestandteile, die für ihr Funktionieren notwendig und auch für diese Arbeit wichtig sind. Das sind zwei poröse Elektroden, die durch einen Separator getrennt sind und auf deren Außenseite sich je ein Stromableiter befindet. Diesen Aufbau zeigt Abbildung 3.1. Die Elektroden bestehen aus festen, sich berührenden Elektrodenpartikeln, dessen Poren in der Regel mit flüssigem Elektrolyt gefüllt sind. Daraus ergibt sich ihre poröse Struktur. Die Elektrodenpartikeln an der negativen Elektrode (Anode) bestehen meistens aus Graphit, an der positiven Elektrode (Kathode) aus einer Lithium-Metalloxid-Verbindung, z.B. Lithium-Cobalt-Oxid (LCO) oder Lithium-Nickel-Cobalt-Aluminium-Oxid (NCA). Der negative Stromableiter ist aus Kupfer, der Positive aus Aluminium. Als Elektrolyt wird eine Lösung verwendet, die aus organischen Lösungsmittel und darin gelösten Lithiumsalzen besteht. Diese Materialien werden in Kapitel 3.3 bei den thermischen Eigenschaften der Batterie eine Rolle spielen, da diese material- und temperaturabhängig sind.

Um mit der Batterie einen Verbraucher mit Strom versorgen zu können, wird dieser mit beiden Ableitertabs über einen externen Stromkreis verbunden. Bei diesem Vorgang deinterkalieren Lithium-Atome aus der Anode. Das heißt, dass sich die Lithium-Atome dabei in positive Lithium-Ionen und negative Elektronen aufspalten. Die ersteren bewegen sich durch das Elektrolyt zu der Kathode, die letzteren machen dasselbe über den externen Stromkreis und versorgen den Verbraucher mit Energie. An der Oberfläche der Kathode interkalieren die Lithium-Ionen, d.h. sie verbinden sich wieder mit Elektronen zu Lithium Atomen. Das ist so

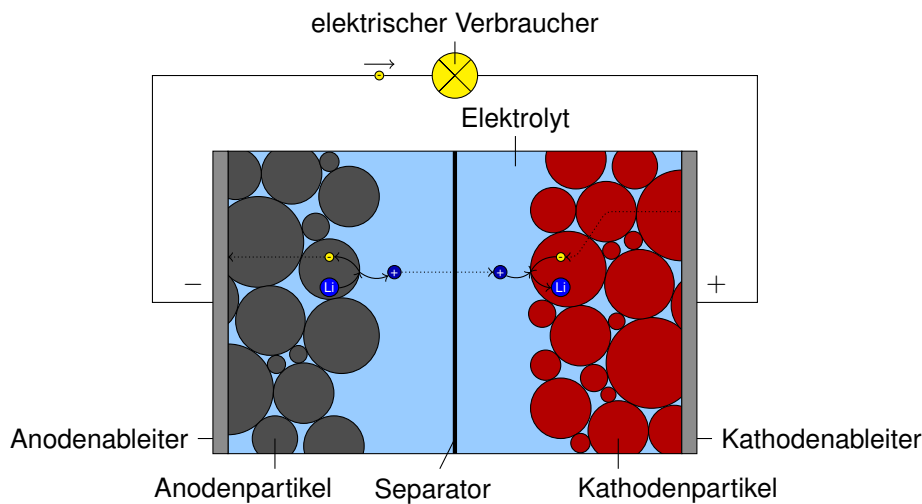


Abbildung 3.1.: Vereinfachter Aufbau einer LIB [106].

lange möglich, bis eine untere Abbruchspannung erreicht ist. Dann ist die Batterie komplett entladen.

Da LIB wiederaufladbare Energiespeicher sind, ist dieser Prozess reversibel. Für das Laden der Batterie wird eine externe Spannung angelegt und der vorher beschriebene Prozess umgekehrt. Dieser Prozess wird hier aber nicht beschrieben, da er analog zum Entladen funktioniert.

Bei den oben genannten chemischen Reaktionen, also bei der Deinterkalation und der Interkalation, bei der Diffusion und bei der Bewegung von Elektronen im Feststoff, d.h. in den Elektroden und in den Ableitern, wird Wärme freigesetzt, welche in den Quellterm der Gleichung (3.1) einfließt. Dessen genaue Zusammensetzung wird in Kapitel 3.3 beschrieben.

## 3.2. Geometrie

Im vorherigen Kapitel wurde vereinfacht die Funktionsweise von LIB erklärt. Jetzt wird der genaue Aufbau und die Modellierung der vorliegende Kokam-Zelle vorgestellt. Sie wird in Kapitel 7 unter verschiedenen Kühlszenarien simuliert. Sie wurde gewählt, weil sie eine der Referenzzellen des Graduiertenkollegs SiMET (GRK 2218) ist. Ihre Simulation ist ein zentraler Bestandteil des Projekts und deshalb stehen für sie Parameter, die hier für das thermische Modell benötigt werden, zur Verfügung. Diese stammen aus unterschiedlichen Arbeiten des Projekts und wurden teilweise in [136] und in [124] veröffentlicht.

Abbildung 3.2 zeigt die Zelle von außen. An den Seiten befinden sich die Ableitertabs, an die ein Verbraucher angeschlossen werden kann und im mittleren Teil der Stack, der mit einer Hülle aus Aluminiumverbundfolie (eine mit Kunststoff beschichtete Aluminiumfolie) umhüllt ist. Für die spätere mathematische Behandlung ist das Verhältnis zwischen Zeldicke und



Zelllänge entscheidend. Letzteres ist ungefähr zwei Größenordnungen größer als ersteres. Dieser Sachverhalt wird bei der Begründung des Homogenisierungsansatzes in Kapitel 3.3 eine wichtige Rolle spielen. Die genauen Abmessungen der Zelle sind in Anhang A aufgelistet.



Abbildung 3.2.: Kokam-Zelle [119].

Um die innere Struktur der Zelle zu verstehen und sie modellieren zu können, wird Abbildung 3.3 genutzt. Das zeigt einen Teil einer CT-Aufnahme dieser Zelle. Man sieht, dass der Stack aus sehr vielen dünnen Schichten besteht. Diese sind die in Kapitel 3.1 beschriebenen Elektrodenpaare. Die „Fasern“, die den Stack verlassen, sind die Ableiterschichten. Da die Reihenfolge der Schichten sinngemäß Anodenableiter–Anode–Separator–Kathode–Kathodenableiter–Kathode–... ist und alle Ableiter gleichen Typs auf derselben Seite verbunden werden, sieht man in Abbildung 3.3 nur jeden zweiten, die anderen sind in der Abbildung nicht von den anderen Komponenten differenzierbar. Sie werden in einer T-ähnlichen Struktur verbunden.

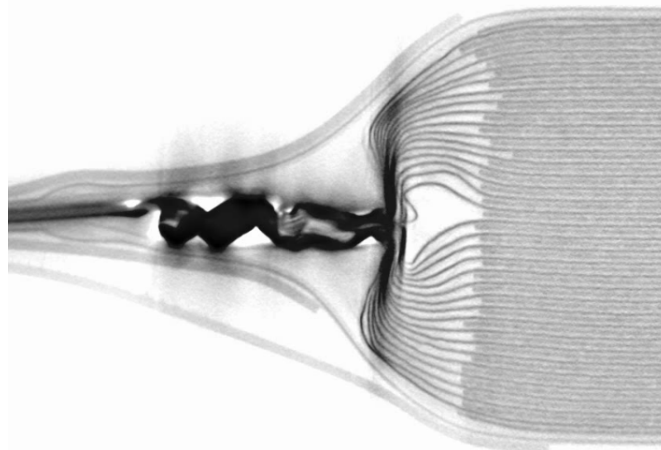


Abbildung 3.3.: CT-Aufnahme der Zelle. Diese Abbildung wurde von S. Paarmann vom Institut für Thermische Verfahrenstechnik (TVT) zur Verfügung gestellt.

Die Zelle lässt sich hauptsächlich wegen dieser verwickelten Verbindung der Ableiterschichten nicht exakt in *deal.II* abbilden. Deshalb wird sie so vereinfacht, dass trotzdem alle Komponenten erhalten bleiben und ihre Funktion erfüllen. Der linke Teil von Abbildung 3.4

stellt exemplarisch einen Ausschnitt einer Zelle mit insgesamt nur 17 Schichten in 2D dar, wodurch die einzelnen Komponenten besser ersichtlicher werden. Ebenfalls zeigt sie die während der ganzen Arbeit benutzten Raumrichtungen. Der Stack besteht aus den fünf Bestandteilen der Batterie, die in der oben angegebenen Reihenfolge aufeinander folgen und jeweils parallel zur XY-Ebene liegen. Eine Periode dieser bildet die sogenannte Einheitszelle, die im rechten Teil von Abbildung 3.4 dargestellt wird. Die Ableiterschichten, die roten und die beige Komponenten in der Abbildung, werden je auf einer Seite zum Tab zusammengeführt. Diese haben über ihre Länge eine konstante Dicke. Um eine Wärmeübertragung zwischen den auf der jeweiligen Seite zusammengeführten und den anderen Ableiterschichten bzw. dem Aktivmaterial zu vermeiden, werden die im CT-Scan zu sehenden Zwischenräume eingeführt und als Rechtecke modelliert. In der Abbildung 3.4 werden sie mit der hellblauen Farbe dargestellt. Ihre Breite und Höhe bleibt über die Höhe der Zelle unverändert. Ersteres entspricht der Breite des Zwischenraums in der Mitte der Zelle, wie es in Abbildung 3.3 zu sehen ist, letzteres dem Abstand von zwei Ableiterschichten desselben Typs. Sie bekommen im Modell die Eigenschaften von Argon, da weder der Hersteller ihre Zusammensetzung angegeben hat, noch diese gemessen wurde. Da es sich aber um ein Gas das die Wärme kaum leitet und weder mit dem Aktivmaterial als auch mit den Ableiterschichten reagiert, sind die Werte von Argon eine gute Näherung. Die ganze Zelle außer den Tabs wird von einem sehr dünnen äußeren Separator, hellgraue Schicht, und einer etwas dickeren Aluminiumverbundfolie, dunkelgraue Schicht, umhüllt. Die Dicke beider ist in jeder Raumrichtung identisch.

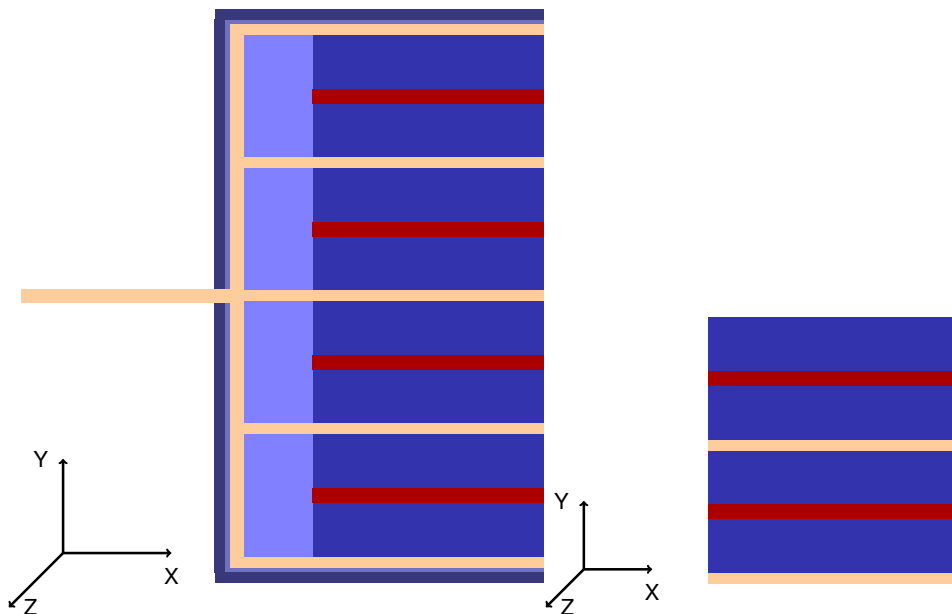


Abbildung 3.4.: Ausschnitt einer Abbildung der Geometrie mit insgesamt 17 Schichten (links) und die Einheitszelle (rechts) einer Batterie in *deal.II*.

Bevor die für diese Arbeit wichtigste Gleichung vorgestellt wird, wird eine Vereinfachung des Modells vorgenommen. Dabei wird je eine Anoden-, Separator- und Kathodenschicht

wie auch in [124, 27] zu einer Komponente, nämlich zu einer Aktivmaterialschicht (AM) zusammengefasst. Das reduziert die Komplexität des Systems. Dieser Schritt lässt sich über zwei Sachverhalte rechtfertigen. Erstens ist die Wärmeleitfähigkeit dieser Komponenten von derselben Größenordnung, wie man in Tabelle A.2 sehen kann. Zweitens wird die in Kapitel 3.1 beschriebene, während der chemischen Reaktionen in den drei mittleren Komponenten (Anode, Separator, Kathode) entstehende Wärme bei diesem rein thermischen Modell basierend auf der experimentellen Arbeit [119] bestimmt. Dort wird sie als Gesamtwärme aus dem gemessenen temperaturabhängigen Strom und Widerstand berechnet und kann deshalb nicht explizit unter den drei Schichten aufgeteilt werden. Bei elektrochemisch-thermischen Modellen wie in [24, 27], ist eine solche Aufteilung jedoch möglich. Die Wärmeleitfähigkeit und die entstehende Wärme im Aktivmaterial werden in Kapitel 3.3 genau angegeben. Somit ergeben sich sechs verschiedene Komponenten, aus denen die abgebildete Zelle besteht, nämlich das Aktivmaterial, der Anoden- und der Kathodenableiter, der Zwischenraum sowie der äußere Separator und Aluminiumverbundfolie.

### 3.3. Modellgleichung

Mit dem beschränkten Gebiet  $\Omega \subset \mathbb{R}^3$  wird im Folgenden die in Kapitel 3.2 vorgestellte und in *deal.II* abgebildete Geometrie der Batterie bezeichnet. Außerdem ist  $t_{\text{end}} > 0$  die Endzeit der Simulation. Somit können für die gesuchte Temperaturverteilung  $T : [0, t_{\text{end}}] \times \overline{\Omega} \rightarrow \mathbb{R}_{>0}$  die thermischen Prozesse in der betrachteten LIB mit folgender, aus der instationären Energieerhaltungsgleichung und der Kinetik der Wärmeleitung hergeleiteten [82] dreidimensionalen Wärmeleitungsgleichung

$$\rho(x) \partial_t (c_p(x, T) T(t, x)) = \nabla \cdot (\lambda(x, T) \nabla T(t, x)) + \dot{Q}_{\text{src}}(x, T) \quad \text{für alle } (t, x) \in \Omega_{t_{\text{end}}} \quad (3.1)$$

mit dazugehörigen Anfangs- und Randbedingungen, auf die später in diesem Kapitel im Detail eingegangen wird, beschrieben werden. Dabei bezeichnet  $\rho : \Omega \rightarrow \mathbb{R}_{>0}$  die Dichte,  $c_p : \Omega \times \mathbb{R}_{>0} \rightarrow \mathbb{R}_{>0}$  die spezifische Wärmekapazität,  $\lambda : \Omega \times \mathbb{R}_{>0} \rightarrow \mathbb{R}_{>0}^{3 \times 3}$  die Wärmeleitfähigkeit und  $\dot{Q}_{\text{src}} : \Omega \times \mathbb{R}_{>0} \rightarrow \mathbb{R}$  den volumetrischen Wärmequellterm. Die ersten zwei und letzteres sind skalare Funktionen, wogegen  $\lambda$  anisotrop, d.h. ein Tensor, ist. Sowohl alle Koeffizienten, als auch der Wärmequellterm sind unstetige Funktionen, die in den verschiedenen Komponenten der Batterie durch konstante Werte oder nichtlineare Ausdrücke charakterisiert werden. Dabei sind nur die spezifische Wärmekapazität, die Wärmeleitfähigkeit und der Quellterm im Aktivmaterial nichtlinear, in den anderen Komponenten können diese und die Dichte in jeder Komponente durch konstante Werte beschrieben werden. Die genauen nichtlinearen Ausdrücke werden später in Gleichung (3.4) und die konstanten Werte in Tabelle A.2 angegeben. Abbildung 3.5 zeigt beispielhaft für eine Zelle mit 17 Schichten die je Schicht konstante Wärmeleitfähigkeit  $\lambda$  über die normierte Höhe der Zelle. Dabei wurde die nichtlineare  $\lambda$  im Aktivmaterial durch eine geeignete Konstante approximiert um die Darstellung zu vereinfachen.

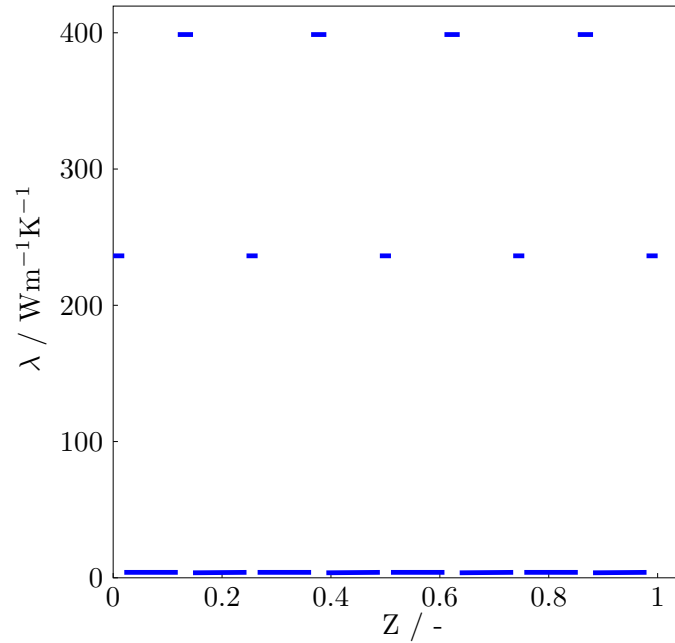


Abbildung 3.5.: Die stückweise konstante Wärmeleitfähigkeit  $\lambda$  für eine Zelle mit 17 Schichten über die normierte Höhe der Zelle.

Wie in Kapitel 3.2 beschrieben wurde, wurde die Anode, die Kathode und der Separator zum Aktivmaterial zusammengefasst. Dessen Dichte ( $\rho_{AM}$ ), spezifische Wärmekapazität ( $c_{p,AM}$ ) und Wärmeleitfähigkeit ( $\lambda_{AM}$ ) würden sich im konstanten Fall aus denen der einzelnen Komponenten wie in [124, 105, 98, 51, 41], basierend auf dem Ansatz in [22] und in [93, Kapitel 4], nach folgenden Formeln

$$\begin{aligned} \rho_{AM} &= \frac{\sum_i \rho_i V_i}{\sum_i V_i}, & c_{p,AM} &= \frac{\sum_i c_{p,i} V_i}{\sum_i V_i}, \\ \lambda_{AM,\perp} &= \frac{\sum_i V_i}{\sum_i \frac{V_i}{\lambda_i}}, & \lambda_{AM,\parallel} &= \frac{\sum_i \lambda_i V_i}{\sum_i V_i} \end{aligned} \quad (3.2)$$

berechnen lassen. Dabei steht der Index  $i$  für die einzelnen Komponenten,  $V_i \in \mathbb{R}_{>0}$  für dessen Volumenanteil und  $\lambda_{AM,\perp} \in \mathbb{R}_{>0}$  bzw.  $\lambda_{AM,\parallel} \in \mathbb{R}_{>0}$  für die zu den Schichten senkrechte bzw. parallele Wärmeleitfähigkeit. Mit den in Kapitel 3.2 eingeführten Richtungen folgt

$$\lambda_{AM} = \begin{pmatrix} \lambda_{AM,\parallel} & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_{AM,\parallel} & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_{AM,\perp} \end{pmatrix}. \quad (3.3)$$

Der obige Ansatz wird für  $\lambda_{AM}$  unter anderem in [93, Kapitel 4] mit der Reihen- und Parallelschaltung elektrischer Widerstände begründet, aber mathematisch nicht bewiesen. Deshalb

wird in Kapitel 4.2.2 bei der mathematischen Homogenisierung nochmal darauf eingegangen und seine Anwendung für stückweise konstante Wärmeleitfähigkeit gerechtfertigt. Allerdings wird in dieser Arbeit die Temperaturabhängigkeit von  $c_{p,AM}$  und  $\lambda_{AM}$  berücksichtigt [103]. Basierend auf der Arbeit von O. Queisser [123] werden für  $c_{p,AM}$  und  $\lambda$  im Aktivmaterial folgende nichtlineare Ausdrücke verwendet:

$$\begin{aligned} c_{p,AM}(x, T) &= 1.0257 \cdot 10^{-4} T^2 + 2.5216 T + 236.0122, \\ \lambda_{AM,\perp}(x, T) &= -1.4425 \cdot 10^{-4} T + 0.8103, \\ \lambda_{AM,\parallel}(x, T) &= -0.0015 T + 2.1757. \end{aligned} \tag{3.4}$$

Nach [123] wurde in Gleichung (3.4)  $c_{p,AM}$  für einen Temperaturbereich von  $-40^\circ\text{C}$  bis  $60^\circ\text{C}$ , also von 233.15 K bis 333.15 K, und  $\lambda_{AM,\perp}$  bzw.  $\lambda_{AM,\parallel}$  für  $-20^\circ\text{C}$  bis  $60^\circ\text{C}$ , also 253.15 K bis 333.15 K, bestimmt. Damit können sie nur in bzw. um diesen Temperaturbereich verwendet werden. Um Funktionen über ganz  $\mathbb{R}$  zu erhalten, werden sie außerhalb diesen Bereichs konstant fortgesetzt. Diese Fortsetzung wird im Anhang C, um die Voraussetzungen des Vergleichsprinzips zu überprüfen, benötigt. Der betrachtete Temperaturbereich entspricht nach [104, Kap. 13] auch dem Bereich in dem LIB unter realen Bedingungen benutzt werden sollen. Die in [136, Kap. 2] dargestellten konstanten Werte können für  $T \approx 303.5$  erhalten werden. Das zeigt, dass die konstanten Werte nur in dem Temperaturbereich um diese Temperatur gültig sind.

Die in Kapitel 3.1 beschriebene und nur im Aktivmaterial stattfindende Wärmegenerierung hat zur Folge, dass in den Ableitern, in dem Zwischenraum und in den zwei die Batterie umhüllenden Schichten  $\dot{Q}_{\text{src}}(x, T) = 0$  gilt. Im Aktivmaterial setzt sich der Quellterm aus mehreren Faktoren zusammen [37]. Die meisten dieser sind unter anderem wegen der kurzen elektrischen Transportpfade im Stack mehrere Größenordnungen kleiner und können deshalb vernachlässigt werden [34]. So gilt nach [119]

$$\dot{Q}_{\text{src},AM}(x, T) = \dot{Q}_{\text{irr}}(x, T) + \dot{Q}_{\text{rev}}(x, T),$$

wobei  $\dot{Q}_{\text{irr}}(x, T) \in \mathbb{R}_{>0}$  die irreversible Joule-Erwärmung und  $\dot{Q}_{\text{rev}}(x, T) \in \mathbb{R}$  der reversible entropische Wärmequellterm ist. Ersteres entsteht wegen Überspannungen [24, 27] und ist durch

$$\dot{Q}_{\text{irr}}(x, T) = \frac{1}{V_{AM}} I^2(x, T) R(x, T)$$

gegeben. Der Strom  $I$  und der Widerstand  $R$  werden in [119] experimentell über die ganze Zelle als Gesamtgröße gemessen. Um daraus den punktweise Ausdruck für die Wärme zu erhalten, wird eine Normierung mit den Volumen des Aktivmaterials  $V_{AM}$  benötigt. Die gemessenen Größen werden durch folgende Ausdrücke beschrieben:

$$\begin{aligned} I(x, T) &= 1.5 \cdot a \cdot \exp\left(-\frac{b}{T-c}\right), \\ R(x, T) &= R_{\text{col}} + k \cdot \exp\left(\frac{E_A}{\tilde{R} \cdot T}\right). \end{aligned}$$

Die Werte der Parameter  $a, b, c, R_{\text{col}}, k, E_A$  und  $\tilde{R}$  inklusive Einheiten werden in Tabelle A.3 angegeben. Sie wurden bei der Anwendung verschiedener Anfangs- und Randbedingungen bestimmt. Deshalb sind sie, und damit auch  $I$  und  $R$ , nur bei diesen Bedingungen gültig. Auf diese Tatsache wird noch später in diesem Kapitel bei der Behandlung der Anfangs- und Randbedingungen genauer eingegangen. Der reversible Teil von  $\dot{Q}_{\text{src},AM}$  entsteht wegen der Entropieänderung bei den chemischen Reaktionen [27, 24] und ist bei der Entladung der Batterie durch

$$\dot{Q}_{\text{rev}}(x, T) = \frac{1}{V_{\text{AM}}} I(x, T) \cdot T \cdot \frac{\partial U_{\text{OCV}}}{\partial T}$$

gegeben. Dabei ist der Strom wie oben und der Parameter  $\frac{\partial U_{\text{OCV}}}{\partial T}$  auch in Tabelle A.3 zu finden. Die Normierung lässt sich wie bei  $\dot{Q}_{\text{irr}}$  begründen. Falls die Batterie geladen wird, bekommt  $\dot{Q}_{\text{rev}}$  ein negatives Vorzeichen. Dieser Fall wird aber bei den Simulationen in Kapitel 7 nicht betrachtet, da die Gleichung (3.1) keine Erkenntnisse über den Ladezustand der Batterie liefert und deshalb nur von einer Entladung ausgegangen wird. Zusammengefasst ergibt sich nach [119] für den volumetrischen Quellterm im Aktivmaterial folgender Ausdruck:

$$\begin{aligned} \dot{Q}_{\text{src},AM}(x, T) = \frac{1}{V_{\text{AM}}} & \left[ 2.25 \cdot a^2 \cdot \exp\left(-\frac{2b}{T-c}\right) \cdot \left(R_{\text{col}} + k \cdot \exp\left(\frac{E_A}{\tilde{R} \cdot T}\right)\right) \right. \\ & \left. + 1.5 \cdot a \cdot \exp\left(-\frac{b}{T-c}\right) \cdot T \cdot \left(\frac{\partial U_{\text{OCV}}}{\partial T}\right) \right]. \end{aligned} \quad (3.5)$$

Aus Gleichung (3.5) folgt, dass  $\dot{Q}_{\text{src},AM}$  nur für  $T \neq c$  und  $T \neq 0$  definiert ist. In dieser Arbeit wird  $\dot{Q}_{\text{src},AM}$  allerdings nur für  $T > c$  betrachtet, da dieser Fall nach [104, Kap. 13] den Anwendungen entspricht. Falls die Funktion  $\dot{Q}_{\text{src},AM}$  für  $T \leq c$  benötigt wird, wird sie stetig durch Null fortgesetzt.

Damit wurden sowohl alle Koeffizienten als auch der Quellterm der Gleichung (3.1) behandelt. Es fehlt noch die Betrachtung der Anfangs- und Randbedingungen. Da das Ziel der Arbeit die Simulation der Zelle für Anwendungen ist, werden nur Bedingungen gewählt, die für die Anwendung relevant sind. So gilt für ersteres

$$T(0, x) = T_0(x) \quad \text{für alle } x \in \Omega.$$

Dabei ist  $T_0$  gegeben und ist entweder eine konstante Funktion oder hat über die Länge des Stacks einen linearen Gradienten wie in [119]. Die Randbedingungen stehen für die verschiedenen Kühlmöglichkeiten der Batterie. Eine Möglichkeit dafür ist an einem Teil der Batterie (z.B. an den Ableitertabs oder an der Ober- oder Unterseite) eine bestimmte Temperaturverteilung  $T_{\text{BC}}$ , z.B. mit Hilfe einer Kühlplatte, vorzugeben. Das wird über eine Dirichlet-Randbedingung der Form

$$T(t, x) = T_{\text{BC}}(t, x) \quad \text{für alle } (t, x) \in (0, t_{\text{end}}) \times \partial\Omega_{\text{D}}$$

realisiert.  $T_{BC}$  ist wie auch  $T_0$  eine gegebene, entweder konstante Treppenfunktion oder im Falle der Stackkühlung eine lineare oder unstetige Funktion,  $\partial\Omega_D \subset \partial\Omega$  ist der Teil des Randes wo diese Randbedingung angewendet wird. Am restlichen Teil des Randes  $\partial\Omega_N \subset \partial\Omega$  wird meistens der Wärmefluss  $\dot{Q}_{BC}(t, x)$  senkrecht zum Rand vorgeschrieben. Das resultiert in einer Neumann-Randbedingung der Form

$$-\lambda(x, T)\partial_{\mathbf{n}}T(t, x) = \dot{Q}_{BC}(t, x) \quad \text{für alle } (t, x) \in (0, t_{\text{end}}) \times \partial\Omega_N.$$

Oft werden Dirichlet-Randbedingungen durch homogene Neumann-Randbedingungen, d.h. durch  $\dot{Q}_{BC}(x) = 0$ , ergänzt. Eine Kombination der bis jetzt behandelten zwei Möglichkeiten stellt die Robin-Randbedingung der Form

$$-\lambda(x, T)\partial_{\mathbf{n}}T(t, x) = \alpha(T(t, x) - T_{BC}(t, x)) \quad \text{für alle } (t, x) \in (0, t_{\text{end}}) \times \partial\Omega_R$$

dar. Dabei bezeichnet  $\partial\Omega_R \subset \partial\Omega$  den entsprechenden Teil des Randes,  $T_{BC}$  ist wie oben und  $\alpha$  ist der Wärmeübergangskoeffizient. Ein Beispiel für diese Art von Randbedingung ist eine mit Luft umströmte Batterie.

Wie es oben schon erwähnt wurde, gilt der nichtlineare Ausdruck aus Gleichung (3.5) nur bei bestimmten Anfangs- und Randbedingungen. Allerdings werden bei den Anwendungen in Kapitel 7 auch andere untersucht. In diesen Fällen wird die gesamte erzeugte Wärme als  $3W$  wie in [136, 124] angenommen und somit

$$\dot{Q}_{\text{src},AM}(x, T) = \frac{3}{V_{AM}} \quad (3.6)$$

gesetzt.

Somit ist die Gleichung (3.1) komplett beschrieben. Man stellt fest, dass sich sowohl alle Koeffizienten als auch der Quellterm im Stack wegen der Materialeigenschaften von Schicht zu Schicht ändern. Die behandelte Batterie hat insgesamt, also inklusive Anoden-, Kathoden- und Separatorschicht, wie es eine Zellöffnung zeigte, 265 Schichten. Daraus ergeben sich nach der Einführung des Aktivmaterials 133 Schichten. Diese Anzahl und die Tatsache, dass ihre Länge zwei Größenordnungen größer als ihre Höhe ist, hat zur Folge, dass die Änderung der Koeffizienten sehr schnell ist. Das hätte bei einer Lösung mit der FEM oder mit der FVM, bei der, wie es in Kapitel 4.1 gezeigt wird, eine Auflösung aller Schichten nötig ist, sehr lange Rechenzeiten zur Folge. Aus diesem Grund erscheint eine Homogenisierung der Gleichung gerechtfertigt.

## 4. Homogenisierung

Im vorherigen Kapitel wurde das Batterieproblem vorgestellt, dessen effizientes Lösen im Mittelpunkt dieser Arbeit steht. In Kapitel 3.3 wurde die Notwendigkeit des Homogenisierungsansatzes begründet. Um diesen auch durchführen und anwenden zu können, werden in diesem Kapitel die mathematischen Grundlagen der analytischen und numerischen Homogenisierung diskutiert. Dabei wird auf diejenige Ergebnisse fokussiert, die für die weitere Arbeit relevant sind, also im Zusammenhang mit Gleichung (3.1) stehen und auf die in den späteren Kapiteln aufgebaut wird. Zunächst wird in Kapitel 4.1 anhand eines 1D-Beispiels die Homogenisierung mathematisch motiviert und aus dieser Sicht auf ihr Ziel und ihre Idee eingegangen. Danach wird in Kapitel 4.2 die analytische, und in Kapitel 4.3 die numerische Homogenisierung behandelt.

### 4.1. Motivation der Homogenisierung

Das in diesem Kapitel vorgestellte 1D-Beispiel basiert auf dem Beispiel in [78, Kap. 1] und zeigt, warum eine Auflösung der kleinen Skala bei Multiskalenproblemen notwendig ist und wie daraus die Idee der Homogenisierung folgt.

#### 4.1.1. Problemstellung

In diesem Kapitel ist  $\Omega = (0, 1) \subset \mathbb{R}$ . Gesucht ist die Lösung  $u^\epsilon$  für folgendes Problem:

$$\begin{aligned} -\frac{d}{dx} \left( a^\epsilon(x) \frac{d}{dx} u^\epsilon(x) \right) &= f(x) && \text{für alle } x \in \Omega, \\ u^\epsilon(x) &= 0 && \text{für alle } x \in \partial\Omega. \end{aligned} \tag{4.1}$$

Dabei wird  $f \equiv 1$  gesetzt,  $\epsilon > 0$  ist der Parameter der kleinen Skala und  $a^\epsilon$  ist ein Multiskalen-Koeffizient, d.h. ein Koeffizient, der auf der  $\epsilon$ -Skala oszilliert. Er wird als

$$a^\epsilon(x) := \left( 2 - \sin \left( \frac{2\pi x}{\epsilon} \right) \right)^{-1} \tag{4.2}$$

definiert und wird in Abbildung 4.1 für  $\epsilon = 1, 2^{-5}$  gezeigt. In diesem Beispiel wird  $\epsilon = 2^{-5}$  gesetzt.



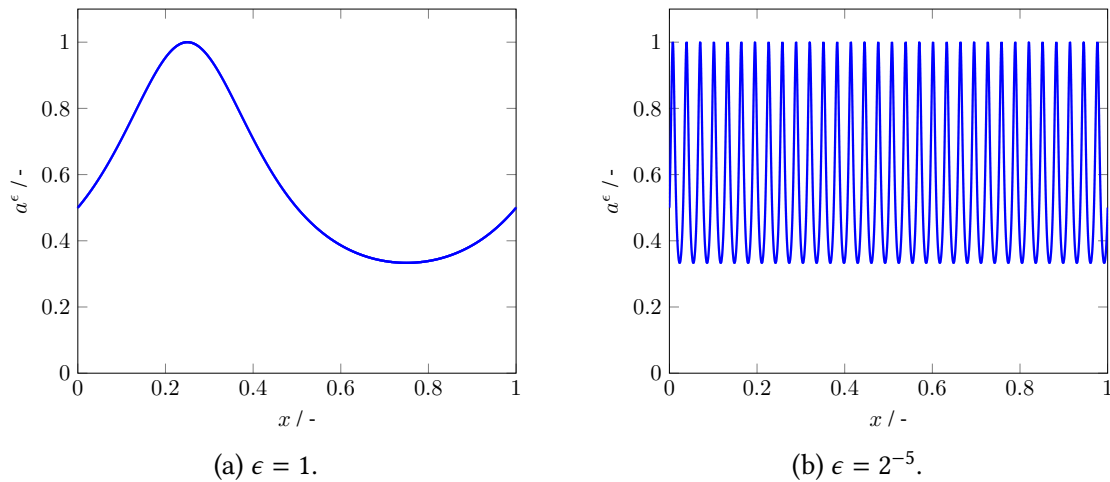


Abbildung 4.1.: Der Koeffizient  $a^\epsilon$  aus Gleichung (4.2) für  $\epsilon = 1$ , Abbildung 4.1a, und  $\epsilon = 2^{-5}$ , Abbildung 4.1b.

#### 4.1.2. Lösung des Problems

Die schwache Formulierung des Problems mit der Bilinearform  $B^\epsilon$  und der Linearform  $F^\epsilon$  lautet

$$B^\epsilon(u^\epsilon, z) := \int_{\Omega} a^\epsilon \frac{d}{dx} u^\epsilon(x) \frac{d}{dx} z(x) dx = \int_{\Omega} f(x) z(x) dx =: F(z) \quad \text{für alle } z \in \mathcal{H}_0^1(\Omega). \quad (4.3)$$

Aus der Definition von  $a^\epsilon$  folgt, dass  $a^\epsilon \in \mathcal{L}^\infty(\Omega)$  und  $a^\epsilon(x) > 0$  für alle  $x \in \Omega$  und  $\epsilon > 0$ . Deshalb ist die Bilinearform  $B^\epsilon$  stetig und koerziv. Mit  $f \in \mathcal{L}^2(\Omega)$  folgt dann aus dem Satz von Lax–Milgram (Satz 2.4), dass die Gleichung (4.1) eine Lösung  $u^\epsilon \in \mathcal{H}_0^1(\Omega)$  hat. Diese lässt sich für  $\epsilon = 2^{-k}$  für  $k \in \mathbb{N}$  nach zweimaliger Integration und Einsetzen der Randwerte explizit als

$$u^\epsilon(x) = -x^2 - 2c_1x - \epsilon \left( \frac{c_1 + x}{2\pi} \cos\left(2\pi \frac{x}{\epsilon}\right) - \frac{\epsilon}{4\pi^2} \sin\left(2\pi \frac{x}{\epsilon}\right) + c_2 \right) \quad (4.4)$$

mit den Konstanten  $c_1 = \frac{\epsilon}{4\pi} + 0.5$  und  $c_2 = \frac{\epsilon}{4\pi} \left( \frac{\epsilon}{2\pi} + 1 \right)$  berechnen. Sie wird in Abbildung 4.2a gezeigt. Sie lässt sich als Summe  $u^\epsilon = u^{(0)} + u^{(1)}$  mit

$$\begin{aligned} u^{(0)}(x) &= -x^2 - 2c_1x, \\ u^{(1)}(x) &= -\epsilon \left( \frac{c_1 + x}{2\pi} \cos\left(2\pi \frac{x}{\epsilon}\right) - \frac{\epsilon}{4\pi^2} \sin\left(2\pi \frac{x}{\epsilon}\right) + c_2 \right) \end{aligned}$$

schreiben. Dabei ist  $u^{(0)}$  der makroskopische und  $u^{(1)}$  der mikroskopische Anteil. Diese Zusammensetzung von  $u^\epsilon$  wird in Abbildung 4.2b deutlich, welche einen Ausschnitt der Lösung

zeigt. Dabei ist zu sehen, dass die mikroskopischen Oszillationen dem makroskopischen Verlauf folgen.

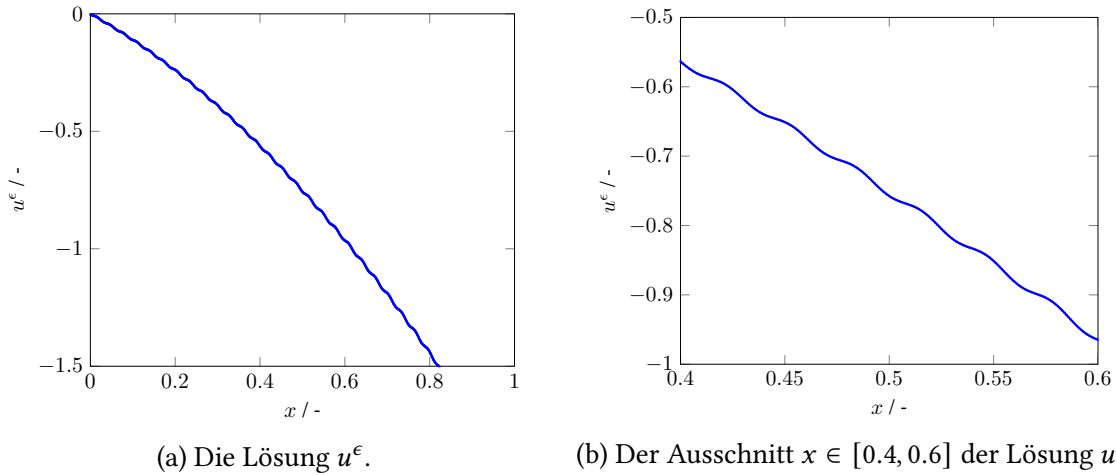


Abbildung 4.2.: Die Lösung  $u^\epsilon$  (4.4) der Gleichung (4.1) für  $\epsilon = 2^{-5}$ , Abbildung 4.2a, und der Ausschnitt  $x \in [0.4, 0.6]$ , Abbildung 4.2b davon.

Diese Lösung soll nun mit einer isoparametrischen  $C^0$ -stetigen Lagrangeschen FEM approximiert werden, die auch während der ganzen Arbeit benutzt wird. Um die Notation für den weiteren Verlauf zu vereinfachen, wird deshalb die Abkürzung FEM verwendet. Wie mit dieser Methode PDGln gelöst werden, wird im Anhang B.1 angegeben. In [78, Kap. 1] wird die Lösung des dort vorgestellten 1D-Problems für verschiedene Verfeinerungen des Gitters graphisch dargestellt. An der Darstellung ist zu erkennen, dass, solange die Gitterweite  $H$  nicht kleiner als  $\epsilon$  ist, die FEM für jedes  $H > \epsilon$  eine andere Lösung approximiert. Mit solchen  $H$ -s wird auch nicht der makroskopische Anteil approximiert. Erst wenn  $H$  kleiner als  $\epsilon$  wird, wird die richtige Lösung approximiert. Dieser Sachverhalt lässt sich mit Hilfe von Fehlerabschätzungen für die FEM belegen [78, Kap. 1]. Nach Céa's Lemma gilt

$$\|u^\epsilon - u_H^\epsilon\|_{\mathcal{H}_0^1(\Omega)} \leq CH \left\| \frac{d^2}{dx^2} u^\epsilon \right\|_{\mathcal{L}^2(\Omega)}.$$

Die zweite Ableitung von  $u^\epsilon$  lässt sich explizit berechnen und damit ihre  $\mathcal{L}^2$ -Norm abschätzen. Man erhält

$$\left\| \frac{d^2}{dx^2} u^\epsilon \right\|_{\mathcal{L}^2(\Omega)} \geq C \frac{1}{\epsilon}.$$

Fasst man die zwei Abschätzungen zusammen, erhält man, dass der Fehler nicht besser als

$$\|u^\epsilon - u_H^\epsilon\|_{\mathcal{H}_0^1(\Omega)} \leq C \frac{H}{\epsilon}$$

sein kann. Damit ergibt sich dieselbe Schlussfolgerung wie anhand der graphischen Darstellung in [78, Kap. 1]: Um eine sinnvolle Abschätzung zu erhalten, d.h. den Fehler zu reduzieren und so sicher die richtige Lösung zu approximieren, muss  $H$  kleiner als  $\epsilon$  sein.

### 4.1.3. Das homogenisierte Problem

Um den hohen Rechenaufwand, der aus der für die Approximation der richtigen Lösung notwendigen Bedingung  $H < \epsilon$  folgt, zu vermeiden, wird Gleichung (4.1) homogenisiert. Dabei soll ihr Verhalten für  $\epsilon \rightarrow 0$  untersucht und so ein Problem aufgestellt werden, gegen dessen Lösung  $u^0$  die Folge  $u^\epsilon$  für  $\epsilon \rightarrow 0$  konvergiert. Im Falle des betrachteten 1D-Problems wäre das mit dem homogenisierten Koeffizient  $a^0$  ein Problem der Form

$$\begin{aligned} -\frac{d}{dx} \left( a^0(x) \frac{d}{dx} u^0(x) \right) &= f(x) && \text{für alle } x \in \Omega, \\ u^0(x) &= 0 && \text{für alle } x \in \partial\Omega. \end{aligned} \quad (4.5)$$

Die zentralen Fragen der Homogenisierungstheorie sind, wie dieses Problem aufgestellt wird, ob ein geeignetes  $a^0$  überhaupt existiert und unter welchen Bedingungen, bzw. in welcher Norm  $u^\epsilon$  gegen  $u^0$  konvergiert.

Ein erster naheliegender Ansatz, um  $a^0$  zu bestimmen, wäre in Gleichung (4.3) den Grenzwert  $\epsilon \rightarrow 0$  in  $\mathcal{L}^2(\Omega)$  zu bilden und die Grenzwertbildung mit dem Integral zu vertauschen. Dann wäre für das  $\epsilon$ -periodische  $a^\epsilon$  nach Lemma 2.2

$$a^0(x) = \int_0^\epsilon a^\epsilon(x) dx = \int_0^\epsilon \left( 2 - \sin\left(\frac{2\pi x}{\epsilon}\right) \right)^{-1} dx = \frac{1}{\sqrt{3}}.$$

Die Lösung von Gleichung (4.5) mit diesem  $a^0$  kann wieder mit zweimaliger Integration und Einsetzen der Randwerte als

$$u^0(x) = -\frac{\sqrt{3}}{2}x^2 - \frac{\sqrt{3}}{2}x$$

berechnet werden. Es kann festgestellt werden, dass

$$u^\epsilon(x) \xrightarrow{\epsilon \rightarrow 0} -x^2 - 2c_1x \neq u^0(x).$$

Da  $u^\epsilon \rightarrow u^0$  für  $\epsilon \rightarrow 0$  ein Ziel bei der Aufstellung des homogenisierten Problems ist, ist  $a^0$  nicht der homogenisierte Koeffizient und somit ist der gewählte Ansatz falsch. Wie  $a^0$  aussieht, wird mit den anderen oben gestellten Fragen in den nächsten Kapiteln zunächst mit Hilfe analytischer und anschließend mit numerischer Homogenisierung beantwortet.

## 4.2. Analytische Homogenisierung

Die Fragen bzgl. des homogenisierten Problems werden in diesem Kapitel analytisch beantwortet. Dabei ist das Ziel das Batterieproblem (3.1) zu homogenisieren. Dafür wird zunächst das 1D-Problem betrachtet, wobei unter anderem der homogenisierte Koeffizient angegeben

wird. Mit einem Spezialfall davon kann für eine stückweise konstante Wärmeleitfähigkeit der einzelnen Komponenten die des Aktivmaterials in den Formeln (3.2) nachgewiesen werden. Danach wird das mehrdimensionale elliptische Problem betrachtet und festgestellt, dass dessen Lösung sich nicht aus der des 1D-Problems verallgemeinern lässt. Dieser Teil basiert auf [56, Kap. 5] und auf [52, Kap. 8]. Anschließend wird mit Blick auf das Batterieproblem (3.1) ein parabolisches quasilineares Problem betrachtet. Es wird diskutiert unter welchen zusätzlichen Bedingungen im Vergleich zum elliptischen Problem sich dieser homogenisieren lässt. Es wird gezeigt, dass trotz den Unterschieden die homogenisierte Koeffizienten beider Probleme eine ähnliche Struktur haben. Aus diesen Erkenntnissen wird gefolgert, dass das Batterieproblem (3.1) sich nicht nur mit analytischer Homogenisierung homogenisieren lässt.

#### 4.2.1. Ergebnisse – lineares 1D-Problem

Da der in Kapitel 4.1.3 verwendete Ansatz zur Bestimmung von  $a^0$  für einen  $\epsilon$ -periodischen Koeffizienten  $a^\epsilon$  nicht zielführend war, wird weiterhin Gleichung (4.1) als Ausgangspunkt betrachtet. Anstatt direkt den Grenzwert  $\epsilon \rightarrow 0$  zu bilden, wird nun einmal integriert und durch  $a^\epsilon$  geteilt. Letzteres ist wegen  $a^\epsilon(x) > 0$  für alle  $x \in \Omega$  möglich. Das führt mit einer Konstante  $c$  zu

$$\frac{d}{dx} u^\epsilon(x) = \left( - \int_0^x f(s) ds + c \right) \frac{1}{a^\epsilon(x)}.$$

Nach [56, Satz 3.23] und dem Beweis von [56, Satz 5.5] konvergieren beide Seiten schwach in  $\mathcal{L}^2(\Omega)$ . Da  $a^\epsilon$  nach Annahme  $\epsilon$ -periodisch ist kann Lemma 2.2 mit  $p = 2$  für die rechte Seite angewendet werden. Um den Grenzwert der linken Seite zu bestimmen, werden [56, Satz 1.18] und [56, Prop. 3.17] benutzt. Damit folgt

$$\frac{d}{dx} u^0(x) = \left( - \int_0^x f(s) ds + c \right) \int_0^\epsilon (a^\epsilon(x))^{-1} dx.$$

Nach Umstellung und Ableitung der Gleichung erhält man das homogenisierte Problem (4.5) und somit gilt

$$a^0 := \left( \int_0^\epsilon (a^\epsilon(x))^{-1} dx \right)^{-1}.$$

Dies zeigt, dass  $a^0$  im eindimensionalen Fall nicht das arithmetische, sondern das harmonische Mittel von  $a^\epsilon$  ist. Nach [52, Satz 8.3] gilt für  $\epsilon \rightarrow 0$

$$\begin{aligned} u^\epsilon &\rightarrow u^0 && \text{in } \mathcal{L}^2(\Omega), \\ u^\epsilon &\rightharpoonup u^0 && \text{in } \mathcal{H}_0^1(\Omega). \end{aligned}$$

Das bedeutet, dass die Konvergenz der Ableitung von  $u^\epsilon$  nur schwach ist.

Bevor das allgemeine mehrdimensionale elliptische Problem betrachtet wird, werden als Spezialfall geschichtete Materialien diskutiert. Bei diesem hängt der lineare Koeffizient  $a^\epsilon$  nur von einer Variablen, bzw. nur von einer Dimension ab. Das führt zu einer geschichteten Struktur des Materials, daher auch die Bezeichnung. Das ist bei dem Batterieproblem (3.1) genau dann der Fall, falls die Wärmeleitfähigkeit  $\lambda$  stückweise konstant ist und die anderen Terme vernachlässigt werden. Dann hängt  $\lambda$  nur von der  $z$ -Richtung ab. Solche Probleme können mit dem zuvor betrachteten 1D-Problem in Verbindung gebracht werden. Für sie lässt sich der homogenisierte Koeffizient ähnlich zum 1D-Fall bestimmen. Die Voraussetzung dafür ist, dass  $a^\epsilon \in \mathcal{L}^\infty(\Omega; \mathbb{R}^{d \times d}) \cap \mathcal{M}(\Omega, \theta, \Theta)$  gilt, also in jeder Komponente beschränkt und nach Definition 2.3 zulässig ist. Zusätzlich soll  $a^\epsilon$   $\epsilon$ -periodisch sein. In diesem Fall gilt nach [56, Satz 5.10], dass  $u^\epsilon \rightarrow u^0$  für  $\epsilon \rightarrow 0$  in  $\mathcal{H}_0^1(\Omega)$  und für  $2 \leq i, j \leq n$

$$\begin{aligned}
 a_{1,1}^0 &= \left( \int_0^\epsilon (a_{1,1}^\epsilon(x))^{-1} dx \right)^{-1}, \\
 a_{1,j}^0 &= a_{1,1}^0 \int_0^\epsilon \frac{a_{1,j}^\epsilon(x)}{a_{1,1}^\epsilon(x)} dx, \\
 a_{j,1}^0 &= a_{1,1}^0 \int_0^\epsilon \frac{a_{j,1}^\epsilon(x)}{a_{1,1}^\epsilon(x)} dx, \\
 a_{i,j}^0 &= a_{1,1}^0 \int_0^\epsilon \frac{a_{1,j}^\epsilon(x)}{a_{1,1}^\epsilon(x)} dx \int_0^\epsilon \frac{a_{i,1}^\epsilon(x)}{a_{1,1}^\epsilon(x)} dx - \int_0^\epsilon \left( a_{i,j}^\epsilon(x) - \frac{a_{1,j}^\epsilon(x)a_{i,1}^\epsilon(x)}{a_{1,1}^\epsilon(x)} \right) dx.
 \end{aligned} \tag{4.6}$$

Da die Wärmeleitfähigkeit immer positiv ist und die Schichten periodisch aufeinander folgen, erfüllt ein stückweise konstantes  $\lambda$  aus dem batterieproblem (3.1) die Bedingungen von [56, Satz 5.10]. Deshalb kann das obige Ergebnis angewendet werden. Einsetzen von  $\lambda$  in Gleichung (4.6) führt zu den Formeln (3.2), wobei die Dicke der Einheitszelle der Batterie  $\epsilon$  entspricht und aus der Integration der stückweise konstanten Ausdrücke die Summenform folgt. Somit ist die Anwendung dieser Formeln zur Bestimmung von  $\lambda_{AM,\parallel}$  und  $\lambda_{AM,\perp}$  im linearen Fall gerechtfertigt.

#### 4.2.2. Ergebnisse – mehrdimensionale lineare elliptische Probleme

Wie schon in Kapitel 4.1 angedeutet, wird hier das allgemeine mehrdimensionale elliptische Problem

$$\begin{aligned}
 -\nabla \cdot (a^\epsilon(x) \nabla u^\epsilon(x)) &= f(x) && \text{für alle } x \in \Omega, \\
 u^\epsilon(x) &= 0 && \text{für alle } x \in \partial\Omega,
 \end{aligned} \tag{4.7}$$

auf einem beschränkten Gebiet  $\Omega \subset \mathbb{R}^d$  mit einem Tensor  $a^\epsilon$  ohne spezielle Struktur betrachtet. Zur Vereinfachung werden nur homogene Dirichlet-Randbedingungen berücksichtigt.

Allerdings gelten die Aussagen dieses Kapitels nach [56, Kap. 4] auch für andere, wie z.B. homogene oder inhomogene Neumann- oder Robin-Randbedingungen. Nach dem Satz von Lax–Milgram, Satz 2.4, hat dieses Problem für alle  $\epsilon > 0$  eine eindeutige Lösung  $u^\epsilon \in \mathcal{H}_0^1(\Omega)$ , falls  $f \in \mathcal{H}^{-1}(\Omega)$  und  $a^\epsilon \in \mathcal{M}(\Omega, \theta, \Theta)$  für  $\theta, \Theta > 0$ . In diesem Fall existiert nach [52, Satz 8.5] das homogenisierte Problem

$$\begin{aligned} -\nabla \cdot (a^0(x) \nabla u^0(x)) &= f(x) && \text{für alle } x \in \Omega, \\ u^0(x) &= 0 && \text{für alle } x \in \partial\Omega \end{aligned}$$

mit dem homogenisierten Koeffizienten  $a^0 : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^{d \times d}$  und der Lösung  $u^0 \in \mathcal{H}_0^1(\Omega)$ . Es gilt außerdem für  $\epsilon \rightarrow 0$

$$u^\epsilon \rightharpoonup u^0 \quad \text{in } \mathcal{H}_0^1(\Omega). \quad (4.8)$$

Falls  $a^\epsilon$  zusätzlich lokal  $\epsilon$ -periodisch nach Definition 2.1 ist, kann  $a^0$  mit verschiedenen Methoden auch explizit berechnet werden. Dafür wird hier eine asymptotische Entwicklung der Lösung benutzt, da diese in der Batteriemodellierung, z.B. in [84] und [92], oft benutzt wird. Die genaue Vorgehensweise wird in [56, Kap. 7] beschrieben, in dieser Arbeit werden nur die wichtigsten Schritte und Ideen nach [78, Kap. 5], [52, Kap. 8] und [56, Kap. 7] skizziert. Ausgangspunkt ist die schwache Formulierung des Problems mit einem lokal  $\epsilon$ -periodischen  $a^\epsilon$ :

$$B^\epsilon(u^\epsilon, z) := \int_{\Omega} a\left(x, \frac{x}{\epsilon}\right) \nabla u^\epsilon(x) \cdot \nabla z(x) \, dx = \int_{\Omega} f(x) z(x) \, dx =: F(z) \quad \text{für alle } z \in \mathcal{H}_0^1(\Omega). \quad (4.9)$$

Die gesuchte Lösung  $u^\epsilon \in \mathcal{H}_0^1(\Omega)$  wird dann formal in einer Reihe der Form

$$u^\epsilon(x) = \sum_{i=0}^{\infty} \epsilon^i u^{(i)}\left(x, \frac{x}{\epsilon}\right)$$

entwickelt. Diese Entwicklung und ihr berechneter Gradient wird in Gleichung (4.9) eingesetzt. Die Testfunktion  $z \in \mathcal{H}_0^1(\Omega)$  wird als

$$z(x) = z^{(0)}(x) + \epsilon z^{(1)}\left(x, \frac{x}{\epsilon}\right)$$

mit einer in der zweiten Variablen 1-periodischen Funktion  $z^{(1)} \in \mathcal{H}_0^1(\Omega)$  gewählt. Nach Ausmultiplizieren der Terme und Koeffizientenvergleich der  $\epsilon$ -Potenzen erhält man beim  $\epsilon^{-1}$  Vergleich, dass  $u^{(0)}$  konstant in der zweiten Variable ist, d.h. es gilt

$$u^{(0)}\left(x, \frac{x}{\epsilon}\right) = u^0(x).$$

Der Vergleich der Koeffizienten der  $\epsilon^0$ -Terme führt für  $u^{(1)}$  zu dem sogenannten Zellproblem

$$\int_Y a(x, y) (\nabla u^0(x) + \nabla_y u^{(1)}(x, y)) \cdot \nabla(y) \, dy = 0 \quad \text{für alle } z \in \tilde{\mathcal{H}}_{\text{per}}^1(Y).$$

Dabei bezeichnet  $Y$  den in Gleichung (2.3) definierten Einheitswürfel,  $\nabla_y u^{(1)}(x, y)$  den Gradienten von  $u^1$  bzgl.  $y$  und  $\tilde{\mathcal{H}}_{\text{per}}^1(Y)$  wurde in Gleichung (2.5) definiert. Die Lösung des Zellproblems kann als

$$u^{(1)}(x, y) = \sum_{i=1}^n \partial_i u^0(x) w_i(x, y)$$

geschrieben werden. Dabei sind  $w_i \in \tilde{\mathcal{H}}_{\text{per}}^1(Y)$ , vergleiche Gleichung (2.5), die Lösungen folgender Mikroprobleme:

$$\begin{aligned} \int_Y a(x, y) \nabla w_i(x, y) \cdot \nabla z(y) \, dy = \\ - \int_Y a(x, y) e_i(y) \cdot \nabla z(y) \, dy \quad \text{für alle } z \in \tilde{\mathcal{H}}_{\text{per}}^1(Y). \end{aligned} \quad (4.10)$$

Die Existenz deren Lösungen folgt nach [56, Satz 4.27] aus dem Satz von Lax–Milgram (2.4). Solche Mikroprobleme werden auch in Kapitel 4.3 bei der numerischen Homogenisierung auftreten. Die berechneten  $u^{(0)}$  und  $u^{(1)}$  werden in Gleichung (4.9) eingesetzt und  $v^{(1)} = 0$  gewählt. Die Bildung des Grenzwertes  $\epsilon \rightarrow 0$  führt mit Lemma 2.2 zu den homogenisierten Koeffizienten

$$a^0(x) := \int_Y a(x, y) (\text{Id} + J_{w(y)}^T(x, y)) \, dy. \quad (4.11)$$

Dabei ist

$$(J_{w(y)}^T(x, y))_{i,j} = \partial_j w_i(x, y). \quad (4.12)$$

Das bedeutet, dass  $a^0$  nur von der Makrovariablen abhängig ist und für die punktweise Berechnung in  $\mathbb{R}^d$  das Lösen von je  $d$  Mikroproblemen nötig ist. Das erschwert die praktische Anwendbarkeit. Falls  $a^\epsilon$  nicht nur lokal, sondern auch global periodisch ist, ist nach Gleichung (4.11)  $a^0$  konstant und erfordert die Berechnung von insgesamt  $d$  Mikroproblemen. Anhand diesen Berechnungen wird festgestellt, dass für die Existenz des homogenisierten Problems und für die explizite Berechnung von  $a^0$  keine Stetigkeit von  $a^\epsilon$  nötig ist, was im Bezug auf die Koeffizienten des Batterieproblems wichtig ist. Außerdem hat nach [78, Prop. 3.4]  $a^0$  dieselben Eigenschaften wie  $a^\epsilon$ , d.h. falls  $a^\epsilon \in \mathcal{M}(\Omega, \theta, \Theta)$  ist, gilt auch  $a^0 \in \mathcal{M}(\Omega, \theta, \Theta)$ . Eine analoge Aussage gilt für ein symmetrisches  $a^\epsilon$ .

Als Abschluss dieses Kapitels wird eine Verbindung zwischen den behandelten Problemen hergestellt. Da die zuvor vorgestellten Ergebnisse für das allgemeine elliptische Problem in

$\mathbb{R}^d$  mit lokal  $\epsilon$ -periodischen Koeffizienten in  $\mathcal{M}(\Omega, \theta, \Theta)$  auf einem beschränkten Gebiet  $\Omega$  gelten, müssten sie auch für das am Anfang von Kapitel 4.2 vorgestellte 1D-Problem und den Spezialfall der geschichteten Materialien gültig sein. Dies ist nach [56, Prop. 6.16] und [56, Prop. 6.18] auch der Fall, da die geforderten Bedingungen erfüllt sind. Dort wird gezeigt, dass die in diesen zwei Fällen explizit berechneten Koeffizienten sich auch aus Gleichung (4.11) herleiten lassen. Dazu muss die Lösung der Mikroprobleme erst berechnet und dann in Gleichung (4.11) eingesetzt werden. Das ist aber ein deutlich höherer Aufwand als die direkte Berechnung.

### 4.2.3. Parabolische quasilineare Probleme

In diesem Kapitel wird die analytische Homogenisierung quasilinearparabolischer Probleme betrachtet. Diese ähneln dem Batterieproblem (3.1). Warum diese so bezeichnet werden, wird später erklärt. Abhängig von der genauen Problemstellung existiert eine Vielzahl an Arbeiten, die solche Probleme betrachten. In vielen Ausarbeitungen, wie z.B. in [108, 44, 67] kommt entweder kein oder nur ein linearer Koeffizient vor der Zeitableitung vor. In anderen, wie z.B. in [133, 26, 66, 107, 63] enthält die Gleichung zusätzliche schnell oszillierende Reaktionsterme und es gibt Arbeiten, wie z.B. [75], in der die räumlichen und zeitlichen Oszillationen auf verschiedenen Skalen stattfinden. Hier werden aber nur Probleme der Form

$$\begin{aligned} \partial_t b^\epsilon(x, u^\epsilon) - \nabla \cdot (a^\epsilon(x, u^\epsilon) \nabla u^\epsilon(t, x)) &= f(x) && \text{für alle } (t, x) \in \Omega_{t_{\text{end}}}, \\ u^\epsilon(t, x) &= g(t, x) && \text{für alle } (t, x) \in (0, t_{\text{end}}) \times \partial\Omega, \\ u^\epsilon(0, x) &= u_0(x) && \text{für alle } x \in \Omega \end{aligned} \quad (4.13)$$

mit dem Koeffizienten  $a^\epsilon : \Omega \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^{d \times d}$ , den Funktionen  $u^\epsilon : \Omega_{t_{\text{end}}} \rightarrow \mathbb{R}$ ,  $b^\epsilon : \Omega \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ ,  $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ ,  $g : (0, t_{\text{end}}) \times \partial\Omega \rightarrow \mathbb{R}$  und  $u_0 : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$  betrachtet. Der Grund dafür ist, dass diese die meisten Gemeinsamkeiten mit dem Batterieproblem (3.1) haben. Auf den Koeffizienten und die Funktionen wird später in diesem Kapitel bei den Ergebnissen genauer eingegangen. Gleichung (4.13) heißt *quasilinear*, weil der Koeffizient  $a^\epsilon$  zwar nichtlinear ist, aber nur von  $u^\epsilon$  und nicht von  $\nabla u^\epsilon$  abhängt. Solche Probleme werden unter anderem in [94, 112, 111] betrachtet. Die folgende Diskussion über ihre Homogenisierung basiert auf [111]. Es wird dabei auf die Aspekte konzentriert, die für das Batterieproblem (3.1) wichtig sind. Deshalb werden die Ergebnisse auch nur für den Fall ohne zeitliche Oszillationen, für ein von  $\nabla u^\epsilon$  unabhängiges  $a^\epsilon$  und somit für  $p = 2$  in den Bedingungen vorgestellt. Zur Vereinfachung wird das Problem wieder nur mit Dirichlet-Randbedingungen betrachtet.

Um Aussagen über die Lösbarkeit und die Homogenisierung des Problems treffen zu können, werden nach [111, Kap. 2] und [28, Kap. 1.1] folgende Funktionsräume definiert:

$$\begin{aligned} E &:= \{v \in \mathcal{W}^{1,2}(\Omega) \mid v = 0 \text{ auf } \partial\Omega\}, \\ \tilde{E} &:= \mathcal{L}^2(0, t_{\text{end}}; E). \end{aligned} \quad (4.14)$$



Dann hat nach [111, Satz 2.3] Gleichung (4.13) eine schwache Lösung  $u^\epsilon \in g + \tilde{E}$  im Sinne von [28, Def. 1.4], falls

$$b^\epsilon(x, u^\epsilon) \in \mathcal{L}^\infty(0, t_{\text{end}}; \mathcal{L}^1(\Omega)), \quad \partial_t b^\epsilon(x, u^\epsilon) \in \mathcal{L}^2(0, t_{\text{end}}; E^*)$$

und die folgenden Bedingungen erfüllt sind:

- $a^\epsilon$  ist messbar und  $\epsilon Y$ -periodisch in der ersten und stetig in der zweiten Variable. Außerdem existiert eine positive Konstante  $\beta$  so, dass für alle  $s, s_1, s_2 \in \mathbb{R}$  und  $x, \xi, \in \mathbb{R}^d$

$$\begin{aligned} a^\epsilon(x, s)\xi \cdot \xi &\geq \beta|\xi|^2, \\ |a^\epsilon(x, s)\xi| &\leq \beta^{-1}(1 + |s| + |\xi|), \\ |a^\epsilon(x, s_1) - a^\epsilon(x, s_2)|\xi &\leq \beta^{-1}(1 + |s_1| + |s_2| + |\xi|) \end{aligned} \quad (4.15)$$

erfüllt ist.

- Die Funktion  $b^\epsilon$  ist  $\epsilon Y$ -periodisch in der ersten, monoton wachsend mit  $b^\epsilon(x, 0) = 0$  in der zweiten und stetig in beiden Variablen. Außerdem gibt es eine positive Konstante  $r_2$  so, dass für alle  $\delta \in (0, R)$  ein  $C(\delta, R) > 0$  mit

$$|b^\epsilon(x, s_1) - b^\epsilon(x, s_2)| > C(\delta, R)|s_1 - s_2|^{r_2} \quad (4.16)$$

für alle  $x \in \epsilon Y$  und  $s_1, s_2 \in [-R, R]$  mit  $\delta < |s_1|$ , existiert.

- Für die Anfangs- und Randwerte bzw. für die rechte Seite gilt

$$\begin{aligned} g &\in \mathcal{L}^2(0, t_{\text{end}}; \mathcal{W}^{1,2}(\Omega)) \cap \mathcal{L}^\infty(\Omega_{t_{\text{end}}}), \\ \partial_t g &\in \mathcal{L}^1(0, t_{\text{end}}; \mathcal{L}^\infty(\Omega)), \\ u_0 &\in \mathcal{L}^\infty(\Omega) \text{ und } f \in \mathcal{L}^2(\Omega_{t_{\text{end}}}). \end{aligned} \quad (4.17)$$

Die ersten zwei Aussagen von Gleichung (4.15) entsprechen bei einem  $u^\epsilon$ -unabhängigen  $a^\epsilon$  der Bedingung  $a^\epsilon \in \mathcal{M}(\Omega, \beta, \beta^{-1})$ . Das bedeutet, dass zusätzlich zum rein elliptischen Fall wird hier noch die Beschränktheit, die Stetigkeit und die gleichmäßige Lipschitz-Stetigkeit in der zweiten Variablen gefordert wird. Die folgenden Ergebnisse gelten auch für ein lokal, also wie in Kapitel 4.2.2 betrachtet, statt global periodisches  $a^\epsilon$ . Um die Notation einfacher und übersichtlicher zu halten, wird dieser Fall hier nicht betrachtet. Darauf wird in Kapitel 4.3 bei der numerischen Homogenisierung eingegangen.

Falls die Lösungen  $u^\epsilon$  von Gleichung (4.13) gleichmäßig in  $\epsilon$  in  $\mathcal{L}^\infty(\Omega_{t_{\text{end}}})$  beschränkt sind, existiert für alle  $1 < q < \infty$  nach [111, Satz 2.3] das homogenisierte Problem

$$\begin{aligned} \partial_t \bar{b}(u^0) - \nabla \cdot (a^0(u^0) \nabla u^0(t, x)) &= f(t, x) && \text{für alle } x \in \Omega_{t_{\text{end}}}, \\ u^0(t, x) &= g(t, x) && \text{für alle } x \in (0, t_{\text{end}}) \times \partial\Omega, \\ u^0(0, x) &= u_0(x) && \text{für alle } x \in \Omega \end{aligned} \quad (4.18)$$

und ihre Lösung  $u^0$  mit den in Gleichung (4.19) definierten Koeffizienten. Für diese gelten folgende Aussagen:

$$\begin{aligned} u^0 &\in \mathcal{L}^\infty(\Omega_{t_{\text{end}}}) \cap (g + \widetilde{E}), \\ u^\epsilon &\rightarrow u^0 && \text{in } \mathcal{L}^q(\Omega_{t_{\text{end}}}), \\ \nabla u^\epsilon &\rightarrow \nabla u^0 && \text{in } \mathcal{L}^2(\Omega_{t_{\text{end}}}), \\ b^\epsilon(x, u^\epsilon) - b^\epsilon(x, u^0) &\rightarrow 0 && \text{in } \mathcal{L}^q(\Omega_{t_{\text{end}}}), \\ b^\epsilon(x, u^\epsilon) &\rightarrow \bar{b}(u^0) && \text{in } \mathcal{L}^q(\Omega_{t_{\text{end}}}). \end{aligned}$$

Das zeigt, dass die Konvergenz von  $u^\epsilon$  stark, die des Gradienten lediglich schwach ist. Das entspricht für  $q = 2$  den Ergebnissen des elliptischen Problems (4.8). Die homogenisierten Koeffizienten in (4.18) werden als

$$\begin{aligned} \bar{b}(s) &:= \int_Y b(y, s) \, dy, \\ a^0(s) &:= \int_Y a(y, s) (\text{Id} + J_{w(y,s)}^T(y, s)) \, dy \end{aligned} \tag{4.19}$$

definiert. Dabei sind  $a(\cdot, s)$  und  $b(\cdot, s)$  die nach Definition 2.1 zu  $a^\epsilon(\cdot, s)$  und  $b^\epsilon(\cdot, s)$  gehörende  $Y$ -periodischen Koeffizienten,  $w_i(\cdot, s) \in \widetilde{\mathcal{W}}_{\text{per}}^{1,2}(Y)$ , vergleiche Gleichung (2.6), löst das Mikroproblem

$$\begin{aligned} \int_Y a(y, s) \nabla w_i(y, s) \cdot \nabla z(y) \, dy = \\ - \int_Y a(y, s) e_i(y) \cdot \nabla z(y) \, dy \quad \text{für alle } z \in \widetilde{\mathcal{W}}_{\text{per}}^{1,2}(Y) \end{aligned} \tag{4.20}$$

und  $J_{w(y,s)}^T(y, s)$  ist analog zu Gleichung (4.12) definiert. Da in Gleichung (4.20) die Nichtlinearität nur als Parameter auftritt und  $a^\epsilon$  die nötigen Voraussetzungen erfüllt, hat das Mikroproblem (4.20) analog zu (4.10) nach dem Satz von Lax–Milgram (2.4) eine eindeutige Lösung in  $\widetilde{\mathcal{W}}_{\text{per}}^{1,2}(Y)$ . Die Formeln in Gleichung (4.19) zeigen einerseits, dass  $\bar{b}$  das arithmetische Mittel von  $b^\epsilon$  über eine Periode ist und andererseits, dass  $a^0$  ähnlich wie im rein elliptischen Fall, hier mit dem zusätzlichen Parameter  $s$ , berechnet werden kann. Außerdem müssen auch hier punktweise Mikroprobleme gelöst werden. Diese sind aber trotz der Nichtlinearität von  $a^\epsilon$  linear und enthalten  $s$  nur als Parameter. Das ist eine Folge der Quasilinearität des Problems. Dies vereinfacht die numerische Behandlung im nächsten Kapitel, da nur das Makroproblem nichtlinear sein wird.

Analog zum elliptischen Problem hat der homogenisierte Koeffizient  $a^0$  ähnlichen Eigenschaften wie  $a^\epsilon$ . So gelten nach [77, Kap. 2] für eine positive Konstante  $\beta$  und für alle  $s, s_1, s_2 \in \mathbb{R}$

und  $x, \xi, \in \mathbb{R}^d$

$$\begin{aligned} a^0(s)\xi \cdot \xi &\geq \beta|\xi|^2, \\ |a^0(s)\xi| &\leq \beta^{-1}(1 + |s| + |\xi|), \\ |a^0(s_1) - a^0(s_2)|\xi &\leq \beta^{-1}(1 + |s_1| + |s_2| + |\xi|). \end{aligned}$$

Fall die Koeffizienten  $a^\epsilon$  und  $b^\epsilon$  nicht global, sondern nur lokal periodisch sind, hängen die homogenisierten Koeffizienten  $a^0$  und  $b^0$  auch von der Makrovariablen ab. Beispiele dafür sind die Testprobleme in Kapitel 6.1.2.

In Kapitel 6 wird gezeigt, dass das Batterieproblem (3.1) die Bedingungen (4.15)–(4.17) nur teilweise erfüllt und die obigen Ergebnisse deshalb nicht direkt anwendbar sind. Daher können diese nur als Grundlage für die dort vorgestellte Methode verwendet werden.

### 4.3. Numerische Homogenisierung quasilinearer Probleme mit FE/DG-HMM

In Kapitel 4.2 wurden für elliptische und parabolische Probleme die Bedingungen für die Existenz des homogenisierten Problems und die analytische Berechenbarkeit der dazugehörigen homogenisierten Koeffizienten vorgestellt. Es wurde festgehalten, dass Letzteres außer im 1D-Fall nur für (lokal) periodische Koeffizienten mit Hilfe zusätzlicher Mikroprobleme möglich ist. Um diese Schwierigkeiten bewältigen zu können, wird das Konzept der numerischen Homogenisierung eingeführt. Dieses wird in diesem Kapitel vorgestellt. Wie es in Kapitel 1 erwähnt wurde, werden in dieser Arbeit zwei solche Methoden, die FE-HMM und die DG-HMM benutzt. Aus diesem Grund werden hier auch nur diese beiden diskutiert. Es wird dabei ein quasilineares elliptisches Problem betrachtet. Diese Wahl lässt sich damit begründen, dass die Wärmeleitfähigkeit des Batterieproblems (3.1), welche dem Diffusionskoeffizienten des quasilinearen Problems entspricht, zeitunabhängig ist und in solchen Fällen nach [13, 14, 20, 86, 85, 109] die auftretenden Mikroprobleme genauso elliptisch sind wie bei einem rein elliptischen Problem. Deshalb ist folgendes Problem für die Vorstellung der Methoden ausreichend.

#### 4.3.1. Problemstellung

Es wird das Problem

$$\begin{aligned} -\nabla \cdot (a^\epsilon(x, u^\epsilon) \nabla u^\epsilon(x)) &= f(x) && \text{für alle } x \in \Omega, \\ u^\epsilon(x) &= 0 && \text{für alle } x \in \partial\Omega \end{aligned} \tag{4.21}$$

auf einem beschränkten Gebiet  $\Omega \subset \mathbb{R}^d$  mit dem Tensor  $a^\epsilon : \Omega \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^{d \times d}$ , der rechten Seite  $f \in \mathcal{H}^{-1}(\Omega)$  und der Lösung  $u^\epsilon \in \mathcal{H}^1(\Omega)$  betrachtet. Gesucht ist die Lösung  $u^0 \in \mathcal{H}^1(\Omega)$  des zu diesem Problem gehörenden homogenisierten Problems

$$\begin{aligned} -\nabla \cdot (a^0(x, u^0) \nabla u^0(x)) &= f(x) && \text{für alle } x \in \Omega, \\ u^0(x) &= 0 && \text{für alle } x \in \partial\Omega \end{aligned} \quad (4.22)$$

mit dem unbekanntem homogenisierten Koeffizienten  $a^0 : \Omega \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^{d \times d}$ . Es werden, wie auch in Kapitel 4.2.2, zur Vereinfachung wieder homogene Dirichlet-Randbedingungen betrachtet. Die folgenden Aussagen über die Existenz und Eindeutigkeit der Lösung von Gleichung (4.21) gelten nach [88] auch für andere, wie Neumann-, Robin- oder gemischte, Randbedingungen. Nach [52, Satz 11.6] hat Gleichung (4.21) für jedes festes  $\epsilon > 0$  eine eindeutige schwache Lösung  $u^\epsilon \in \mathcal{H}_0^1(\Omega)$  mit  $\|u^\epsilon\|_{\mathcal{H}_0^1(\Omega)} \leq c \|f\|_{\mathcal{H}^{-1}(\Omega)}$ . Falls  $a^\epsilon$  messbar und  $\epsilon Y$ -periodisch in der ersten Variable ist, existieren Konstanten  $\theta, \Theta, \theta_1, \Theta_1, C_L > 0$  so, dass  $a^\epsilon \in \mathcal{M}(\Omega, \theta, \Theta)$  gilt und  $a^\epsilon$  stetig, beschränkt und für fast jedes  $x \in \Omega$  Lipschitz-stetig in der zweiten Variablen ist, d.h. für alle  $s, s_1, s_2 \in \mathbb{R}$

$$\theta_1 \leq a^\epsilon(x, s) \leq \Theta_1 \quad \text{für alle } x \in \Omega \quad (4.23)$$

und

$$|a^\epsilon(x, s_1) - a^\epsilon(x, s_2)| \leq C_L |s_1 - s_2| \quad \text{f.f.a } x \in \Omega \quad (4.24)$$

gelten. Zusammengefasst bedeuten die Bedingungen  $a^\epsilon \in \mathcal{M}(\Omega, \theta, \Theta)$  und (4.23), dass  $a^\epsilon$  auf  $\Omega \times \mathbb{R}$  beschränkt ist. In diesem Fall existiert nach [77, Satz 3.1] für das homogenisierte Problem (4.22) mit dem homogenisierten Koeffizienten  $a^0$  eine Lösung  $u^0 \in \mathcal{H}_0^1(\Omega)$  so, dass einerseits  $u^\epsilon \rightharpoonup u^0$  in  $\mathcal{H}_0^1(\Omega)$  für  $\epsilon \rightarrow 0$ , andererseits  $a^0 \in \mathcal{M}(\Omega, \theta, \Theta)$  und  $a^0$  bzgl. der zweiten Variablen Lipschitz-stetig ist.  $a^0$  ist aber, wie in Kapitel 4.2 auch, nur für (lokal) periodisches  $a^\epsilon$  explizit berechenbar.

In der folgenden Diskussion, die hauptsächlich auf [19], [3] und [5] basiert und teilweise in [136] veröffentlicht wurde, wird erklärt, wie  $u^0$  mit FE- und DG-HMM approximiert werden kann. Wie bereits in der Einleitung erwähnt, sind beide Methoden aus dem allgemeinen HMM Framework entstanden. Bei diesem werden die Daten auf der Makroskala, um die Lösung des homogenisierten Problems zu bestimmen, über Lösungen von Problemen auf der Mikroskala berechnet. Auf den verschiedenen Skalen können unterschiedliche numerische Methoden benutzt werden. Da sowohl bei der FE- als auch bei der DG-HMM auf der Mikroskala die FEM angewendet wird, werden erst die Komponenten auf dieser Skala, also der Mikro-Finite-Elemente-Raum und das Mikroproblem, und dann die auf der Makroskala, also die Quadraturformel, der Makro-Raum und das Makroproblem, beschrieben. Dort werden alle zu der jeweiligen Methode zusammengefügt und ihre Vorteile inklusive Fehlerabschätzung, vorgehoben.

### 4.3.2. Mikroskala

Auf dieser Skala wird ein Gebiet  $K_\delta(x_{K,j}) \subset \Omega$  mit  $x_{K,j} \in \Omega$  und  $\delta > 0$  betrachtet. Wie dieses definiert wird, wird später bei der Diskussion über die Makroskala in Kapitel 4.3.3 erläutert.  $\mathcal{T}_{\tilde{h}}$  ist mit der Mikro-Gitterweite  $\tilde{h}$  eine zulässige Triangulierung von  $K_\delta(x_{K,j})$  im Sinne von [43, Kap. 2.5]. Aus Gründen der Übersicht wird im Weiteren  $h$  für  $\tilde{h}$  verwendet. Um die  $\epsilon$ -Skala auf diesem Gebiet aufzulösen, wird  $h < \epsilon$  gewählt. Das ist, wie es in Kapitel 4.1 gezeigt wurde, nötig, um die richtige Lösung einer PDGL mit einem  $\epsilon$ -abhängigen Koeffizienten auf  $K_\delta(x_{K,j})$  zu erhalten. Dann wird der Mikro-Finite-Elemente-Raum als

$$\mathcal{V}^q(K_\delta(x_{K,j}), \mathcal{T}_h) := \{z^h \in \mathcal{W}(K_\delta(x_{K,j})) \mid z^h|_T \in \mathcal{R}^q(T) \text{ für alle } T \in \mathcal{T}_h\} \quad (4.25)$$

mit  $q \in \mathbb{N}$  definiert. Dabei bezeichnet  $\mathcal{R}^q(K)$  den Raum aller Polynome über  $T \in \mathcal{T}_h$  die in jeder Komponente einen Maximalgrad von  $q$  haben. Außerdem ist  $\mathcal{W}(K_\delta(x_{K,j}))$  der Sobolev-Raum mit entweder periodischen oder homogenen Dirichlet-Randbedingungen, also es gilt entweder

$$\mathcal{W}(K_\delta(x_{K,j})) = \tilde{\mathcal{H}}_{\text{per}}^1(K_\delta(x_{K,j}))$$

oder

$$\mathcal{W}(K_\delta(x_{K,j})) = \mathcal{H}_0^1(K_\delta(x_{K,j})).$$

In dieser Arbeit wird die erste Variante gewählt. Das liegt an den a-priori Fehlerabschätzungen die später in diesem Kapitel vorgestellt werden. Laut denen ist der Fehler für den periodischen Fall unabhängig von  $\delta$  und besitzt somit für die FEM erwartbare optimale Konvergenzordnung. Zusätzlich wird diese Wahl des Mikro-Raumes in Kapitel 5 mit numerischen Ergebnissen untermauert. Dort wird auch der Parameter  $q$  für die Implementierung bzw. die Anwendung gewählt und die Wahl begründet. In diesem Raum wird die Lösung  $w_{K,j}^{h,s}$  des Mikroproblems

$$\int_{K_\delta(x_{K,j})} a^\epsilon(x, s) \nabla w_{K,j}^{h,s}(x) \cdot \nabla z^h(x) \, dx = 0 \quad \text{für alle } z^h \in \mathcal{V}^q(K_\delta(x_{K,j}), \mathcal{T}_h) \quad (4.26)$$

für einen Parameter  $s \in \mathbb{R}$  und mit  $w_{K,j}^{h,s} - w_{\text{lin},K,j}^H \in \mathcal{V}^q(K_\delta(x_{K,j}), \mathcal{T}_h)$  gesucht. Dabei ist

$$w_{\text{lin},K,j}^H(x) := w^H(x_{K,j}) + (x - x_{K,j}) \cdot \nabla w^H(x_{K,j}) \quad (4.27)$$

die Linearisierung von einer Funktion  $w^H$  in  $x_{K,j}$ . Was genau für  $w^H$  eingesetzt wird, wird in Kapitel 4.3.3 spezifiziert. Da die periodische Randbedingung nicht direkt für  $w_{K,j}^{h,s}$  gilt, wird auf beiden Seiten von Gleichung (4.26)  $\int_{K_\delta(x_{K,j})} a^\epsilon(x, s) \nabla w_{\text{lin},K,j}^H(x) \cdot \nabla z^h(x) \, dx$  substrahiert, die Linearität des Integrals benutzt und  $\tilde{w}_{K,j}^{h,s} := w_{K,j}^{h,s} - w_{\text{lin},K,j}^H$  gesetzt. Dann wird aus der Lösung

des Mikroproblems

$$\int_{K_\delta(x_{K,j})} a^\epsilon(x, s) \nabla \tilde{w}_{K,j}^{h,s}(x) \cdot \nabla z^h(x) \, dx = \int_{K_\delta(x_{K,j})} a^\epsilon(x, s) \nabla w_{\text{lin},K,j}^H(x) \cdot \nabla z^h(x) \, dx \quad \text{für alle } z^h \in \mathcal{V}^q(K_\delta(x_{K,j}), \mathcal{T}_h) \quad (4.28)$$

die Lösung  $w_{K,j}^{h,s}$  von Gleichung (4.26) als  $w_{K,j}^{h,s} = w_{\text{lin},K,j}^H + \tilde{w}_{K,j}^{h,s}$  berechnet werden. Gleichung (4.28) wird in Kapitel 5 implementiert. Es kann festgehalten werden, dass Gleichung (4.28) genauso ein lineares Problem ist wie Gleichung (4.20) bei der analytischen Homogenisierung in Kapitel 4.2. Die Nichtlinearität von Gleichung (4.21) kommt hier ebenfalls nur als Parameter vor. Da außerdem  $a^\epsilon \in \mathcal{M}(\Omega, \theta, \Theta)$  gilt, folgt die Existenz der eindeutigen Lösung des Mikroproblems (4.26)  $w_{K,j}^{h,s} \in \mathcal{V}^q(K_\delta(x_{K,j}), \mathcal{T}_h)$  mit analogen Argumenten wie bei den Problemen (4.10) und (4.20). Damit wurden alle Komponenten auf der Mikroskala vorgestellt und jetzt können die auf der Makroskala betrachtet werden.

### 4.3.3. Makroskala

Analog zur Mikroskala in Kapitel 4.3.2 wird auch hier eine zulässige Triangulierung  $\mathcal{T}_H$  betrachtet, dieses mal aber von dem Gebiet  $\Omega \subset \mathbb{R}^d$  und mit der Makro-Gitterweite  $H$ . Wichtig ist hier, dass  $H > \epsilon$  gilt, also die Mikroskala mit diesem Gitter nicht aufgelöst wird. Über  $\mathcal{T}_H$  werden die Makro-Räume für die Methoden definiert. Für die FE-HMM wird

$$\mathcal{V}_{\text{FE}}^p(\Omega, \mathcal{T}_H) := \{v^H \in \mathcal{H}_0^1(\Omega) \mid v^H|_K \in \mathcal{R}^p(K) \text{ für alle } K \in \mathcal{T}_H\}$$

und für die DG-HMM

$$\mathcal{V}_{\text{DG}}^p(\Omega, \mathcal{T}_H) := \{v^H \in \mathcal{L}^2(\Omega) \mid v^H|_K \in \mathcal{R}^p(K), \text{ für alle } K \in \mathcal{T}_H\}$$

jeweils mit  $p \in \mathbb{N}$  gesetzt. Diese entsprechen den Räumen, die im Anhang B bei der Herleitung der jeweiligen Methoden für das Lösen von PDGln benutzt werden. Der Grund dafür ist, dass die FEM und die DG, wie es in der Einleitung erwähnt wurde, die auf der Makroskala eingesetzten Methoden sind. Diese sind im HMM Framework unabhängig von den anderen Komponenten. In diesen Räumen wird die Lösung des homogenisierten Problems gesucht. Wie das funktioniert, wird jetzt getrennt für die zwei Methoden vorgestellt.

**FE-HMM**

Gesucht wird die Lösung  $u^H \in \mathcal{V}_{\text{FE}}^p(\Omega, \mathcal{T}_H)$  von Gleichung (4.22). Dazu wird erst die schwache Formulierung des Problems (4.22) in  $\mathcal{V}_{\text{FE}}^p(\Omega, \mathcal{T}_H)$

$$\begin{aligned} B_{\text{FE}}(u^H, z) &:= \int_{\Omega} a^0(x, u^H(x)) \nabla u^H(x) \cdot \nabla z(x) \, dx \\ &= \int_{\Omega} f(x) z^H(x) \, dx =: F(z^H) \quad \text{für alle } z^H \in \mathcal{V}_{\text{FE}}^p(\Omega, \mathcal{T}_H) \end{aligned} \quad (4.29)$$

mit der wie im Anhang B.1 hergeleiteten Bilinearform  $B_{\text{FE}}$  und der Linearform  $F_H$  betrachtet. Das Integral in  $F$  wird mit der im Anhang B.3 diskutierten Quadraturformel berechnet. Jetzt wird das Integral der Bilinearform über  $\Omega$  zerlegt, die Linearität des Integrals benutzt und die in Anhang B vorgestellte Quadraturformel auf den einzelnen Vierecken angewendet. Damit folgt

$$B_{\text{FE}}(u^H, z) \approx \sum_{K \in \mathcal{T}_H} \sum_{j=1}^J \omega_{K,j} a^0(x_{K,j}, u^H(x_{K,j})) \nabla u^H(x_{K,j}) \cdot \nabla z^H(x_{K,j}) \, dx. \quad (4.30)$$

Die genaue Wahl der Quadratur und somit auch die von  $J$  hängt von dem Raum  $\mathcal{V}_{\text{FE}}^p(\Omega, \mathcal{T}_H)$  ab und wird für die Implementierung in Kapitel 5 diskutiert. Jetzt werden um die Quadraturpunkte  $x_{K,j} \in K$  die in Kapitel 4.3.2 schon eingeführten Mikro-Gebiete als

$$K_{\delta}(x_{K,j}) := x_{K,j} + \delta Y$$

definiert, wobei  $Y$  der in Kapitel 2 vorgestellte Einheitswürfel ist und  $\delta \geq \epsilon$  gilt. Im Folgenden werden die Lösungen  $z_{K,j}^{h,v^H(x_{K,j})}$  bzw.  $\tilde{v}_{K,j}^{h,v^H(x_{K,j})}$  des Mikroproblems (4.26) zu  $w^H = z^H \in \mathcal{V}_{\text{FE}}^p(\Omega, \mathcal{T}_H)$  bzw.  $w^H = \tilde{v}^H \in \mathcal{V}_{\text{FE}}^p(\Omega, \mathcal{T}_H)$  und mit dem Parameter  $s = v^H(x_{K,j})$  für  $v^H \in \mathcal{V}_{\text{FE}}^p(\Omega, \mathcal{T}_H)$  benutzt. Mit ihnen wird Gleichung (4.30) modifiziert, indem der Teil

$$a^0(x_{K,j}, u^H(x_{K,j})) \nabla u^H(x_{K,j}) \cdot \nabla z^H(x_{K,j})$$

ersetzt wird. Somit wird die Makro-Bilinearform als

$$\begin{aligned} B_{\text{FE},H}(v^H; \tilde{v}^H, z^H) &:= \\ &\sum_{K \in \mathcal{T}_H} \sum_{j=1}^J \frac{\omega_{K,j}}{|K_{\delta}(x_{K,j})|} \int_{K_{\delta}(x_{K,j})} a^{\epsilon}(x, v^H(x_{K,j})) \nabla \tilde{v}_{K,j}^{h,v^H(x_{K,j})}(x) \cdot \nabla z_{K,j}^{h,v^H(x_{K,j})}(x) \, dx \end{aligned} \quad (4.31)$$

definiert. Diese Umformung zeigt wie die Mikro- und die Makroskala gekoppelt werden. Dies geschieht über die Randbedingung der Mikroprobleme, die über eine Makro-Funktion definiert ist. Diese Kopplung ist eine wichtige Komponente der HMM, die in Kapitel 5 mit den Mikroproblemen der analytischen Homogenisierung (4.20) in Verbindung gebracht wird.

Damit wurden alle Komponenten von der FE-HMM vorgestellt. Sie werden in Abbildung 4.3 beispielhaft dargestellt. Im linken Teil wird die Makro-Triangulierung  $\mathcal{T}_H$ , im mittleren und rechten jeweils ein Element  $K \in \mathcal{T}_H$  bzw.  $T \in \mathcal{T}_h$  mit seinen Quadraturpunkten und im Makro-Fall die dazugehörigen Mikro-Gebiete inklusive ihrer Triangulierungen  $\mathcal{T}_h$  dargestellt.

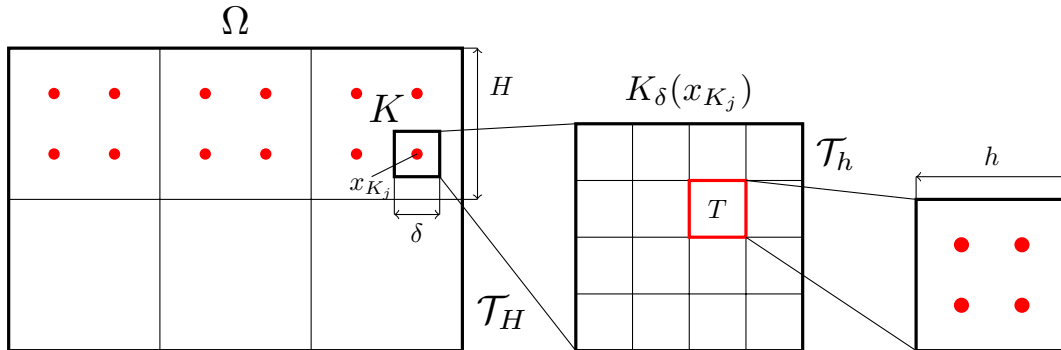


Abbildung 4.3.: Geometrische Komponenten der FE-HMM [136]: Das Makro-Gebiet  $\Omega$  inklusive der Makro-Triangulierung  $\mathcal{T}_H$  und den Quadraturpunkten (links), ein Mikro-Gebiet  $K_\delta(x_{K_j})$  inklusive der Mikro-Triangulierung  $\mathcal{T}_h$  (mitte) und ein Mikro-Element inklusive den Quadraturpunkten (rechts).

Nun kann die FE-HMM definiert werden: Finde  $u^H \in \mathcal{V}_{\text{FE}}^p(\Omega, \mathcal{T}_H)$  so, dass mit der in Gleichung (4.31) definierten Bilinearform und mit der Linearform aus Gleichung (4.29)

$$B_{\text{FE},H}(u^H; u^H, z^H) = F_H(z^H) \quad \text{für alle } z^H \in \mathcal{V}_{\text{FE}}^p(\Omega, \mathcal{T}_H) \quad (4.32)$$

gilt. Da  $a^\epsilon \in \mathcal{M}(\Omega, \theta, \Theta)$  vorausgesetzt wurde, womit die Koerzivität von  $B_{\text{FE},H}$  gezeigt wird, hat das nichtlineare Problem (4.32) nach [19, Satz 2.2] für alle  $H, h > 0$  eine Lösung  $u^H \in \mathcal{V}_{\text{FE}}^p(\Omega, \mathcal{T}_H)$ , falls  $f \in \mathcal{W}^{p,k}(\Omega)$  mit  $pk > d$  gilt. Diese Lösung ist nach [19, Satz 3.3] nur unter zusätzlichen Bedingungen und Annahmen an  $u^0$ ,  $a^0$  und  $H$  eindeutig.

Eine Folge von Gleichung (4.32) mit der Bilinearform (4.31) ist, dass  $u^H$  ohne der expliziten punktweise Berechnung des homogenisierten Koeffizienten  $a^0$  bestimmt werden kann. Außerdem folgt aus der Wahl  $h < \epsilon$  in Kapitel 4.3.2 und aus  $H > \epsilon$  in Kapitel 4.3.3, dass die  $\epsilon$ -Skala nur in den Mikro-Gebieten  $K_\delta(x_{K_j})$  aufgelöst werden muss. Dadurch ist die Auflösung des gesamten Gebietes im Gegensatz zur in Kapitel 4.1 gezeigten Anwendung der Standard-FEM, nicht nötig.

#### DG-HMM

Jetzt wird analog zu der FE-HMM die DG-HMM vorgestellt. Ihr Aufbau und ihre Struktur sind gleich, der Unterschied liegt nur in der benutzten Bilinearform. Deshalb wird hier die Lösung



$u^H \in \mathcal{V}_{\text{DG}}^p(\Omega, \mathcal{T}_H)$  gesucht. Es wird wieder die schwache Formulierung von Gleichung (4.22) in  $\mathcal{V}_{\text{DG}}^p(\Omega, \mathcal{T}_H)$

$$\begin{aligned}
 B_{\text{DG}}(u^H, z^H) &:= \int_{\Omega} a^0(x, u^H(x)) \nabla u^H(x) \cdot \nabla z^H(x) \, dx \\
 &- \sum_{e \in \mathcal{E} \setminus \partial\Omega_N} \int_e \left( \{a^0(\cdot, u^H) \nabla u^H\}_\gamma^e(\tilde{a}) \llbracket z^H \rrbracket_e(\tilde{a}) + \{a^0(\cdot, z^H) \nabla z^H\}_\gamma^e(\tilde{a}) \llbracket u^H \rrbracket_e(\tilde{a}) \right) \, d\tilde{a} \\
 &+ \sum_{e \in \mathcal{E} \setminus \partial\Omega_N} \int_e \mu_e \llbracket u^H \rrbracket_e(\tilde{a}) \llbracket z^H \rrbracket_e(\tilde{a}) \, d\tilde{a} = F_{\text{DG},H}(z^H) \quad \text{für alle } z \in \mathcal{V}_{\text{DG}}^p(\Omega, \mathcal{T}_H)
 \end{aligned} \tag{4.33}$$

mit der wie im Anhang B.2 hergeleiteten Bilinearform  $B_{\text{DG}}$ , Linearform  $F_{\text{DG},H}(z^H)$  und der *Straf-Funktion*  $\mu_e$  betrachtet.  $\partial\Omega_N$  bezeichnet den Neumann-Rand, der bei Problem (4.21) die leere Menge ist. Für den ersten Term der Bilinearform werden analoge Umformungen wie bei der FE-HMM vorgenommen. Da es auch den unbekanntem Koeffizienten  $a^0$  enthält, sollte außerdem auch der Ausdruck  $\{a^0(\cdot, v^H) \nabla \tilde{v}^H\}_\gamma^e$  für  $\tilde{v}^H, v^H \in \mathcal{V}_{\text{DG}}^p(\Omega, \mathcal{T}_H)$  mit Hilfe von Lösungen von Mikroproblemen ersetzt werden. Dieser stellt den mit der Gewichtsfunktion  $\gamma$  gewichteten Mittelwert des Flusses über die Kante  $e$  dar. Auf den dazugehörigen Zellen werden aber abhängig von der Quadraturformel mehrere Mikrolösungen in den Gebieten um die Quadraturpunkte berechnet, die keine Werte an den Kanten besitzen. Deshalb ist die Behandlung dieses Terms nicht analog zu der FE-HMM möglich und wird auf Kapitel 5.3 verschoben. Dort wird  $\{a^0(\cdot, v^H) \nabla \tilde{v}^H\}_\gamma^e$  durch den gewichteten Mittelwert des Multiskalenflusses über Kante  $e$ ,  $\{\Pi \zeta_{\tilde{v}^H}^{h,v^H}\}_\gamma^e$ , ersetzt und entsprechend definiert. Damit wird die Bilinearform als

$$\begin{aligned}
 B_{\text{DG},H}(v^H; \tilde{v}^H, z^H) &:= \\
 &\sum_{K \in \mathcal{T}_H} \sum_{j=1}^J \frac{\omega_{K,j}}{|K_\delta(x_{K,j})|} \int_{K_\delta(x_{K,j})} a^\epsilon(x, v^H(x_{K,j})) \nabla \tilde{v}_{K,j}^{h,v^H}(x) \cdot \nabla z_{K,j}^{h,v^H}(x) \, dx \\
 &+ \sum_{e \in \mathcal{E} \setminus \partial\Omega_N} \int_e \left( \{\Pi \zeta_{\tilde{v}^H}^{h,v^H}\}_\gamma^e(\tilde{a}) \llbracket z^H \rrbracket_e(\tilde{a}) + \{\Pi \zeta_{z^H}^{h,v^H}\}_\gamma^e(\tilde{a}) \llbracket \tilde{v}^H \rrbracket_e(\tilde{a}) \right) \, d\tilde{a} \\
 &+ \sum_{e \in \mathcal{E} \setminus \partial\Omega_N} \int_e \mu_e \llbracket \tilde{v}^H \rrbracket_e(\tilde{a}) \llbracket z^H \rrbracket_e(\tilde{a}) \, d\tilde{a}
 \end{aligned} \tag{4.34}$$

definiert. Dabei wird die Wahl der Straf- und der Gewichtsfunktion auch in Kapitel 5.3 diskutiert. Die Mikrolösungen  $\tilde{v}_{K,j}^{h,v^H}$  und  $z_{K,j}^{h,v^H}$  sind als Lösungen des Mikroproblems (4.26) mit entsprechenden Parameter definiert, wie ebenfalls bei der FE-HMM. An der Bilinearform (4.34) kann festgestellt werden, dass bei der DG-HMM, im Gegensatz zum im Anhang B.2 vorgestellten Standard-DG-Verfahren, der Koeffizient  $a^\epsilon$  an den Kanten nicht definiert sein muss. Damit kann die DG-HMM wie folgt definiert werden: Finde  $u^H \in \mathcal{V}_{\text{DG}}^p(\Omega, \mathcal{T}_H)$  so, dass mit der Bilinearform (4.34) und der Linearform (4.29)

$$B_{\text{DG},H}(u^H; u^H, z^H) = F_{\text{DG},H}(z^H) \quad \text{für alle } z^H \in \mathcal{V}_{\text{DG}}^p(\Omega, \mathcal{T}_H) \tag{4.35}$$

gilt, wobei die Linearform  $F_{DG,H}$  im Anhang B.2 definiert wird. Nach [3, Satz 4.4] ist die Bilinearform  $B_{DG,H}$  für  $\mu_e > \mu_{\min} > 0$  und für eine Zerlegung des Gebietes in Dreiecke gleichmäßig elliptisch und koerziv. Dabei hängt  $\mu_{\min}$  nur von  $\theta, \Theta, \mathcal{T}_H, d$  und  $p$  ab. Für eine Zerlegung in Vierecke, wie das in dieser Arbeit der Fall ist, gilt die gleichmäßige Elliptizität und die Koerzivität nach [3, Lemma 5.18]. Dabei wird noch zusätzlich vorausgesetzt, dass  $a^\epsilon$  lokal  $\epsilon$ -periodisch und über  $Y$  in der Makrovariablen konstant ist. Die Existenz der Lösung  $u^H \in \mathcal{V}_{DG}^p(\Omega, \mathcal{T}_H)$  von Gleichung (4.35) folgt dann analog zu deren von Gleichung (4.32).

#### 4.3.4. Fehleranalyse für die FE-HMM

Wie bereits in der Einleitung erwähnt, bietet das HMM Framework eine a-priori Fehleranalyse. Für lineare elliptische Probleme wird diese unter anderem in [4, 1, 116, 68] und für quasilineare Probleme in [21, 18] behandelt. Für Erstere gelten dieselben Abschätzungen unter schwächeren Voraussetzungen als die, welche hier vorgestellt werden. Im Folgenden werden die Fehlerabschätzungen für die FE-HMM diskutiert. Sie basieren auf [19, 5]. Das Ziel besteht darin, den Fehler  $\|u^0 - u^H\|$  in der  $\mathcal{L}^2(\Omega)$ - und in der  $\mathcal{H}^1(\Omega)$ -Norm abzuschätzen. Solange die Betrachtung unabhängig von der Norm ist, wird  $\|u^0 - u^H\|$  verwendet. Erst bei den konkreten Abschätzungen wird sie spezifiziert. Für die DG-HMM existieren analoge Abschätzungen, jedoch wird dabei neben der  $\mathcal{L}^2(\Omega)$ - eine Energienorm statt der  $\mathcal{H}^1(\Omega)$ -Norm verwendet. Diese werden im Falle einer Zerlegung des Gebiets  $\Omega$  in Dreiecke in [3] diskutiert. Für eine Triangulierung in Vierecke lassen sich die dort vorgestellten Ergebnisse mit Hilfe der in Kapitel 5.3 gegebenen Definition des Multiskalenflusses analog übertragen. Dies ist in dieser Arbeit aufgrund der Implementierung in *deal.II* der Fall. Im Folgenden wird einerseits auf die Zusammensetzung des Fehlers eingegangen und andererseits werden die konkreten Abschätzungen präsentiert. Allerdings sind für Gültigkeit der Abschätzungen außer den in Kapitel 4.3.1 geforderten Bedingungen weitere Annahmen notwendig. Zunächst werden diese zusammengefasst:

- Die für die Berechnung der Integrale verwendete Quadraturformel soll die Bedingung (B.4) aus Anhang B.3 erfüllen.
- Für die rechte Seite  $f$  wird

$$f \in \mathcal{W}^{p+1,k}(\Omega) \quad (4.36)$$

mit  $p > d/k$  vorausgesetzt.

- Für die Lösung des homogenisierten Problems (4.22) wird

$$u^0 \in \mathcal{H}^{p+1}(\Omega) \cap \mathcal{W}^{1,\infty}(\Omega) \quad (4.37)$$

angenommen.

- Für den homogenisierten Koeffizienten sollen

$$\begin{aligned} a^0 &\in \mathcal{W}^{p+1,\infty}(\Omega \times \mathbb{R}) \cap C^0(\overline{\Omega} \times \mathbb{R}), \\ \partial_s a^0 &\in \mathcal{W}^{1,\infty}(\Omega \times \mathbb{R}), \\ \partial_s a^0, \partial_{ss} a^0 &\in \mathcal{L}^\infty(\overline{\Omega} \times \mathbb{R}) \cap C^0(\overline{\Omega} \times \mathbb{R}) \end{aligned} \quad (4.38)$$

gelten, wobei  $\partial_s a^0$  und  $\partial_{ss} a^0$  die erste und zweite Ableitung von  $a^0$  nach der zweiten Variable sind.

- Für den  $\epsilon$ -abhängigen Koeffizienten soll die Abbildung

$$s \in \mathbb{R} \mapsto a^\epsilon(\cdot, s) \in (\mathcal{L}^\infty(\Omega))^{d \times d} \quad (4.39)$$

von der Klasse  $C^1$  sein. Dabei sind die Normen von  $a^\epsilon, \partial_s a^\epsilon(\cdot, s) \in \mathcal{L}^\infty(\Omega)$  unabhängig von  $s$  und  $\epsilon$ .

- Für jedes  $s \in \mathbb{R}$  und jedes  $K \in \mathcal{T}_H$  wird außerdem

$$\begin{aligned} a^\epsilon(\cdot, s)|_K &\in \mathcal{W}^{1,\infty}(K), \\ \|a^\epsilon(\cdot, s)\|_{\mathcal{W}^{1,\infty}(K)} &\leq C\epsilon^{-1} \end{aligned} \quad (4.40)$$

angenommen.

- Der Koeffizient  $a^\epsilon$  wird als lokal  $\epsilon Y$ -periodisch vorausgesetzt und die Abbildung

$$(x, s) \mapsto a(x, \cdot, s) \quad (4.41)$$

soll Lipschitz-stetig und beschränkt von  $\overline{\Omega} \times \mathbb{R}$  nach  $\mathcal{W}_{\text{per}}^{1,\infty}(Y)$  sein.

Falls diese Bedingungen erfüllt sind, gilt nach [19, Satz 3.7] für die analytische Lösung  $u^0$  und der FE-HMM-Lösung  $u^H$  des Problems (4.22) für  $\mathcal{W}(K_\delta(x_{K,j})) = \tilde{\mathcal{H}}_{\text{per}}^1(K_\delta(x_{K,j}))$  mit  $\frac{\delta}{\epsilon} \in \mathbb{N}$

$$\begin{aligned} \|u^0 - u^H\|_{\mathcal{L}^2(\Omega)} &\leq C(H^{p+1} + (h/\epsilon)^{2q}), \\ \|u^0 - u^H\|_{\mathcal{H}^1(\Omega)} &\leq C(H^p + (h/\epsilon)^{2q}) \end{aligned} \quad (4.42)$$

und für  $\mathcal{W}(K_\delta(x_{K,j})) = \mathcal{H}_0^1(K_\delta(x_{K,j}))$

$$\begin{aligned} \|u^0 - u^H\|_{\mathcal{L}^2(\Omega)} &\leq C\left(H^{p+1} + (h/\epsilon)^{2q} + \delta + \frac{\epsilon}{\delta}\right), \\ \|u^0 - u^H\|_{\mathcal{H}^1(\Omega)} &\leq C\left(H^p + (h/\epsilon)^{2q} + \delta + \frac{\epsilon}{\delta}\right). \end{aligned} \quad (4.43)$$

Wie Abschätzung (4.43) zeigt, besteht der Fehler aus drei Teilen. Wie diese zustandekommen, wird als Nächstes diskutiert. Dazu wird der Fehler mit Hilfe der Dreiecksungleichung als

$$\|u^0 - u^H\| \leq e_{\text{MAC}} + e_{\text{MIC}} + e_{\text{MOD}} \quad (4.44)$$

aufgeteilt. Dabei werden der Makrofehler  $e_{MAC}$ , der Modellierungsfehler  $e_{MOD}$  und der Mikrofehler  $e_{MIC}$  im Folgenden genauer vorgestellt.

Der Makrofehler, also der Fehler der zwischen der analytischen Lösung und der Lösung mit numerischer Quadratur in  $\mathcal{V}_{FE}^p(\Omega, \mathcal{T}_H)$  des homogenisierten Problems (4.22), wird nach [19, Satz 3.1] in der  $\mathcal{H}^1$ -Norm durch  $CH^p$  und in der  $\mathcal{L}^2$ -Norm durch  $CH^{p+1}$  abgeschätzt. Dazu werden die Bedingungen an die Quadraturformel, an die rechte Seite und an die homogenisierte Lösung (4.37) bzw. die Koeffizienten (4.38) verwendet. Der Beweis basiert auf den Ergebnissen in [18].

Als Nächstes wird der Mikrofehler betrachtet. Dieser stellt dar, wie der Fehler, der beim Lösen der Mikroprobleme auf der Mikroskala entsteht, sich auf die Makroskala auswirkt. Dazu wird die Bilinearform (4.31) mit analytischen Lösungen der Mikroprobleme definiert und die Bedingungen (4.39) und (4.40) verwendet. Nach [19, Lemma 4.6] ist dieser Fehler für die betrachtete  $\mathcal{L}^2$ - und  $\mathcal{H}^1$ -Normen unabhängig von der Norm und kann durch

$$e_{MIC} \leq C \left( \frac{h}{\epsilon} \right)^{2q}$$

abgeschätzt werden. Es ist wichtig darauf hinzuweisen, dass für die in Kapitel (4.3.3) bei der FE-HMM bei der Lösbarkeit von Gleichung (4.32) erwähnte Eindeutigkeit der Lösung nach [19, Satz 3.3] die hier verwendeten Bedingungen (4.39) und (4.40) vorausgesetzt werden müssen.

Zuletzt wird der Modellierungsfehler charakterisiert. Dieser entsteht aufgrund der Kopplung der Makro- und Mikroprobleme über die Randbedingungen. Deshalb ist er für die Dirichlet- und die periodische Kopplung unterschiedlich. Um die für die Betrachtung dieses Fehlers geforderte lokale  $\epsilon$ -Periodizität auszunutzen, wird die Makrovariable in den Quadraturpunkten kolloziert und so die modifizierte Bilinearform

$$\begin{aligned} \tilde{B}_{FE,H}(v^H; \tilde{v}^H, z^H) := \\ \sum_{K \in \mathcal{T}_H} \sum_{j=1}^J \frac{\omega_{K,j}}{|K_\delta(x_{K,j})|} \int_{K_\delta(x_{K,j})} a^\epsilon \left( x_{K,j}, \frac{x}{\epsilon}, v^H(x_{K,j}) \right) \nabla \tilde{v}_{K,j}^{h,v^H(x_{K,j})}(x) \cdot \nabla z_{K,j}^{h,v^H(x_{K,j})}(x) dx \end{aligned} \quad (4.45)$$

definiert. Nach [19, Lemma 4.7] gilt unter denselben Bedingungen wie beim Mikrofehler und unabhängig von der Norm

$$e_{MOD} \leq \begin{cases} \delta + \frac{\epsilon}{\delta}, & \text{falls } \mathcal{W}(K_\delta(x_{K,j})) = \mathcal{H}_0^1(K_\delta(x_{K,j})), \\ \delta, & \text{falls } \mathcal{W}(K_\delta(x_{K,j})) = \tilde{\mathcal{H}}_{\text{per}}^1(K_\delta(x_{K,j})) \text{ und } \frac{\delta}{\epsilon} \in \mathbb{N}, \\ 0, & \text{falls } \mathcal{W}(K_\delta(x_{K,j})) = \tilde{\mathcal{H}}_{\text{per}}^1(K_\delta(x_{K,j})) \text{ und } \frac{\delta}{\epsilon} \in \mathbb{N} \end{cases} \quad (4.46)$$

falls für den letzten Fall Gleichung (4.45) statt der Bilinearform (4.31) benutzt wird. Diese Abschätzung zeigt, dass für Probleme mit lokal periodischen Tensoren die periodischen

Randbedingungen bessere Ergebnisse liefern. Das wird auch in Kapitel 5 an numerischen Beispielen gezeigt. Werden diese drei Komponenten des Fehlers zusammengefügt, folgen die Fehlerabschätzungen (4.42) und (4.43).

Aus den Abschätzungen (4.42) können ebenfalls die optimalen Verfeinerungsstrategien für den periodischen Fall für die verschiedenen Normen bestimmt werden. Entscheidend ist dabei, die Mikro- und Makro-Gitterweiten in Abhängigkeit voneinander so zu wählen, dass die Komponenten des Gesamtfehlers ausgeglichen werden. Somit ergeben sich

$$h/\epsilon = H^{p/(2q)} \quad (4.47)$$

für die  $\mathcal{H}^1(\Omega)$ -Norm und

$$h/\epsilon = H^{(p+1)/(2q)} \quad (4.48)$$

für die  $\mathcal{L}^2(\Omega)$ -Norm. In Kapitel 5.2 werden diese Zusammenhänge an numerischen Beispielen verifiziert.

### 4.3.5. Adaptives FE-HMM

Als Abschluss dieses Kapitels wird basierend auf [16] und [1] die adaptive FE-HMM vorgestellt. Das Lösen von Mikroproblemen, wie es in Kapitel 5.1 gezeigt wird, macht einen Großteil der Rechenzeit der Methode aus. Bei der Fehleranalyse wurde festgestellt, dass eine simultane Verfeinerung des Makro- und Mikro-Gitters nötig ist, was die Rechenzeit weiter erhöht. Aus diesen Gründen ist bei Multiskalenproblemen ein adaptiver Lösungsalgorithmus noch wichtiger als bei Problemen auf einer Skala. Im Folgenden wird die adaptive Verfeinerung des Makro-Gitters vorgestellt. Da die Mikro-Gebiete eine einfache Struktur haben und sie simultan zu dem Makro-Gebiet verfeinert werden, ist das nach [16, Kap. 4] für diese Betrachtung ausreichend. Falls bei den Mikroproblemen Singularitäten auftreten, können die zugehörigen Gebiete mit Standard a-posteriori Methoden verfeinert werden. Der Algorithmus ist wie bei Einskalenproblemen aufgebaut und beinhaltet deshalb die vier Schritte **Lösen**, **Abschätzen**, **Markieren** und **Verfeinern**, die im Folgenden diskutiert werden.

Beim Lösen wird Gleichung (4.22) mit der FE-HMM auf dem gegebenen, eventuell schon verfeinerten, Makro-Gitter gelöst. Um den Fehler auf den einzelnen Zellen abschätzen zu können, wird ein lokales Merkmal benötigt. Dafür wird folgender flussbasierter Indikator

$$\eta_H(K)^2 := H_K^2 \|f^H + \nabla \cdot \Pi \zeta_{u^H}^{h,u^H}\|_{\mathcal{L}^2(K)}^2 + \frac{1}{2} \sum_{e \subset \partial K, e \notin \partial \Omega} H_e \|\llbracket \Pi \zeta_{u^H}^{h,u^H} \rrbracket_e\|_{\mathcal{L}^2(e)}^2 \quad (4.49)$$

definiert. Dabei ist  $u^h$  die Lösung von Gleichung (4.26) mit  $w^H = u^H$  und mit dem Parameter  $s = u^H(x_{K,j})$ . Der Sprung über die Kante  $e$  wird analog zu dem bei der DG-HMM auftretenden Mittelwert mit Hilfe des Multiskalenflusses  $\Pi \zeta_{u^H}^{h,u^H}$  in Kapitel 5.3 und Kapitel 5.4 definiert.

Außerdem ist  $f^H$  die stückweise konstante Approximation von  $f$  auf  $K$ . Da der Koeffizient des homogenisierten Problems  $a^0$  unbekannt ist und somit das Residuum  $f^H + \nabla \cdot (a^0(u^H)\nabla u^H)$  nicht explizit berechnet werden kann, muss dieser auch mit Hilfe des Multiskalenflusses  $\Pi \zeta_{u^H}^{h,u^H}$  berechnet werden. Für  $\tilde{\Omega} = \bigcup_{i=1}^n K_i \subset \Omega$  mit  $K_i \in \mathcal{T}_H$  für  $i = 1, \dots, n$  wird  $\eta_H(\tilde{\Omega})$  als

$$\eta_H(\tilde{\Omega})^2 := \sum_{i=1}^n \eta_H(K_i)^2 \quad (4.50)$$

definiert.

Die Berechnung von  $\eta_H(K)^2$  ist mit keinem zusätzlichen Rechenaufwand verbunden, da sie nur aus Lösungen von Mikroproblemen, die bereits berechnet wurden, ausgeführt werden kann. Dies wird in Kapitel 5.4 gezeigt. Dort wird auch auf die effiziente Berechnung von  $u^H$  im nächsten Schritt eingegangen. Nach [16, Satz 2, 3] kann mit diesem Indikator sowohl eine untere als auch eine obere Schranke für den Fehler  $\|u^0 - u^H\|_{\mathcal{H}^1(\Omega)}$  hergeleitet werden. In [1, Kap. 4] wird sogar gezeigt, dass  $\eta_H(K)^2$  der entsprechenden Größe bei der Anwendung der Standard-FEM entspricht und so konsistent mit der klassischen Theorie ist. Damit können die Zellen zur Verfeinerung markiert werden. Diese erfolgt nach dem Dörfler-Marking [64]. Das Ziel dabei ist, für einen gegebenen Parameter  $0 < \vartheta < 1$  die kleinste Teilmenge  $\tilde{\mathcal{T}}_H \subset \mathcal{T}_H$  zu finden, so, dass

$$\sum_{K \in \tilde{\mathcal{T}}_H} \eta_H(K)^2 \geq \vartheta \eta_H(\Omega)^2. \quad (4.51)$$

Die Elemente in  $\tilde{\mathcal{T}}_H$  werden verfeinert. Bei den zu diesen gehörenden Mikro-Gebieten wird nach der optimalen Verfeinerungsstrategie, vergleiche Gleichung 4.47, vorgegangen, weshalb die Mikro-Gitterweite  $\tilde{h}$  als  $\tilde{h} = H$  gesetzt wird. Einen solchen Verfeinerungsschritt zeigt Abbildung 4.4.

Damit wurden die Grundlagen aller Komponenten, die für die Homogenisierung des Batterieproblems (3.1) nötig sind, vorgestellt. Die analytische und numerische Homogenisierung wurde eingeführt und ausführlich erklärt. Weitere Erklärungen können bei den entsprechenden Literaturhinweisen gefunden werden.

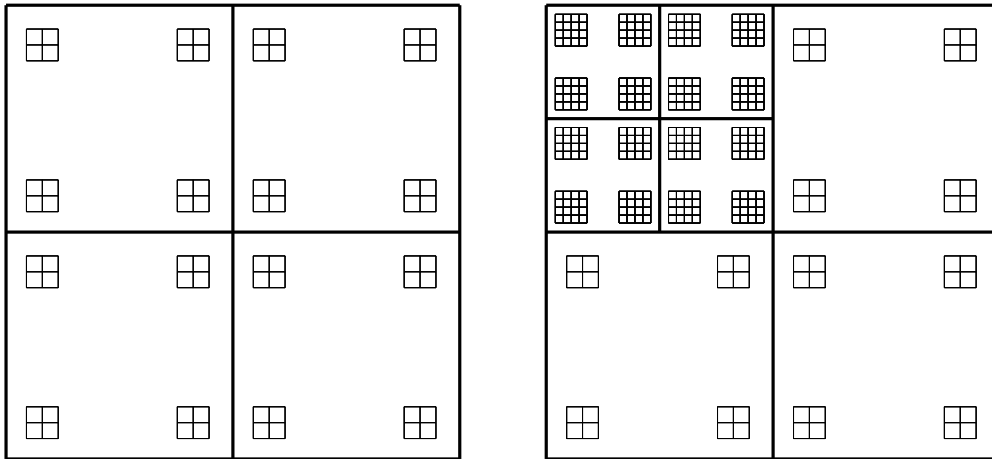


Abbildung 4.4.: Ausgangsgitter (links) und einmal adaptiv verfeinertes Makro-Gitter (rechts).

## 5. Implementierung in *deal.II*

In diesem Kapitel wird die Implementierung der zwei, in Kapitel 4.3 vorgestellten Methoden, der FE- und der DG-HMM, vorgestellt. Dabei ist das Ziel diese bezüglich Rechenzeit so zu optimieren, dass die optimalen Konvergenzordnungen aus Kapitel 4.3.4 erreicht werden.

Wie schon in der Einleitung erwähnt, wird die Implementierung in der Finite-Elemente-Bibliothek *deal.II* umgesetzt. Sie wurde gewählt, weil sie auch für spezielle Probleme, wie das Multiskalenproblem in dieser Arbeit, einsetzbar ist. Der Grund dafür ist, dass sie einen einfachen Zugriff auf einzelne Komponenten eines Finite-Elemente-Codes, wie z.B. die Quadraturpunkte einer Triangulierung oder einzelne Elemente der System-Matrix, ermöglicht. Diese sind für die Implementierung der FE- bzw. der DG-HMM wichtig und sind bei anderen Simulationssoftware, wie z.B. bei OpenFOAM, nicht zugänglich. Trotz dieser Flexibilität bleibt der Code dank vieler *deal.II*-internen Routinen übersichtlich. Außerdem besitzt die Bibliothek eine ausführliche und sehr viele Standard-Beispiele umfassende Dokumentation, die dank einer aktiven Benutzer-Community ständig wächst.

Die optimierte Implementierung, die in Kapitel 5.2 vorgestellt wird, und ihre numerische Effizienz werden mit Hilfe der *method of manufactured solutions* (MMS) [125] an einem quasilinearen, elliptischen Testproblem, welches auf [19, Kap. 5] basiert, validiert. Mit diesem gewählten Testproblem lassen sich alle wichtige Besonderheiten der Umsetzung der Methoden und dessen Optimierung zeigen. Deshalb ist ein solches Problem, wie es auch im Kapitel 4.3 war, ausreichend. Bei der MMS wird das Testproblem so aufgestellt, dass die betrachtete PDGl eine bestimmte, vorgegebene Lösung besitzt. Diese wird in dieser Arbeit als *konstruierte Lösung* bezeichnet. Hier wird das Konzept der MMS so modifiziert, dass nicht die ursprünglich zu lösende,  $\epsilon$ -abhängige PDGl diese besitzt, sondern die nach Kapitel 4.3 zu dem Problem gehörende homogenisierte Gleichung. Der Grund dafür ist, dass die FE- bzw. die DG-HMM nach Kapitel 4.3 gegen deren Lösung konvergiert und der Fehler bzw. dessen Ordnung somit bzgl. der homogenisierten Lösung berechnet werden soll. Um die MMS auf das homogenisierte Problem anwenden zu können, muss außer der konstruierten Lösung auch der Koeffizient der dazugehörigen PDGl bekannt sein. Deshalb muss  $a^\epsilon$  so gewählt werden, dass  $a^0$  mit Hilfe der in Kapitel 4.2.1 für das 1D-Problem hergeleiteten Formel explizit berechnet werden kann. Um das zu ermöglichen, müssen ihre Komponenten nach [95, Kap. 1.2] spezielle Bedingungen erfüllen. Eine solche Möglichkeit ist der in Kapitel 4.2.1 vorgestellte Fall der geschichteten Materialien. Eine andere ist, dass die Einträge von  $a^\epsilon$  nur von jeweils einer Komponente der Makrovariablen abhängen. Diese zweite Möglichkeit wird hier benutzt. Deshalb wird



$a^\epsilon : \Omega \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^{2 \times 2}$  für  $\epsilon = 10^{-5}$  als

$$a^\epsilon(x, s) := \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} \left(2 + \sin\left(\frac{2\pi x_1}{\epsilon}\right)\right)(2 + x_1 \sin(\pi s)) & 0 \\ 0 & \left(2 + \sin\left(\frac{2\pi x_2}{\epsilon}\right)\right)(2 + \arctan(s)) \end{pmatrix} \quad (5.1)$$

definiert. Daraus wird  $a^0 : \Omega \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^{2 \times 2}$  nach Kapitel 4.2.1 als

$$a^0(x, s) := \begin{pmatrix} 2 + x_1 \sin(\pi s) & 0 \\ 0 & 2 + \arctan(s) \end{pmatrix} \quad (5.2)$$

berechnet. So ergibt sich für  $\Omega = (0, 1)^2$  folgendes Problem: Finde  $u^\epsilon : \Omega \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ ,  $u^\epsilon \in \mathcal{H}^1(\Omega)$  so, dass

$$\begin{aligned} -\nabla \cdot (a^\epsilon(x, u^\epsilon) \nabla u^\epsilon(x)) &= f(x) && \text{für alle } x \in \Omega, \\ u^\epsilon(x) &= 0 && \text{für alle } x \in \partial\Omega \end{aligned} \quad (5.3)$$

gilt. Das dazugehörige homogenisierte Problem ist: Finde  $u^0 : \Omega \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ ,  $u^0 \in \mathcal{H}^1(\Omega)$  so, dass

$$\begin{aligned} -\nabla \cdot (a^0(x, u^0) \nabla u^0(x)) &= f(x) && \text{für alle } x \in \Omega, \\ u^0(x) &= 0 && \text{für alle } x \in \partial\Omega \end{aligned} \quad (5.4)$$

gilt. Die dafür konstruierte Lösung ist nach [19, Kap. 5]

$$u^0(x) = 8 \sin(\pi x_1) x_2 (1 - x_2). \quad (5.5)$$

Um die rechte Seite  $f$  von der PDGl (5.3) bzw. (5.4) zu bestimmen, werden (5.2) und (5.5) in Gleichung (5.4) eingesetzt und der Term  $-\nabla \cdot (a^0(x, u^0) \nabla u^0(x))$  mit Hilfe der Produkt- und Kettenregel berechnet. So ergibt sich

$$\begin{aligned} f(x) &= - \left( \sin(\pi u^0(x)) + x_1 \pi \cos(\pi u^0(x)) \right) u_1^0(x) \nabla u_1^0(x) + \pi^2 a_{1,1}^0(x, u^0(x)) u^0(x) \\ &\quad - \frac{1}{1 + (u^0(x))^2} (\nabla u_2^0(x))^2 + 16 a_{2,2}^0(x, u^0(x)) \sin(\pi x_1), \end{aligned}$$

wobei

$$\nabla u^0(x) = (\nabla u_1^0(x) \quad \nabla u_2^0(x)) = (8\pi \cos(\pi x_1) x_2 (1 - x_2) \quad 8 \sin(\pi x_1) (1 - 2x_2))$$

und

$$a^0(x, s) = \begin{pmatrix} a_{1,1}^0(x, s) & 0 \\ 0 & a_{2,2}^0(x, s) \end{pmatrix}$$

ist. Dabei bezeichnet für  $i \in \{1, 2\}$   $\nabla u_i^0$  die  $i$ -te Komponente des Gradienten  $\nabla u^0$ .

Anhand dieses Problems werden in Kapitel 5.1 die wesentlichen Komponenten der Implementierung der FE-HMM in *deal.II* vorgestellt. Diese basiert auf der Theorie aus Kapitel 4.3, genauer auf der Bilinearform (4.31) und auf dem Mikroproblem (4.26). Für Letzteres werden verschiedene Randbedingungen implementiert und verglichen. Die Ergebnisse werden zusammen mit einer Analyse der Rechenzeit des kompletten Algorithmus vorgestellt und diskutiert. Anhand deren werden Stellen identifiziert, für die eine Optimierung nötig und möglich ist. In Kapitel 5.2 werden diese Optimierungsmöglichkeiten mit Hilfe mathematischer Konzepte untersucht und der Algorithmus verbessert. Es wird gezeigt, dass auch bei der deutlich geringeren Rechenzeit die erwartete Konvergenzordnung erreicht wird. Da die verwendeten Konzepte und die damit verbundenen Optimierungsschritte sich auch auf die DG-HMM übertragen lassen, werden sie in Kapitel 5.2 nur für die FE-HMM diskutiert.

Um zu wissen welche Konvergenzordnung beim Testproblem (5.4) nach den Fehlerabschätzungen (4.42) und (4.43) erwartet werden kann, wird im Folgenden geprüft, welche der in Kapitel 4.3.4 gestellten Forderungen die Tensoren  $a^\epsilon$  und  $a^0$ , die rechte Seite  $f$  und die Lösung  $u^0$  erfüllen. Da

$$1 \leq 2 + \sin\left(\frac{2\pi x_1}{\epsilon}\right) \leq 3 \quad \text{für alle } x_1 \in \mathbb{R}$$

und

$$1 \leq 2 + x_1 \sin(\pi s) \leq 3, \quad 0.1 \leq 2 + \arctan(s) \leq 4 \quad \text{für alle } x_1 \in (0, 1) \text{ und } s \in \mathbb{R}$$

gelten, ist  $a^\epsilon \in \mathcal{M}(\Omega, \frac{0.1}{\sqrt{3}}, \frac{12}{\sqrt{3}})$ , wobei  $\mathcal{M}(\Omega, \frac{0.1}{\sqrt{3}}, \frac{12}{\sqrt{3}})$  in Definition 2.3 definiert wurde. Aus der Beschränktheit und der Lipschitz-Stetigkeit von  $\sin : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  und  $\arctan : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  folgt, dass  $a^\epsilon$  in der zweiten Variablen für jedes  $x \in \mathbb{R}$  beschränkt und Lipschitz-stetig ist. Da diese Funktionen über  $\mathbb{R}$  beliebig oft stetig differenzierbar mit beschränkten Ableitungen sind, ist Bedingung (4.39) erfüllt. Die Definition von  $a^\epsilon$ , Gleichung (5.1), zeigt, dass  $a^\epsilon$  lokal  $\epsilon$ -periodisch ist. Damit gilt mit der Lipschitz-Stetigkeit und der Beschränktheit von  $\sin : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  Bedingung (4.41). Da außerdem  $a^\epsilon(\cdot, s)$  für alle  $s \in \mathbb{R}$  stetig differenzierbar und sowohl die Funktion als auch die Ableitung beschränkt sind, gilt für eine zulässige Triangulierung  $\mathcal{T}_H$  von  $\Omega$

$$a^\epsilon(\cdot, s)|_K \in \mathcal{W}^{1,\infty}(K) \quad \text{und} \quad \|a^\epsilon(\cdot, s)\|_{\mathcal{W}^{1,\infty}(K)} \leq C\epsilon^{-1} \quad \text{für alle } K \in \mathcal{T}_H, s \in \mathbb{R}.$$

Damit ist die Voraussetzung (4.40) erfüllt. Aus den oben genannten Eigenschaften von  $\sin : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  und  $\arctan : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  folgt für den homogenisierten Koeffizient  $a^0$  die Bedingung (4.38). Da  $f$  als Summe und Produkt von  $C^\infty(\Omega)$ -Funktionen geschrieben werden kann, gilt  $f \in \mathcal{W}^{p+1,k}(\Omega)$  mit  $pk > d$  und  $d = 2$ . Mit einem analogen Argument folgt  $u^0 \in \mathcal{H}^{p+1}(\Omega) \cap \mathcal{W}^{1,\infty}(\Omega)$  für  $p \geq 1$ . Damit sind alle Voraussetzungen für die Fehlerabschätzungen aus Kapitel 4.3.4 erfüllt und es werden beim Testproblem die in den Abschätzungen (4.42) und (4.43) vorgestellten Konvergenzordnungen erwartet.

Diese Konvergenzordnungen werden auch für die DG-HMM gezeigt, deren Implementierung in Kapitel 5.3 diskutiert wird. Der Schwerpunkt liegt dabei, wegen der vorher erwähnten

Analogie zu der FE-HMM, auf den dort nicht vorhandenen Komponenten. Diese sind die in Kapitel 4.3 nicht genauer definierten Multiskalenflüsse über die Kanten, die mit Hilfe von Mikrolösungen berechnet werden sollen, sowie die Gewichts- und Straf-Funktion der Bilinearform  $B_{DG,H}$ . Dieser Teil der Arbeit basiert auf der vom Autor betreuten Masterarbeit von Martin Gontscharow [79]. Mit Hilfe der Definition des Multiskalenflusses wird in Kapitel 5.4 analog zum Mittelwert der Sprung über die Kanten definiert. Damit kann der Fehlerschätzer berechnet und der adaptive Algorithmus vervollständigt werden. Ersteres wird anhand des Testproblems (5.3) validiert. Um die Effizienz des adaptiven Algorithmus zu zeigen, wird das Testproblem (5.3) abschließend so modifiziert, dass eine adaptive Verfeinerung benötigt wird.

## 5.1. Implementierung anhand der FE-HMM-Bilinearform

Die Implementierung der FE-HMM wurde schon in verschiedenen Veröffentlichungen mit unterschiedlicher Software vorgestellt, unter anderem in [116] mit DUNE [36] oder in [15] mit MATLAB. Der größte und für diese Arbeit wichtigste Unterschied zwischen diesen und *deal.II* liegt in der Art wie das Gebiet zerlegt wird. In DUNE und MATLAB erfolgt die Zerlegung in Dreiecke (in 2D) bzw. Tetraeder (in 3D), wogegen dafür in *deal.II* und somit in dieser Arbeit Vierecke (in 2D) bzw. Quader (in 3D) benutzt werden. Diese Tatsache wird einerseits bei der Anzahl der Quadraturpunkte, bzw. bei der Wahl der Quadraturformel und somit bei den zu lösenden Mikroproblemen, andererseits bei der Definitionen des Multiskalenflüssen in Kapitel 5.3, eine relevante Rolle spielen.

Um die Auswirkung der Quadraturformel untersuchen zu können, wird Gleichung (4.32) mit dem Newton-Verfahren [130, Kap. 14.2.7] gelöst. Dafür wird erst  $\partial_u B_{FE}(u_k^H, z^H)$  als die Ableitung von  $u \mapsto B_{FE}(u, z^H)$  aus Gleichung (4.29) bzgl.  $u$  an der Stelle  $u_k^H$  und  $\partial_s a^0(x, u_k^H(x))$  als die Ableitung von  $s \mapsto a^0(x, s)$  an der Stelle  $u_k^H(x)$  definiert. Dabei bezeichnet  $u_k^H$  die aktuelle Newton-Iterierte. Damit wird mit Hilfe der Ketten- und Produktregel

$$\begin{aligned} \partial_u B_{FE}(u_k^H, z^H) [\delta u_{k+1}^H] = \\ \int_{\Omega} \left[ a^0(x, u_k^H(x)) \nabla \delta u_{k+1}^H + \partial_s a^0(x, u_k^H(x)) \delta u_{k+1}^H(x) \nabla u_k^H(x) \right] \cdot \nabla z^H(x) dx \end{aligned}$$

mit dem Newton-Update  $\delta u_{k+1}^H$  berechnet. Mit analogen Umformungen wie in Kapitel 4.3.3 wird aus  $\partial_u B_{FE}(u_k^H, z^H)$  der Ausdruck für  $\partial_u B_{FE,H}(u_k^H; u_k^H, z^H)$ , die Ableitung von

$u \mapsto B_{\text{FE},H}(u; u, z^H)$  aus Gleichung (4.31) bzgl.  $u$  an der Stelle  $u_k^H$ , hergeleitet. Dieser wird als

$$\begin{aligned} \partial_u B_{\text{FE},H}(u_k^H; u_k^H, z^H) [\delta u_{k+1}^H] := & \\ & \sum_{K \in \mathcal{T}_H} \sum_{j=1}^J \frac{\omega_{K,j}}{|K_\delta(x_{K,j})|} \int_{K_\delta(x_{K,j})} \left[ a^\epsilon(x, u_k^H(x_{K,j})) \nabla \delta u_{k+1,K,j}^{h,u_k^H(x_{K,j})}(x) \cdot \nabla z_{K,j}^{h,u_k^H(x_{K,j})}(x) \right. \\ & \left. + \partial_s a^\epsilon(x, u_k^H(x_{K,j})) \delta u_{k+1,K,j}^{h,u_k^H(x_{K,j})}(x) \nabla u_{k,K,j}^{h,u^H(x_{K,j})}(x) \cdot \nabla z_{K,j}^{h,u_k^H(x_{K,j})}(x) \right] dx \end{aligned} \quad (5.6)$$

definiert. Damit kann das Newton-Verfahren für die Lösung von Gleichung (5.4) formuliert werden: Zu  $u_k^H$  finde  $\delta u_{k+1}^H \in \mathcal{V}_{\text{FE}}^p(\Omega, \mathcal{T}_H)$  so, dass

$$\partial_u B_{\text{FE},H}(u_k^H; u_k^H, z^H) [\delta u_{k+1}^H] = -B_{\text{FE},H}(u_k^H; u_k^H, z^H) + F_H(z^H) \quad \text{für alle } z^H \in \mathcal{V}_{\text{FE}}^p(\Omega, \mathcal{T}_H) \quad (5.7)$$

gilt. Dabei wird  $F_H$  in Gleichung (4.29) definiert. Setze  $u_{k+1}^H := u_k^H + \delta u_{k+1}^H$  und  $u^H := u_{k+1}^H$ , falls  $\delta u_{k+1}^H$  ausreichend klein ist.

Wie schon bei der Herleitung der Standard-FEM im Anhang B.1, wird die Lösung  $u^0$  von Gleichung (5.7) als Linearkombination der Basisfunktionen  $\varphi_i^H$ ,  $i = 1, \dots, N$ , von  $\mathcal{V}_{\text{FE}}^p(\Omega, \mathcal{T}_H)$  entwickelt. Die Testfunktion  $z^H \in \mathcal{V}_{\text{FE}}^p(\Omega, \mathcal{T}_H)$  wird als  $\varphi_i^H \in \mathcal{V}_{\text{FE}}^p(\Omega, \mathcal{T}_H)$ ,  $i = 1, \dots, N$ , gewählt. Damit werden die Elemente  $A_{l,m}$ ,  $l, m = 1, \dots, N$ , der System-Matrix  $A \in \mathbb{R}^{N \times N}$  als

$$\begin{aligned} A_{l,m} = & \sum_{K \in \mathcal{T}_H} \sum_{j=1}^J \frac{\omega_{K,j}}{|K_\delta(x_{K,j})|} \int_{K_\delta(x_{K,j})} \left[ a^\epsilon(x, u_k^H(x_{K,j})) \nabla \varphi_{m,K,j}^{h,u_k^H(x_{K,j})}(x) \cdot \nabla \varphi_{l,K,j}^{h,u_k^H(x_{K,j})}(x) \right. \\ & \left. + \partial_s a^\epsilon(x, u_k^H(x_{K,j})) \varphi_{m,K,j}^{h,u_k^H(x_{K,j})}(x) \nabla u_{k,K,j}^{h,u^H(x_{K,j})}(x) \cdot \nabla \varphi_{l,K,j}^{h,u_k^H(x_{K,j})}(x) \right] dx \end{aligned} \quad (5.8)$$

und für  $l = 1, \dots, N$  die der rechten Seite  $F$  als

$$\begin{aligned} F_l = & - \sum_{K \in \mathcal{T}_H} \sum_{j=1}^J \frac{\omega_{K,j}}{|K_\delta(x_{K,j})|} \int_{K_\delta(x_{K,j})} a^\epsilon(x, u_k^H(x_{K,j})) \nabla u_{k,K,j}^{h,u^H(x_{K,j})}(x) \cdot \nabla \varphi_{l,K,j}^{h,u_k^H(x_{K,j})}(x) dx \\ & + \int_{\Omega} f(x) \varphi_l^H(x) dx \end{aligned}$$

berechnet.

Somit wurden die zu implementierenden Terme aufgestellt und der Raum  $\mathcal{V}_{\text{FE}}^p(\Omega, \mathcal{T}_H)$  bzw. daraus folgend die benutzte Quadraturformel können konkretisiert werden. In dieser Arbeit werden sowohl auf der Makro- als auch auf der Mikroskala stückweise lineare Elemente, d.h.  $p = q = 1$ , gewählt. Damit folgt aus der Fehlerabschätzung (4.42) die optimale Verfeinerungsstrategie für das Makro- und Mikro-Gitter, nämlich  $h/\epsilon = H$  für die  $\mathcal{L}^2$ - und  $h/\epsilon = \sqrt{H}$  für die  $\mathcal{H}^1$ -Norm. Aus der Wahl  $p = 1$  folgt nach Anhang B.1 wegen der Zerlegung von  $\Omega$  in Vierecke,

dass eine Quadraturformel benötigt wird, die Polynome, die in jeder Variablen die Ordnung  $\sigma = 2$  haben, exakt integriert. Deshalb wird die Gauß-Quadratur mit zwei Stützstellen pro Raumrichtung gewählt. Daraus folgt, dass für die Anzahl der Quadraturpunkte  $J = 4$  in 2D und  $J = 8$  in 3D gilt.

Mit dieser Wahl wird nun die FE-HMM für das Problem (5.4) nach Gleichung (5.7) mit  $a^\epsilon$  aus Gleichung (5.1) implementiert. Das Makro- und das Mikro-Gitter werden simultan verfeinert, es gilt also  $h/\epsilon = H$ . Außerdem wird  $\delta = \epsilon = 10^{-5}$  für die periodischen Randbedingungen gewählt. Für den Dirichlet-Fall werden verschiedene  $\delta > \epsilon = 10^{-5}$  benutzt, die bei der Vorstellung der Ergebnisse konkretisiert werden. Zur Vereinfachung und weil sich für den 3D-Fall analoge Resultate ergeben, werden in diesem Kapitel nur Ergebnisse für den 2D-Fall präsentiert. Zum 3D-Fall werden lediglich weiterführende Bemerkungen getroffen. Da sowohl das Makro- als auch das Mikroproblem in den betrachteten Fällen wenige (ungefähr  $10^3$ ) Freiheitsgrade hat, werden beide mit einem direkten, auf der LR-Zerlegung basierenden *deal.II*-internen Löser mit SparseDirectUMFPACK [29, 35], gelöst. Da die optimale Konvergenzordnung wegen  $h/\epsilon = H$  nach der Fehlerabschätzung (4.42) für den  $\mathcal{L}^2$ -Fehler erwartbar ist, wird in Abbildung 5.1 dieser für die oben beschriebenen Fälle gezeigt. Für die Fälle mit Dirichlet-Randbedingungen wird  $\delta = \epsilon, 2\epsilon, 10\epsilon$  gewählt. Es ist zu erkennen, dass das Ergebnis in jedem betrachteten Fall den Abschätzungen (4.42) und (4.43) genügt. So wird bei Ersterem die optimale Konvergenzordnung aus (4.42) erreicht, bei Letzterem hängt der Fehler stark von der Wahl von  $\delta$  ab. Da das Minimum des in Gleichung (4.47) im Dirichlet-Fall im Vergleich zum periodischen Fall zusätzlichen Terms  $\delta + \delta/\epsilon$  bei  $\delta = \sqrt{\epsilon}$  angenommen wird, wird der Fehler im Dirichlet-Fall für  $\delta = \sqrt{\epsilon}$  minimal. In Kapitel 7 wird gezeigt, dass der Koeffizient des Batterieproblems (3.1) alle Voraussetzungen aus Kapitel 4.3.4 und aus Kapitel 4.3.1, die für die Gültigkeit der Abschätzung (4.42) notwendig sind, erfüllt. Deshalb werden ab jetzt die Mikroprobleme mit periodischen Randbedingungen gelöst. Der Fall der Dirichlet-Randbedingungen wird in Kapitel 5.2 dazu dienen, Erkenntnisse für die Optimierung der Implementierung zu gewinnen.

Als Nächstes wird die Rechenzeit der FE-HMM für die oben beschriebenen Fälle untersucht. Da sich für die drei untersuchten  $\delta$ -s im Dirichlet-Fall sehr ähnliche Ergebnisse ergeben und hier der Unterschied zwischen den verschiedenen Randbedingungen für die Mikroprobleme hervorgehoben werden soll, werden diese nur für  $\delta = \epsilon$  präsentiert. Alle in diesem und in den späteren Kapiteln diskutierte Simulationen wurden auf dem BwUniCluster 2.0 [46] durchgeführt. Die Tabellen 5.2a und 5.2b zeigen für verschiedene Gitterweiten  $H$  die gesamte Rechenzeit und den Anteil der wichtigsten und zeitaufwändigsten Komponenten der FE-HMM für verschiedene Randbedingungen für die Mikroprobleme. Dabei steht die Abkürzung *Ass.* für Assemblieren und *Mikro.* bzw. *Makro.* für die Mikro- bzw. Makroprobleme. Dabei wird beim Assemblieren des Makroproblems die Aufstellung der Makro-System-Matrix mit Hilfe der Lösungen der Mikroprobleme, aber nicht das Assemblieren und Lösen dieser berücksichtigt. Es kann festgestellt werden, dass für beide Randbedingungen der Großteil der Rechenzeit für das Assemblieren und Lösen der Mikroprobleme benötigt wird, während die Berechnungen auf der Makroskala kaum Zeit kosten. Das entspricht auch den Erwartungen, da das Makroproblem

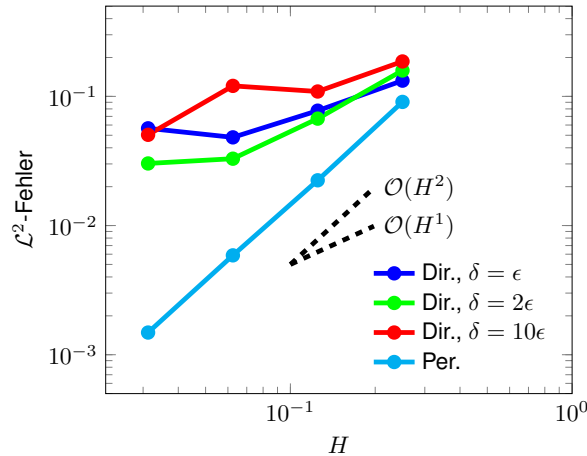


Abbildung 5.1.: Der Fehler  $\|u^0 - u^H\|_{\mathcal{L}^2(\Omega)}$  für die Lösung des Problems (5.4) mit der FE-HMM für verschiedene Randbedingungen für die Mikroprobleme über die Gitterweite  $H$ .

wegen  $h/\epsilon = H$  dieselbe Komplexität wie ein Mikroproblem hat, es aber nur einmal assembliert und gelöst wird. Allerdings lässt sich ein großer Unterschied bei der gesamten Rechenzeit, was hauptsächlich durch die Differenz beim Lösen der Mikroprobleme verursacht wird, feststellen. Die Ursache dafür wird in Kapitel 5.2 untersucht, erläutert und für die Optimierung des periodischen Falls verwendet. Es wird festgestellt, dass es ein Design-Fehler im *deal.II*-Code ist, was durch eine unglückliche Wahl der Datenstruktur verursacht wird.

Bevor genauer untersucht wird, wie der von den Mikroproblemen stammende Anteil der Rechenzeit genau zustande kommt, ist noch eine Bemerkung bzgl. den in den Tabellen 5.2a und 5.2b aufgeführten Komponenten der FE-HMM angebracht. Wie das Makro-, wird auch das Mikro-Gitter, nur einmal, um den Ursprung als Referenz-Mikro-Gitter  $K_\delta^0 := [-\delta/2, \delta/2]^2$ , erzeugt. Um Integrale über  $K_\delta(x_{K,j})$  mit  $K \in \mathcal{T}_H$  und  $x_{K,j} \in K$  zu berechnen, wird eine lineare Transformation verwendet, d.h. das Gitter  $K_\delta^0$  wird um  $x_{K,j}$  verschoben. Damit gilt

$$K_\delta(x_{K,j}) = K_\delta^0 + x_{K,j}.$$

Somit wird vermieden, dass das Mikro-Gitter immer neu erzeugt und gespeichert werden muss. Wegen der geringen Anzahl der Zellen nimmt das Erzeugen beider Gitter kaum Rechenzeit in Anspruch. Aus diesem Grund ist das in den Tabellen 5.2a und 5.2b nicht aufgeführt.

Wie bei anderen FEM-Implementierungen auch, wird in *deal.II* die System-Matrix des zum Problem gehörigen linearen Gleichungssystems (LGS) zellweise berechnet und dann zusammengesetzt. Deshalb wird, um die Rechenzeit für die Mikroprobleme genauer untersuchen zu können, der Beitrag  $A_K$  einer Zelle  $K \in \mathcal{T}_H$  zu dieser Matrix betrachtet. Aus der Zerlegung von  $\Omega \subset \mathbb{R}^2$  in Vierecke folgt, dass es für jede Zelle  $K \in \mathcal{T}_H$  genau vier Makro-Basisfunktionen  $\varphi_i^H$ ,  $i = 1, \dots, 4$ , gibt, die auf diesem einen nichtleeren Träger haben. Somit wird mit der obigen

Tabelle 5.1.: Rechenzeit (in Sekunden und ihre Zusammensetzung (in Prozent) für die Lösung des Problems (5.4) mit der FE-HMM für verschiedene Randbedingungen für die Mikroprobleme.

(a) Periodische Randbedingungen für die Mikroprobleme.

$H$	Zeit (ges.)	Ass. Mikro.	Lösen Mikro.	Ass. Makro.	Lösen Makro.
$2^{-2}$	0.69	11.11	53.02	2.19	0.82
$2^{-3}$	4.21	29.70	64.47	4.95	0.12
$2^{-4}$	227.68	20.13	78.15	1.58	0.00
$2^{-5}$	39350.05	11.12	88.69	0.15	0.00

(b) Dirichlet-Randbedingungen für die Mikroprobleme.

$H$	Zeit (ges.)	Ass. Mikro.	Lösen Mikro.	Ass. Makro.	Lösen Makro.
$2^{-2}$	1.08	6.21	9.85	10.83	0.80
$2^{-3}$	1.43	49.99	32.58	14.07	0.45
$2^{-4}$	23.05	47.50	34.86	16.89	0.06
$2^{-5}$	388.61	40.39	43.93	15.34	0.01

Wahl der Quadraturformel

$$\begin{aligned}
 A_K = & \left( \sum_{j=1}^4 \frac{\omega_{K,j}}{|K_\delta(x_{K,j})|} \int_{K_\delta(x_{K,j})} \left[ a^\epsilon(x, u_k^H(x_{K,j})) \nabla \varphi_{m,K,j}^{h,u_k^H(x_{K,j})}(x) \cdot \nabla \varphi_{l,K,j}^{h,u_k^H(x_{K,j})}(x) \right. \right. \\
 & \left. \left. + \partial_s a^\epsilon(x, u_k^H(x_{K,j})) \varphi_{m,K,j}^{h,u_k^H(x_{K,j})}(x) \nabla u_{l,K,j}^{h,u_k^H(x_{K,j})}(x) \cdot \nabla \varphi_{l,K,j}^{h,u_k^H(x_{K,j})}(x) \right] dx \right)_{l,m=1}^4 \quad (5.9)
 \end{aligned}$$

berechnet. Anhand dieser Formel kann festgestellt werden, dass pro Zelle insgesamt 20 Mikroprobleme gelöst werden müssen. Vier mal vier gehören zu den Makro-Basisfunktionen und die weiteren vier zu der alten Newton-Iterierten. In 3D ergibt sich mit der analogen Überlegung, dass sogar 72 Mikroprobleme gelöst werden müssen. Gleichung (4.26) sieht für jedes, über  $K_\delta(x_{K,j})$  zu lösende Mikroproblem identisch aus. Allerdings zeigt Gleichung (4.28), dass jedes Problem unterschiedlich ist. Daher lassen sich die Mikroprobleme trotz identischer Form nicht zusammenfassen und ihre Anzahl lässt sich ohne weitere Überlegungen nicht verringern. Diese Tatsache zeigt einen Nachteil von *deal.II* im Vergleich zu Software, bei der in 2D das Gebiet in Dreiecke zerlegt und für  $p = q = 1$  eine Quadraturformel mit einem Quadraturpunkt pro Zelle gewählt wird. In diesem Fall müssen pro Zelle nur insgesamt vier Mikroprobleme gelöst werden, drei mit den Makro-Basisfunktionen und eines mit der alten Newton-Iterierten. Für jedes dieser Probleme muss zusätzlich die System-Matrix und die rechte Seite des dazugehörigen LGS aufgestellt werden, was sich im großen Anteil der Rechenzeit für die Assemblierung der Mikroprobleme in Tabelle 5.2a und 5.2b widerspiegelt. Damit lassen sich zwei Stellen für die Optimierung der Implementierung identifizieren. Einerseits

sollte die Anzahl der Mikroprobleme verringert, andererseits ihr Lösen effizienter gestaltet werden.

Ein weiterer Aspekt, der anhand Formel (5.9) festgestellt werden kann, ist, dass die Mikroprobleme sowohl innerhalb der Zellen als auch in verschiedenen Zellen unabhängig voneinander sind. Das deutet eine gute Skalierbarkeit bei Parallelisierung an. Auch das wird, neben den zwei oben erwähnten Aspekten, in Kapitel 5.2 untersucht.

## 5.2. Optimierung der Implementierung der FE-HMM

In Kapitel 5.1 wurden die Anzahl der Mikroprobleme und ihr Lösen als wichtigste Stellen für die Optimierung der Implementierung der FE-HMM in *deal.II* identifiziert. Diese werden in diesem Kapitel adressiert. Dabei wird zunächst mit Hilfe eines Lemmas aus der Literatur, [19, Lemma 2.3], die Anzahl der Mikroprobleme reduziert, dann mit der Änderung des Mikro-Finite-Elemente-Raumes,  $\mathcal{V}^q(K_\delta(x_{K,j}), \mathcal{T}_h)$ , ihr Lösen verbessert. Als Abschluss wird die Skalierbarkeit der Methode bei der Parallelisierung untersucht.

Um das oben erwähnte Lemma verwenden zu können, wird eine Variante des Mikroproblems (4.26) betrachtet. Mit den in Kapitel 2 eingeführten Einheitsvektoren,  $e_i$ ,  $i = 1, \dots, d$ , und den in Kapitel 4.3 um die Makro-Quadraturpunkte,  $x_{K,j} \in K$ , definierten Mikro-Gebieten  $K_\delta(x_{K,j}) \subset K$ , werden die Lösungen  $w_{K,j}^{i,h,s} \in \mathcal{V}^q(K_\delta(x_{K,j}), \mathcal{T}_h)$ ,  $i = 1, \dots, d$ , von

$$\int_{K_\delta(x_{K,j})} a^\epsilon(x, s) \nabla w_{K,j}^{i,h,s}(x) \cdot \nabla z^h(x) \, dx = \int_{K_\delta(x_{K,j})} a^\epsilon(x, s) e_i \cdot \nabla z^h(x) \, dx \quad \text{für alle } z^h \in \mathcal{V}^q(K_\delta(x_{K,j}), \mathcal{T}_h) \quad (5.10)$$

für einen Parameter  $s \in \mathbb{R}$  gesucht. Dann lässt sich nach [19, Kap. 2.2] durch Einsetzen in Gleichung (4.26) unter Ausnutzung der Eigenschaften der Linearisierung von  $w^H$ , genauer mit

$$\nabla w_{\text{lin},K,j}^H(x) = \nabla w^H(x_{K,j}) \quad \text{und} \quad \partial_i w_{\text{lin},K,j}^H(x) = e_i \cdot \nabla w^H(x_{K,j}) \quad \text{für alle } x \in K_\delta(x_{K,j})$$

zeigen, dass die Lösung  $w_{K,j}^{h,s}$  von Gleichung (4.26) als

$$w_{K,j}^{h,s}(x) = w_{\text{lin},K,j}^H(x) + \sum_{i=1}^d w_{K,j}^{i,h,s}(x) \partial_i w_{\text{lin},K,j}^H(x) \quad \text{für alle } x \in K_\delta(x_{K,j}) \quad (5.11)$$

geschrieben werden kann. Damit wird analog zu den Definitionen (4.11) und (4.12) für  $s \in \mathbb{R}$

$$a_{K,j}^0(s) := \int_{K_\delta(x_{K,j})} a^\epsilon(x, s) (Id + J_{w_{K,j}^{h,s}(s)}^T(x, s)) \, dx \quad (5.12)$$



und für  $i, l = 1, \dots, d$

$$(J_{w_{K,j}^{h,s}}^T(x, s))_{i,l} := \partial_l w_{K,j}^{i,h,s}(x) \quad (5.13)$$

definiert. Falls die Tensoren  $a^\epsilon$  und  $a^0$  die Bedingungen  $a^\epsilon \in \mathcal{M}(\Omega, \theta, \Theta)$  und  $a^0 \in C^0(\bar{\Omega} \times \mathbb{R})$  aus Kapitel 4.3.4 erfüllen, gilt damit nach [19, Lemma 2.3] für alle  $w^H, \tilde{w}^H \in \mathcal{V}_{\text{FE}}^p(\Omega, \mathcal{T}_H)$ , für alle Mikro-Gebiete  $K_\delta(x_{K,j}) \in K$  um die Quadraturpunkte  $x_{K,j} \in K$ ,  $j = 1, \dots, J$ , und für alle  $s \in \mathbb{R}$

$$\frac{1}{|K_\delta(x_{K,j})|} \int_{K_\delta(x_{K,j})} a^\epsilon(x, s) \nabla \tilde{w}_{K,j}^{h,s}(x) \cdot \nabla w_{K,j}^{h,s}(x) dx = a_{K,j}^0(s) \nabla \tilde{w}^H(x_{K,j}) \cdot \nabla w^H(x_{K,j}). \quad (5.14)$$

Dabei sind  $\tilde{w}_{K,j}^{h,s}$  und  $w_{K,j}^{h,s}$  die zu  $\tilde{w}^H$  und  $w^H$  gehörenden Lösungen des Mikroproblems (4.26). Das Lemma lässt sich durch Einsetzen von Gleichung (5.11) in die linke Seite von Gleichung (5.14) beweisen. Dabei wird die Definition von  $a_{K,j}^0$ , Gleichung (5.12) und die Tatsache, dass für den Gradienten der Linearisierung von  $w^H$  wegen ihrer Definition (4.27)  $\nabla w_{\text{lin},K,j} \equiv w^H(x_{K,j})$  gilt, ausgenutzt. Mit Hilfe dieses Lemmas kann die Bilinearform (4.31) als

$$B_{\text{FE},H}(v^H; \tilde{v}^H, z^H) = \sum_{K \in \mathcal{T}_H} \sum_{j=1}^J \omega_{K,j} a_{K,j}^0(v^H(x_{K,j})) \nabla \tilde{v}^H(x_{K,j}) \cdot \nabla z^H(x_{K,j}) \quad (5.15)$$

geschrieben werden. Das bedeutet, dass diese als Anwendung der Standard-FEM mit Gitterweite  $H$  und mit dem modifizierten Tensor  $a_{K,j}^0$  interpretiert werden kann. Allerdings muss dieser nicht im Voraus punktweise bestimmt werden, wie es bei der analytischen Homogenisierung, wenn möglich, der Fall ist. Er kann auf der jeweiligen Zelle in den Quadraturpunkten während der Assemblierung des Beitrages  $A_K$ , d.h. „on the fly“, berechnet werden. Das ist ein großer Vorteil der FE- und auch der DG-HMM. Somit kann die für das Newton-Verfahren (5.7) benötigte Ableitung  $\partial_u B_{\text{FE},H}(u_k^H; u_k^H, z^H)$  aus Gleichung (5.6) als

$$\begin{aligned} \partial_u B_{\text{FE},H}(u_k^H; u_k^H, z^H) [\delta u_{k+1}^H] &= \sum_{K \in \mathcal{T}_H} \sum_{j=1}^J \omega_{K,j} \left[ a_{K,j}^0(u_k^H(x_{K,j})) \nabla \delta u_{k+1}^H(x_{K,j}) \cdot \nabla z^H(x_{K,j}) \right. \\ &\quad \left. + \partial_s a_{K,j}^0(u_k^H(x_{K,j})) \delta u_{k+1}^H \nabla u_k^H(x_{K,j}) \cdot \nabla z^H(x_{K,j}) \right] \end{aligned} \quad (5.16)$$

geschrieben werden. Dabei bezeichnet  $\partial_s a_{K,j}^0(u_k^H(x))$  die Ableitung von  $s \mapsto a_{K,j}^0(s)$  an der Stelle  $u_k^H(x)$ . Da  $a_{K,j}^0(u_k^H(x))$  im Allgemeinen nicht wie  $a^\epsilon(x, s)$  explizit bekannt ist, kann  $\partial_s a_{K,j}^0(u_k^H(x))$  nicht wie  $\partial_s a^\epsilon(x, s)$  explizit berechnet werden kann. Deshalb wird sie mit Hilfe eines Differenzenquotienten als

$$\partial_s a_{K,j}^0(s) \approx \frac{a_{K,j}^0(s + \tilde{\epsilon}) - a_{K,j}^0(s)}{\tilde{\epsilon}}$$

approximiert. Dabei ist  $\tilde{\varepsilon} > 0$  und wird bei der Implementierung in der Größenordnung der Quadratwurzel der Maschinengenauigkeit gewählt, um eine bestmögliche Approximation der Ableitung zu erhalten. Mit diesen Umformulierungen wird der Beitrag einer Zelle  $K \in \mathcal{T}_H$  zu der System-Matrix aus Gleichung (5.9) als

$$A_K = \left( \sum_{j=1}^4 \omega_{K,j} \left[ a_{K,j}^0(u_k^H(x_{K,j})) \nabla \varphi_m^H(x) \cdot \nabla \varphi_l^H(x) + \partial_s a_{K,j}^0(u_k^H(x_{K,j})) \varphi_m^H(x) \nabla u_{k+1}^H(x) \cdot \nabla \varphi_l^H(x) \right] dx \right)_{l,m=1}^4 \quad (5.17)$$

geschrieben. Aus der Definition von  $a_{K,j}^0$  in Gleichung (5.12) folgt, dass für dessen Berechnung das Lösen von  $d$  Mikroproblemen nötig ist. Um daraus  $\partial_s a_{K,j}^0$  zu erhalten, wird nochmals die gleiche Anzahl an Mikrolösungen benötigt. Mit denen wird  $a_{K,j}^0$  an der Stelle  $(x, s + \tilde{\varepsilon})$  berechnet. Wird diese Aussage mit Formel (5.17) kombiniert, folgt, dass pro Zelle in 2D insgesamt 16 Mikroprobleme, je vier pro Quadraturpunkt und davon je zwei um  $a_{K,j}^0$  bzw.  $\partial_s a_{K,j}^0$  zu berechnen, gelöst werden müssen. Auf den ersten Blick scheint das keine große Veränderung im Vergleich zu der Implementierung in Kapitel 5.1 mit den 20 Problemen pro Zelle zu sein, jedoch gibt es zwei wichtige Aspekte die dabei zu beachten sind. Erstens ergibt sich in 3D für diese Anzahl der Wert 48, was im Vergleich zu 72 in Kapitel 5.1 eine größere, genauer eine Reduzierung um ein Drittel bedeutet. Zweitens müssen in diesem Fall keine Mikroprobleme mit der Makrolösung aus dem alten Newton-Schritt berechnet werden. Das wird, wie wie später in diesem Kapitel gezeigt wird, beim Lösen dieser eine wichtige Rolle spielen wird.

Bei die in dieser Arbeit vorgestellten Anwendung der FE-HMM wird nur auf der Makroskala ein nichtlineares Problem mit dem Newton-Verfahren nach Gleichung (5.7) gelöst. Auf der Mikroskala sind wegen der Quasilinearität des Problems möglichen Linearisierung der Mikroprobleme lineare Probleme der Form (5.10) ausreichend. Falls auf beiden Skalen nichtlineare Probleme gelöst werden müssen, kann die sehr ähnlich aufgebaute FE<sup>2</sup>-Methode verwendet werden. Die algorithmische Umsetzung dieser für lineare elastische und inelastische Probleme wurde in [113] vorgestellt. Für die dort gezeigten Ergebnisse wurde die Methode in der parallelen Finite-Elemente Software M++ [142] implementiert.

Eine weitere Möglichkeit zur Reduzierung der Rechenzeit wird bei der genaueren Betrachtung der linken Seiten der Mikroprobleme (5.10), die für die Berechnung von  $A_K$  in Gleichung (5.17) benötigten werden, ersichtlich. Diese sind unabhängig von den Makro-Basisfunktionen und hängen nur vom Parameter  $s = u_k^H(x_{K,j})$  bzw.  $s = u_k^H(x_{K,j}) + \tilde{\varepsilon}$ ,  $j = 1, \dots, 4$ , ab. Deshalb ist es ausreichend, die System-Matrix pro Quadraturpunkt nur je einmal mit diesen zu assemblieren. Dieses Vorgehen reduziert die benötigte Zeit für das Assemblieren der linken Seiten der Mikroprobleme auf die Hälfte.

Bis jetzt konnte die Anzahl der zu lösenden Mikroprobleme und die Zeit für das Assemblieren der dazugehörigen Matrizen reduziert werden. Desweiteren wird untersucht, warum das

Lösen der Mikroprobleme bei der Anwendung von Dirichlet-Randbedingungen im Vergleich zum periodischen Fall deutlich weniger Zeit beansprucht. Dazu wird die zum Problem gehörige, in *deal.II* benutzte, *Besetzungsstruktur* (*sparsity pattern*) angeschaut. Diese hat dieselbe Dimension wie die dazugehörige System-Matrix und stellt dar, welche Einträge nicht-null Werte annehmen können. Sie wird in Abbildung 5.2 erst für die Mikro-Gitterweiten  $h/\epsilon = 2^{-3}$  und  $h/\epsilon = 2^{-4}$  für Mikroprobleme mit Dirichlet-Randbedingungen gezeigt. Aus den Werten von  $h/\epsilon$  folgt, dass die dazugehörigen Mikro-Gitter 8 bzw. 16 Zellen pro Dimension besitzen und die System-Matrizen somit  $81 \times 81$ , bzw.  $289 \times 289$  Matrizen sind. Anhand dieser und nicht anhand des tatsächlichen nicht-null Musters löst der direkte Löser in *deal.II* das Problem. In Abbildung 5.2 ist zu erkennen, dass beide Besetzungsstrukturen zu einer dünn besetzten Matrix und damit zu den kurzen Rechenzeiten für das Lösen führen, die in Tabelle 5.2b gezeigt werden.

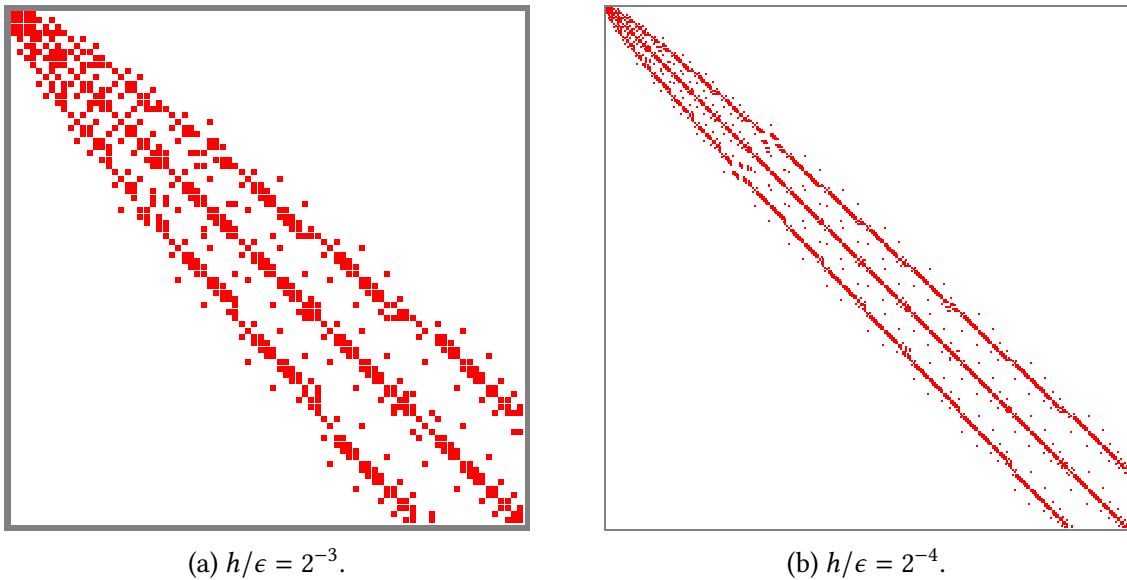


Abbildung 5.2.: Besetzungsstruktur der Mikroprobleme mit Dirichlet-Randbedingungen für verschiedene Mikro-Verfeinerungen  $h/\epsilon$  bei der Lösung des Problems (5.4) mit der FE-HMM.

Dagegen wird bei Mikroproblemen mit periodischen Randbedingungen eine fast komplett volle Besetzungsstruktur erzeugt. Dies zeigt Abbildung 5.3 für dieselben Mikro-Verfeinerungen und somit Matrix-Dimensionen wie in dem in Abbildung 5.2 dargestellten Dirichlet-Fall.

Diese fast komplett volle Besetzungsstruktur führt mit dem direkten Löser zu den sehr langen Lösungszeiten, die in Tabelle 5.2a dargestellt wurden. Der Grund für die nahezu volle Besetzungsstruktur ist eine Folge der periodischen Randbedingungen, nämlich die Bedingung, dass die Lösung  $\tilde{w}_{K,j}^{h,s}$  von Gleichung (4.28) im Raum  $\mathcal{V}(K_\delta(x_{K,j}), \mathcal{T}_h)$  liegen soll. Damit wird nach der Definition (4.25) auch  $\tilde{w}_{K,j}^{h,s} \in \tilde{\mathcal{H}}_{\text{per}}^1(K_\delta(x_{K,j}))$  gefordert. Für Elemente dieses Raums

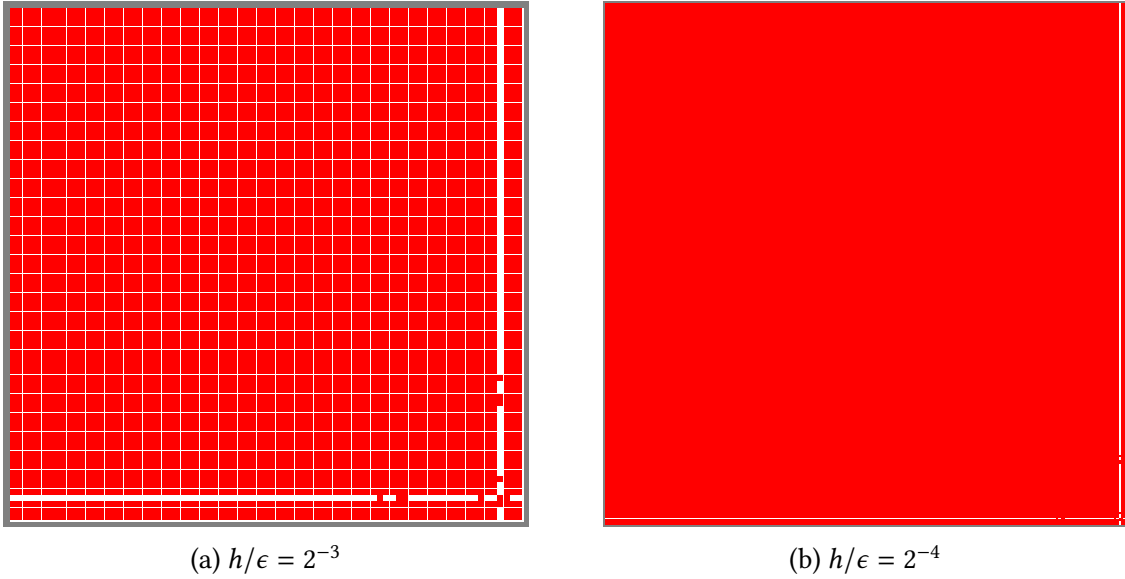


Abbildung 5.3.: Besetzungsstruktur der Mikroprobleme mit periodischen Randbedingungen für  $i = 3$  für verschiedene Mikro-Verfeinerungen  $h/\epsilon$  bei der Lösung des Problems (5.4) mit der FE-HMM.

gilt, dass ihr Mittelwert über das Gebiet null ist, also

$$\frac{1}{|K_\delta(x_{K,j})|} \int_{K_\delta(x_{K,j})} \tilde{w}_{K,j}^{h,s}(x) \, dx = 0. \quad (5.18)$$

Diese Bedingung wird für den  $\tilde{w}_{K,j}^{h,s}$  darstellenden diskreten Vektor  $\overline{\tilde{w}}_{K,j}^{h,s} := (\tilde{w}_{K,j,1}^{h,s}, \dots, \tilde{w}_{K,j,N_{\text{mic}}}^{h,s})$ , wie sie in Anhang B.1 beschrieben und definiert wird, als

$$\sum_{i=1}^{N_{\text{mic}}} \tilde{w}_{K,j,i}^{h,s} = 0$$

umgesetzt. Dabei bezeichnet  $N_{\text{mic}}$  die Anzahl der Mikro-Freiheitsgrade. In *deal.II* wird diese Bedingung als

$$\sum_{i=1, i \neq l}^{N_{\text{mic}}} \tilde{w}_{K,j,i}^{h,s} = -\tilde{w}_{K,j,l}^{h,s} \quad (5.19)$$

gespeichert. Das bedeutet, dass ein Freiheitsgrad mit Hilfe aller anderen ausgedrückt wird. Dieser Zusammenhang wird beim Erzeugen der Besetzungsstruktur benutzt. Dabei werden, im Gegensatz zu LGS, nicht gewisse Zeilen bzw. Spalten daraus entfernt, sondern Stellen von möglichen nicht-null Einträgen hinzugefügt, die später benötigt werden, um den durch

die anderen ausgedrückten Freiheitsgrad, in Gleichung (5.19) der  $l$ -te Freiheitsgrad, zurückgewinnen zu können. Als Folge dessen entsteht hier wegen einem sogenannten *fill-in* das in Abbildung 5.3 gezeigte Muster. Dieses ist fast unabhängig von der Wahl des *constrained*, also des eingeschränkten, Freiheitsgrades. Nur die Position der fast leeren Zeile ändert sich mit  $l$ , die Tatsache, dass die Besetzungsstruktur fast komplett voll ist, nicht. Das liegt an der Implementierung der entsprechenden *deal.II*-internen Funktionen und ist ein Designfehler im Code der Bibliothek, welcher durch eine unglückliche Wahl der Datenstruktur verursacht wird. Das ist ein Nachteil der Bibliothek gegenüber z.B. MATLAB, wo mit der geschickten Wahl von  $i = N_{\text{mic}}$  ein komplettes *fill-in* vermieden werden kann.

Das Ziel ist es deshalb, die Besetzungsstruktur so zu gestalten, dass sie weniger Einträge hat und ihre Struktur in etwa der Bandmatrix ist. Dazu wird Gleichung (5.16) genauer betrachtet. Bei dieser müssen, im Gegensatz zur Gleichung (5.6), keine Mikroprobleme zu der Makrolösung aus dem alten Newton-Schritt berechnet werden. Das hat zur Folge, dass für die Berechnung von  $A_K$ , also des Beitrags einer Zelle  $K \in \mathcal{T}_H$  zur System-Matrix  $A$ , in Gleichung (5.17) nur noch Gradienten von Mikrolösungen benötigt werden. Deshalb können zu diesen, ohne  $A_K$  zu ändern, Konstanten addiert werden. Das wird ausgenutzt, indem Bedingung (5.18), die nur für die Eindeutigkeit der Lösung in  $\tilde{\mathcal{H}}_{\text{per}}^1(K_\delta(x_{K,j}))$  sorgt, geändert wird. So wird der modifizierte Mikro-Finite-Elemente-Raum als

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{V}}(K_\delta(x_{K,j}), \mathcal{T}_h) := \\ \{z^h \in \mathcal{H}_{\text{per}}^1(K_\delta(x_{K,j})) \mid z^h(x_{K,j}) = 0, z^h|_T \in \mathcal{R}^q(T) \text{ für alle } T \in \mathcal{T}_h\} \end{aligned} \quad (5.20)$$

definiert. Diese Änderung ist zulässig, da wegen  $z^h|_T \in \mathcal{R}^q(T)$  für alle  $T \in \mathcal{T}_h$ , die Punktauswertung  $z^h(x_{K,j})$  definiert ist. In diesem Raum wird nun das Mikroproblem (4.26) gelöst. Die Bedingung  $z^h(x_{K,j}) = 0$  garantiert, wie vorher die Mittelwert-Bedingung, die eindeutige Lösbarkeit des Problems. Da sich die Lösungen von dem Mikroproblem in  $\tilde{\mathcal{V}}(K_\delta(x_{K,j}), \mathcal{T}_h)$  und in  $\mathcal{V}(K_\delta(x_{K,j}), \mathcal{T}_h)$  nur um eine additive Konstante voneinander unterscheiden, besitzen sie denselben Gradienten. Deshalb wird  $a_{K,j}^0$  und somit die Lösung von (5.4) nicht durch diese Änderung des Mikro-Finite-Elemente-Raumes beeinflusst. Somit wird ab jetzt dafür  $\tilde{\mathcal{V}}(K_\delta(x_{K,j}), \mathcal{T}_h)$  benutzt. Die für das Mikroproblem (4.26) in diesem Raum resultierende Besetzungsstruktur für dieselben Mikro-Verfeinerungen wie bei Abbildung 5.2 und 5.3 werden in Abbildung 5.4 gezeigt. Sie haben fast dieselbe Struktur wie die in Abbildung 5.2 mit den Dirichlet-Randbedingungen für die Mikroprobleme. Das trägt zu einem deutlich schnelleren Lösen der Mikroprobleme bei, wie später in diesem Kapitel gezeigt wird.

Da nun die Besetzungsstruktur der Mikroprobleme optimiert wurde, kann jetzt das Lösen der auftretenden LGS verbessert werden. Bisher wurde dafür, wie es in Kapitel 5.1 beschrieben wurde, ein direkter Löser verwendet, da dieser laut [29] für Probleme mit Freiheitsgraden in der Größenordnung von  $10^5 - 10^6$  die bessere Wahl ist. Das trifft für die hier auftretenden Mikroprobleme wegen der Wahl von  $h/\epsilon$  im Bereich  $2^2$  bis  $2^7$  zu. Möglichkeiten für die Verbesserung könnten z.B. das in [49, Kap. 5] ausführlich diskutierte Matrix-freie Lösen der Probleme oder die Speicherung der LR-Zerlegung der System-Matrix von Gleichung (5.10)

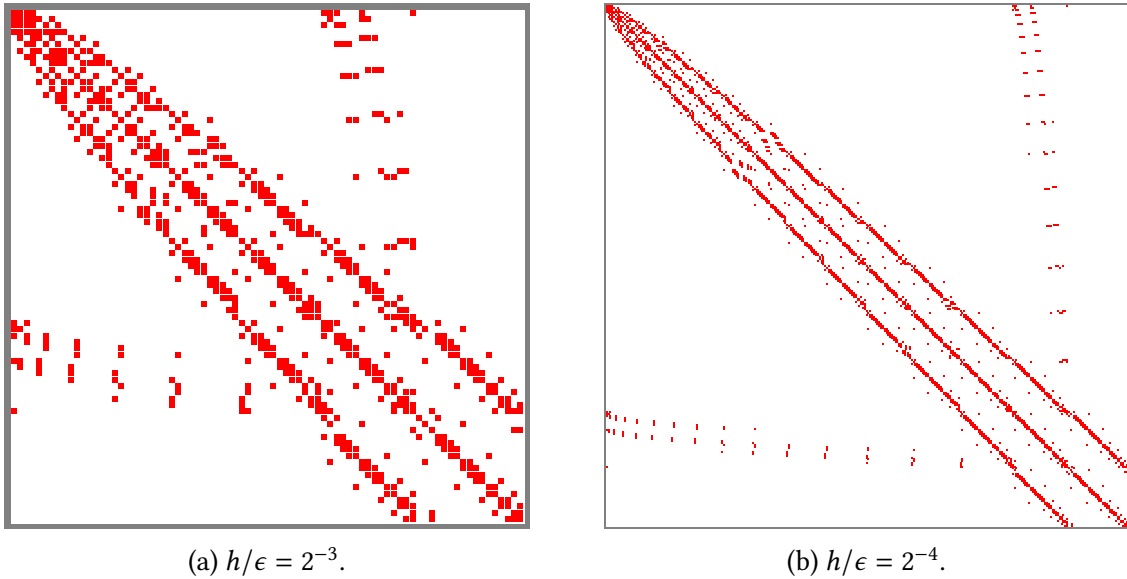


Abbildung 5.4.: Optimierte Besetzungsstruktur der Mikroprobleme mit periodischen Randbedingungen für  $i = 3$  für verschiedene Mikro-Verfeinerungen  $h/\epsilon$  bei der Lösung des Problems (5.4) mit der FE-HMM.

sein. Die Implementierung von dem Ersteren in *deal.II* wird in Tutorial-Step-66 von der *deal.II*-Dokumentation [61] beschrieben. Das Matrix-freie Lösen ist aber hauptsächlich für zeitabhängige oder nichtlineare Probleme geeignet, was für die Mikroprobleme nicht zutrifft. Die System-Matrix von Gleichung (5.10) ist von  $a^\epsilon(x, u^\epsilon(x_{K,j}))$  abhängig und somit für jeden Quadraturpunkt anders. Deshalb und da die LR-Zerlegung sich in *deal.II* nicht direkt speichern lässt, ist die zweite Möglichkeit auch nicht realisierbar.

Wegen der speziellen Struktur von Gleichung (5.10) bietet sich hier allerdings eine andere Möglichkeit an. Anhand der Struktur kann festgestellt werden, dass die Mikroprobleme, die zu demselben Einheitsvektor  $e_i$  auf verschiedenen Zellen gehören, sich wegen der Periodizität von  $a^\epsilon$  und wegen der Wahl  $H = k\epsilon$  mit  $k \in \mathbb{N}$  nur im zweiten Argument von  $a^\epsilon$  unterscheiden. Wegen der Lipschitz-Stetigkeit von  $a^\epsilon$  im zweiten Argument sind ihre Lösungen ähnlich. Deshalb wird für das Lösen der Mikroprobleme statt eines direkten Löser das Verfahren der konjugierten Gradienten (CG-Verfahren) verwendet. Dabei wird für den dazu benötigten Startvektor auf der ersten Zelle der Nullvektor und auf allen anderen die Lösung auf der vorherigen Zelle zum selben Einheitsvektor  $e_i$ , benutzt. Abgesehen von der ersten Zelle führt diese Wahl zu einer geringeren Anzahl an CG-Schritten beim Lösen der einzelnen Mikroprobleme und damit zu einer Reduzierung der Rechenzeit. Damit ist ein weiteres Ziel erreicht. Mit denselben Argumenten lässt sich begründen, dass für alle Mikroprobleme ein einziger Vorkonditionier, der Jacobi-Vorkonditionierer [129, Kap. 10.2], benutzt wird. Dieser wird auf der ersten Zelle nur einmal berechnet und dann für alle Zellen verwendet.

Es ist wichtig zu erwähnen, dass hier nur die wichtigsten und für die mathematische Betrachtung interessantesten Implementierungs- und Optimierungsschritte vorgestellt wurden. Tabelle 5.3 und Abbildung 5.5 stellen allerdings die Rechenzeit und den Fehler der optimierten Methode dar, wobei auch andere Schritte ausgehend von der Implementierung in Kapitel 5.1 durchgeführt wurden. Dazu gehören unter anderem eine bessere Speicherverwaltung und eine effizientere Berechnung des LGS für die Mikroprobleme. Die optimierte Methode wird auch in den späteren Kapiteln verwendet. In Vergleich zu der in Tabelle 5.2a dargestellten Rechenzeit wird diese für die Makro- und Mikro-Gitterweite  $H = h/\epsilon = 2^{-4}$  um mehr als eine und für  $H = h/\epsilon = 2^{-5}$  um zwei Größenordnungen reduziert. Diese Tatsache wird bei der Anwendung auf das zeitabhängige Batterieproblem (3.1) eine entscheidende Rolle spielen. In Abbildung 5.5 ist zu sehen, wie für die simultane Verfeinerung des Makro- und Mikro-Gitters die gewünschte und erwartete Konvergenzordnung in der  $\mathcal{L}^2$ -Norm, wie auch in Abbildung 5.1, erreicht wird. In Kapitel 6.1.2 wird für das dort behandelte Problem, welche eine Erweiterung von Problem (5.3) ist, gezeigt, dass um die optimale Ordnung zu erreichen die aus der Fehlerabschätzung (4.42) hergeleitete simultane Verfeinerung tatsächlich nötig ist.

Tabelle 5.3.: Rechenzeit (in Sekunden und ihre Zusammensetzung (in Prozent für die Lösung des Problems (5.4) mit der optimierten Implementierung der FE-HMM mit periodischen Randbedingungen für die Mikroprobleme.

$H$	Zeit (ges.)	Ass. Mikro	Lösen Mikro	Ass. Makro	Lösen Makro
$2^{-2}$	0.07	27.43	25.90	15.12	6.24
$2^{-3}$	0.43	44.45	17.20	27.94	1.06
$2^{-4}$	5.91	48.56	15.44	33.62	0.14
$2^{-5}$	93.47	44.30	20.01	34.55	0.04

Als Abschluss dieses Kapitels wird die Skalierbarkeit der FE-HMM bezüglich Parallelisierung gezeigt. Da die Mikroprobleme (5.10) auf verschiedenen Zellen unabhängig voneinander sind, bietet sich eine Parallelisierung an und lässt gute Ergebnisse erwarten. Da das Makroproblem nur  $\sim 10^4 - 10^5$  Zellen hat, ist eine Aufteilung des Makro-Gitters unter den Prozessoren nicht zielführend, weil es zu langen Kommunikationszeiten zwischen diesen führen würde. Deshalb wird hier die *shared memory* Parallelisierung gewählt. Dabei wird das Gitter von jedem Prozessor komplett gespeichert und nur die Berechnungen werden unter diesen aufgeteilt. Abbildung 5.6 zeigt die Rechenzeiten der optimierten Implementierung für  $H = h/\epsilon = 2^{-6}$ , die auf  $N = 1, 2, 4, \dots, 32$  Prozessoren ausgeführt wurde. Dabei wurde das Assemblieren und das Lösen des Makroproblems parallelisiert, aber nicht das Erzeugen des Makro-Gitters und die graphische Ausgabe. Der Grund dafür ist, dass Letztere, wie es Tabelle 5.3 zeigt, wegen der geringen Anzahl an Zellen ( $\sim 10^4 - 10^5$ ) kaum Rechenzeit in Anspruch nehmen und sie sich somit nicht effektiv parallelisieren lassen. Die graphische Ausgabe wurde in den Rechenzeiten auch nicht berücksichtigt, da sie nicht unmittelbar zum Lösen des Problems gehört. Wie zu sehen ist, sorgt die Parallelisierung für die zu erwartende Abnahme der Rechenzeit. Das bedeutet, dass bei einer Verdopplung der Anzahl der Prozessoren die Rechenzeit fast halbiert

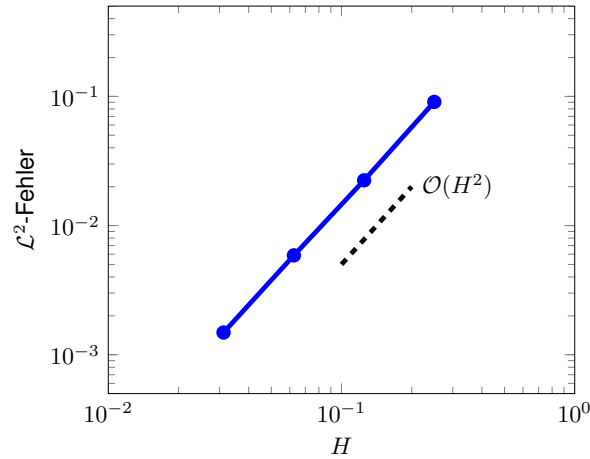


Abbildung 5.5.: Der Fehler  $\|u^0 - u^H\|_{\mathcal{L}^2(\Omega)}$  für die Lösung des Problems (5.4) mit der optimierten Implementierung der FE-HMM bei simultaner Verfeinerung des Makro- und Mikro-Gitters und mit periodischen Randbedingungen für die Mikroprobleme.

wird. Das liegt daran, dass die Komponenten auf der Makroskala wegen der geringen Anzahl an Zellen, bzw. Freiheitsgraden sich nicht perfekt parallelisieren lassen. Ein ähnliches Ergebnis liefert die Parallelisierung der Standard-FEM, wie es vom Autor in [136, Abbildung 8a)] gezeigt wurde. Damit wurde die in Kapitel 5.1 vorgestellte Implementierung soweit wie möglich optimiert und somit die Rechenzeit deutlich reduziert.

### 5.3. DG-HMM

In diesem Kapitel wird der in Kapitel 4.3.3 in Gleichung (4.34) auftretende und dort nicht diskutierte gewichtete Mittelwert des Multiskalenflusses über eine Kante  $e$ ,  $\{\Pi \zeta_{\bar{v}^H}^{h,v^H}\}_e^e$ , definiert. Ebenfalls wird seine Implementierung vorgestellt. Dabei wird auch auf die Gewichts- und Straf-Funktion eingegangen. Der hergeleitete Ausdruck wird dann in Kapitel 5.4 für den Sprung über die Kanten im Fehlerschätzer (4.49) verwendet. Damit die Berechnung mit kaum zusätzlichen Rechenaufwand verbunden ist, sollen dafür nur die zur Verfügung stehenden Mikrolösungen benutzt werden. Wie das für lineare Probleme funktioniert, wurde für eine Zerlegung des Gebiets  $\Omega$  in Dreiecke in [3] und in [12] diskutiert und im Falle von Vierecken in der vom Autor betreuten Masterarbeit von Martin Gontscharow [79, Kap. 4] behandelt. Die folgende Diskussion basiert auf den Ideen beider Arbeiten und erweitert sie auf nichtlineare Probleme.

Wie bei der FE-HMM in Kapitel 5.1, wird auch für die DG-HMM  $p = q = 1$  gewählt. Das bedeutet, dass die Lösung des Makroproblems im Raum  $\mathcal{V}_{\text{DG}}^1(\Omega, \mathcal{T}_H)$  und die der Mikropro-



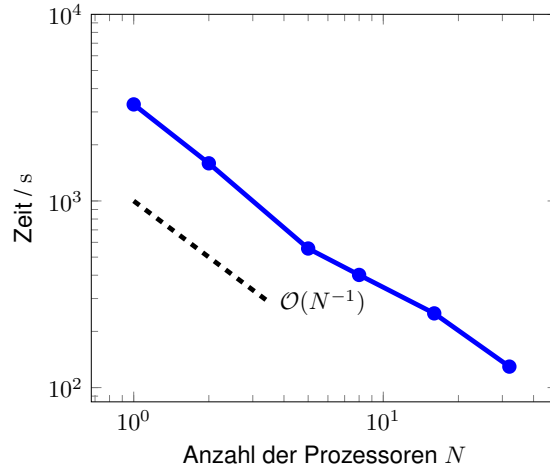


Abbildung 5.6.: Die Rechenzeit der optimierten Implementierung des Problems (5.4) für  $H = h/\epsilon = 2^{-6}$  und für  $N = 1, 2, 4, \dots, 32$  Prozessoren.

bleme wieder in  $\tilde{\mathcal{V}}(K_\delta(x_{K,j}), \mathcal{T}_h)$ , welcher in Gleichung (5.20) definiert wurde, gesucht wird. Daraus folgt nach Anhang B.3 analog zu der FE-HMM, dass sowohl auf der Makro- als auch auf der Mikroskala wieder die Gauß-Quadratur mit zwei Stützstellen pro Raumrichtung gewählt wird, es also in 2D  $J = 4$  Quadraturpunkte pro Zelle gibt. Diese Tatsache ist der Grund dafür, warum die in [3] und in [12] gegebene Definition von  $\{\Pi \zeta_{\tilde{v}^H}^{h,v^H}\}_\gamma^e$  hier nicht anwendbar ist. Dort kann wegen der Zerlegung in Dreiecke eine Quadraturformel mit nur einem Quadraturpunkt pro Zelle gewählt werden. Somit wird dort der Multiskalenfluss über eine innere Kante  $e = K^+ \cap K^-$  konstant als

$$\{\Pi \zeta_{\tilde{v}^H}^{h,v^H}\}_\gamma^e := \frac{1}{2} \left( \frac{1}{|K_\delta^+(x_{K^+})|} \int_{K_\delta^+(x_{K^+})} a^\epsilon(x, v^H(x_{K^+})) \nabla \tilde{v}_{K^+}^{h,v^H(x_{K^+})}(x) dx \right. \\ \left. + \frac{1}{|K_\delta^-(x_{K^-})|} \int_{K_\delta^-(x_{K^-})} a^\epsilon(x, v^H(x_{K^-})) \nabla \tilde{v}_{K^-}^{h,v^H(x_{K^-})}(x) dx \right)$$

mit  $\gamma \equiv \frac{1}{2}$  definiert. Dabei ist  $K_\delta^+(x_{K^+})$  bzw.  $K_\delta^-(x_{K^-})$  das einzige Mikro-Gebiet in  $K^+$  bzw.  $K^-$  und  $\tilde{v}_{K^+}^{h,v^H(x_{K^+})}$  bzw.  $\tilde{v}_{K^-}^{h,v^H(x_{K^-})}$  die Mikrolösung auf diesem zu  $\tilde{v}^H$  mit Parameter  $s = v^H(x_{K^+})$  bzw.  $s = v^H(x_{K^-})$ . Hier gibt es allerdings nach der Begründung in Kapitel 5.1 auf jeder Zelle  $J = 4$  Quadraturpunkte und somit genauso viele Mikro-Gebiete bzw. zu einer gegebenen Makrofunktion gehörige Mikrolösungen. Damit wäre hier obige Definition nicht eindeutig und kann daher nicht angewendet werden.

Den Ansatz für die Lösung dieses Problems liefert die Betrachtung des Terms, der mit dem Multiskalenfluss ersetzt werden soll. Der numerische Fluss

$$a^0(\cdot, v^H) \nabla \tilde{v}^H$$

ist auf jeder Zelle eine bilineare Funktion, falls die Funktion  $v^H$  zellweise konstant ist. Der Grund dafür folgt aus den in Kapitel 4.3.3 für die Existenz der Lösung von Gleichung (4.35) gestellten Bedingungen. Dies ist die Voraussetzung, dass  $a^\varepsilon \in Y$ -periodisch und über  $K \in \mathcal{T}_H$  in der Makrovariablen konstant ist. Daraus folgt nach [3, Kap. 5], dass auch  $a^0$  über  $K \in \mathcal{T}_H$  konstant ist. Somit ist das Produkt von diesem konstanten Koeffizienten mit dem Gradienten von  $\tilde{v}^H|_K \in \mathcal{R}^1(K)$  auf  $K \in \mathcal{T}_H$  eine bilineare Funktion. Deshalb ist die Idee auch den Multiskalenfluss  $\Pi \zeta_{\tilde{v}^H, K}^{h, v^H}$  auf einer Zelle  $K \in \mathcal{T}_H$ , als eine bilineare Funktion mit Hilfe von Mikrolösungen zu definieren. Die Grundlage dafür bietet ein Lemma aus [121, Kap. 3.6], wonach es für die in  $\mathbb{R}^2$  rechteckig angeordnete Stützstellen

$$P_1 = (p_{1,1}, p_{2,1}), P_2 = (p_{1,1}, p_{2,2}), P_3 = (p_{1,2}, p_{2,1}), P_4 = (p_{1,2}, p_{2,2})$$

mit  $p_{1,1}, p_{2,1}, p_{1,2}, p_{2,2} \in \mathbb{R}$  sowie mit zugehörigen Stützwerten  $f_1, f_2, f_3, f_4 \in \mathbb{R}$  eine eindeutige bilineare Interpolation,  $\Pi f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ , mit

$$\Pi f(P_j) = f_j \quad \text{für } j = 1, \dots, 4$$

existiert. Diese wird für  $x = (x_1, x_2) \in \mathbb{R}^2$  als

$$\Pi f(x) := c_1 + c_2 x_1 + c_3 x_2 + c_4 x_1 x_2 \quad (5.21)$$

mit den Koeffizienten

$$\begin{aligned} c_1 &:= \frac{1}{(p_{1,2} - p_{1,1})(p_{2,2} - p_{2,1})} \begin{pmatrix} p_{1,2} p_{2,2} f_1 & -p_{1,2} p_{2,1} f_2 & -p_{1,1} p_{2,2} f_3 & +p_{1,1} p_{2,1} f_4 \end{pmatrix}, \\ c_2 &:= \frac{1}{(p_{1,2} - p_{1,1})(p_{2,2} - p_{2,1})} \begin{pmatrix} -p_{2,2} f_1 & +p_{2,1} f_2 & +p_{2,2} f_3 & -p_{2,1} f_4 \end{pmatrix}, \\ c_3 &:= \frac{1}{(p_{1,2} - p_{1,1})(p_{2,2} - p_{2,1})} \begin{pmatrix} -p_{1,2} f_1 & +p_{1,2} f_2 & +p_{1,1} f_3 & -p_{1,1} f_4 \end{pmatrix}, \\ c_4 &:= \frac{1}{(p_{1,2} - p_{1,1})(p_{2,2} - p_{2,1})} \begin{pmatrix} f_1 & -f_2 & -f_3 & +f_4 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

definiert. Der zu ersetzende numerische Fluss ist allerdings vektorwertig. Für diesen Fall wird die über Gleichung (5.21) definierte bilineare Interpolation in jeder Komponente angewendet. Somit wird sie für die vektorwertigen Stützwerten  $\bar{f}_1, \bar{f}_2, \bar{f}_3, \bar{f}_4 \in \mathbb{R}^2$  mit denselben Stützstellen  $P_1, P_2, P_3, P_4 \in \mathbb{R}^2$  als

$$\Pi \bar{f} := \begin{pmatrix} \Pi_1 \bar{f} \\ \Pi_2 \bar{f} \end{pmatrix}$$

definiert. Dabei werden  $\Pi_1 \bar{f}$  und  $\Pi_2 \bar{f}$  nach Gleichung (5.21) aus den ersten bzw. zweiten Komponenten der Stützwerte berechnet. Damit wird  $\Pi \zeta_{\tilde{v}^H, K}^{h, v^H}$ , für  $K \in \mathcal{T}_H$ , als die bilineare Interpolation (5.21) mit den Quadraturpunkten der Zelle  $K$  als Stützstellen, also mit

$$P_j = x_{K,j}, \quad j = 1, \dots, 4,$$

und mit den Stützwerten

$$\zeta_j = \frac{1}{|K_{\delta}(x_{K,j})|} \int_{K_{\delta}(x_{K,j})} a^\epsilon(x, v^H(x_{K,j})) \nabla \tilde{v}_{K,j}^{h,v^H(x_{K,j})}(x) \, dx \quad j = 1, \dots, 4$$

definiert. Dabei ist  $\tilde{v}_{K,j}^{h,v^H(x_{K,j})}$  die Lösung des Mikroproblems (4.26) zu  $\tilde{v}^H$  mit dem Parameter  $s = v^H(x_{K,j})$ . Damit gilt

$$\Pi \zeta_{\tilde{v}^H, K}^{h,v^H}(x_{K,j}) = \frac{1}{|K_{\delta}(x_{K,j})|} \int_{K_{\delta}(x_{K,j})} a^\epsilon(x, v^H(x_{K,j})) \nabla \tilde{v}_{K,j}^{h,v^H(x_{K,j})}(x) \, dx \quad j = 1, \dots, 4.$$

Der gewichtete Mittelwert des Multiskalenflusses über einer inneren Kante  $e = K^+ \cap K^-$  wird als

$$\{\Pi \zeta_{\tilde{v}^H}^{h,v^H}\}_\gamma^e(x) := \gamma_{K^+} \Pi \zeta_{\tilde{v}^H, K^+}^{h,v^H}(x) + \gamma_{K^-} \Pi \zeta_{\tilde{v}^H, K^-}^{h,v^H}(x) \quad (5.22)$$

mit  $\gamma_{K^+} + \gamma_{K^-} = 1$  definiert. Abbildung 5.7 zeigt schrittweise die Konstruktion dieser Definition.

Analog wird für eine Randkante  $e \in K \cap \partial\Omega$

$$\{\Pi \zeta_{\tilde{v}^H}^{h,v^H}\}_\gamma^e(x) := \Pi \zeta_{\tilde{v}^H, K}^{h,v^H}(x)$$

definiert. In [3] wird die Gewichtsfunktion  $\gamma$  konstant als  $\gamma \equiv \frac{1}{2}$  definiert. Diese Wahl ist in dieser Arbeit wegen den Unstetigkeiten des Koeffizienten  $a^\epsilon$ , die beim Batterieproblem (3.1) auftreten, nach [62, Kap. 4.5] nicht geeignet. Es würde zu keinem stabilen Verfahren führen. Um dieses Problem zu lösen, also um ein stabiles Verfahren zu erhalten, wird die Gewichtsfunktion  $\gamma$  in Abhängigkeit des unstetigen Koeffizienten  $a^\epsilon$  für eine innere Kante  $e = K^+ \cap K^-$  als

$$\gamma_{K^+, e} := \frac{a_+^\epsilon}{a_+^\epsilon + a_-^\epsilon}, \quad \gamma_{K^-, e} := \frac{a_-^\epsilon}{a_+^\epsilon + a_-^\epsilon} \quad (5.23)$$

mit

$$a_\#^\epsilon := \mathbf{n}_{K^\#}^\top a^\epsilon|_{K^\#} \mathbf{n}_{K^\#} \quad (5.24)$$

für  $\# \in \{+, -\}$  definiert. Falls  $a^\epsilon$  stetig über die Kante  $e$  ist, wie es z.B. beim Testproblem (5.3) der Fall ist, gilt  $a_+^\epsilon = a_-^\epsilon$  und somit  $\gamma = \frac{1}{2}$ . Somit ist Definition (5.23) konsistent mit der in [3].

Damit ist die Definition der Bilinearform (4.34) und somit die der DG-HMM in (4.35) fast vollständig. Die letzte, noch nicht diskutierte Komponente ist die Straf-Funktion  $\mu_e$ . Diese wird, wie die Gewichtsfunktion  $\gamma$  auch, abhängig vom Koeffizienten  $a^\epsilon$  für eine innere Kante  $e = K^+ \cap K^-$  als

$$\mu_e = \kappa \frac{2a_+^\epsilon a_-^\epsilon}{H_e(a_+^\epsilon + a_-^\epsilon)} \quad (5.25)$$

mit  $a_+^\epsilon$  bzw.  $a_-^\epsilon$  aus Definition (5.24) und dem Kantenmaß aus Definition (2.7) definiert. Dabei ist  $\kappa$  der *Straf-Parameter* und muss für die Stabilität hinreichend groß gewählt werden. Für weitere Details wird auf [62, Lem. 4.12, 4.51] verwiesen. Seine genaue Wahl in dieser Arbeit wird bei der jeweiligen Anwendung angegeben. Diese Definition von  $\mu_e$  entspricht dem durch  $\kappa$  gewichteten harmonischen Mittel des Koeffizienten  $a^\epsilon$  auf den zu der Kante  $e$  angrenzenden Zellen  $K^+$  und  $K^-$ .

Jetzt muss noch  $\mu_e$  für eine Randkante  $e = K \cap \partial\Omega$  definiert werden. Diese ist

$$\mu_e := \kappa \mathbf{n}_K^\top a^\epsilon|_K \mathbf{n}_K, \quad (5.26)$$

also der durch  $\kappa$  gewichtete Wert von  $a^\epsilon$  an der Kante. Damit ist die Definition der Bilinearform (4.34) und somit die der DG-HMM in (4.35) vollständig und es kann ihre genaue Implementierung betrachtet werden.

Wird dafür analog wie in Kapitel 5.1 bei der FE-HMM vorgegangen, treten hier erneut dieselben Schwierigkeiten auf. Diese sind ebenfalls, dass die Besetzungsstruktur fast komplett voll ist und in 2D 20 Mikroprobleme pro Zelle gelöst werden müssen. Deshalb soll die Bilinearform (4.34) mit Hilfe des in Gleichung (5.12) definierten Koeffizienten  $a_{K,j}^0$  so umgeschrieben werden, dass nur Lösungen der Mikroprobleme (5.10) verwendet werden. Der erste Term wird wie in Kapitel 5.2 behandelt. Um den gewichteten Multiskalenfluss umzuschreiben, wird [3, Lemma 5.5] benutzt. Dieses liefert die zu [19, Lemma 2.3] analoge Aussage für Flüsse: Für alle  $v^H \in \mathcal{V}_{\text{DG}}^p(\Omega, \mathcal{T}_H)$ , alle  $K \in \mathcal{T}_H$ , alle Mikro-Gebiete  $K_\delta(x_{K,j}) \subset K$  um die Quadraturpunkte  $x_{K,j} \in K$ ,  $j = 1, \dots, J$ , und für alle  $s \in \mathbb{R}$  gilt

$$\frac{1}{|K_\delta(x_{K,j})|} \int_{K_\delta(x_{K,j})} a^\epsilon(x, s) \nabla v_{K,j}^{h,s}(x) \, dx = a_{K,j}^0(s) \nabla v^H(x_{K,j}). \quad (5.27)$$

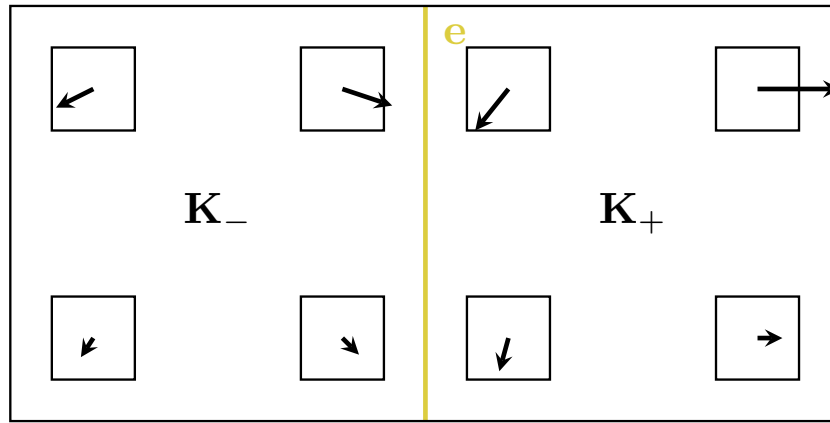
Dabei ist  $v_{K,j}^{h,s}$ , wie auch in Gleichung (5.14), die zu  $v^H$  mit Parameter  $s$  gehörende Lösung des Mikroproblems (4.26). Mit diesem Lemma kann der Multiskalenfluss, beziehungsweise die dazugehörigen Stützwerte, umformuliert werden. Es gilt

$$\zeta_j = a_{K,j}^0(v^H(x_{K,j})) \nabla \tilde{v}^H(x_{K,j}), \quad j = 1, \dots, 4,$$

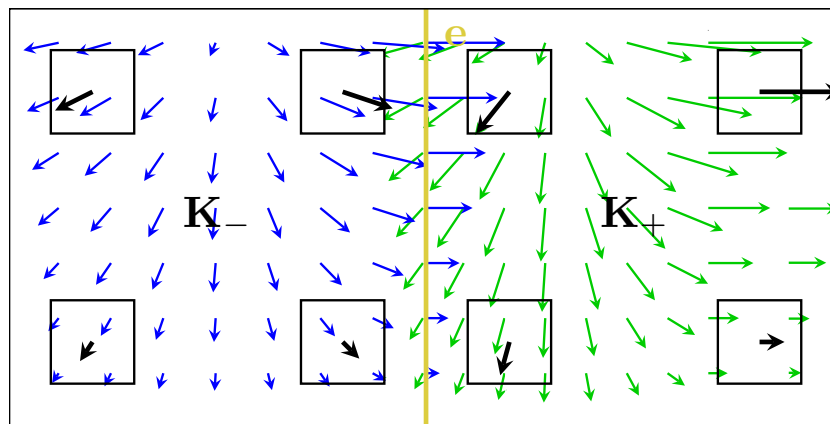
und damit nach Anwendung der Definition (5.21)

$$\Pi \zeta_{\tilde{v}^H, K}^{h, v^H}(x_{K,j}) = a_{K,j}^0(v^H(x_{K,j})) \nabla \tilde{v}^H(x_{K,j}) \quad j = 1, \dots, 4.$$

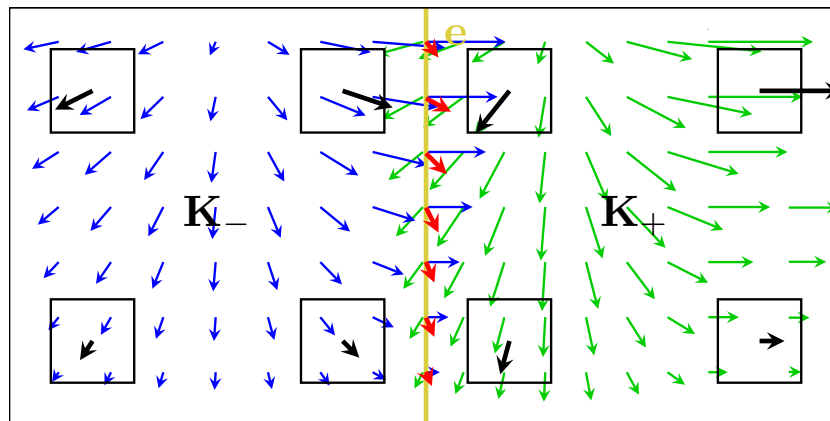
Dieser Ausdruck wird bei linearen Problemen in die Bilinearform (4.34) eingesetzt.



(a) Die vektorwertigen Stützwerte  $\zeta_j$  für die Interpolation an den Quadraturpunkten mit Hilfe der Mikrolösungen berechnen.



(b) Zellweise Multiskalenflüsse  $\Pi \zeta_{\bar{\sigma}^H, K}^{h, \sigma^H}$  bestimmen.



(c) Gewichteten Mittelwert an Kante  $e$  bilden.

Abbildung 5.7.: Schema zur Berechnung der mittleren Mehrskaleninterpolation  $\{\Pi \zeta_{\bar{\sigma}^H}^{h, \sigma^H}\}_Y^e$  an einer inneren Kante  $e$  [79].

Um mit der DG-HMM, wie mit der FE-HMM in Kapitel 5.2, nichtlineare Probleme lösen zu können, wird die Ableitung der Bilinearform (4.33) nach  $u$  berechnet.

$$\begin{aligned}
 \partial_u B_{\text{DG}}(u_k^H; u_k^H, z^H) [\delta u_{k+1}^H] = & \\
 & \sum_{K \in \mathcal{T}_H} \sum_{j=1}^J \omega_{K,j} \left[ a^0(u_k^H(x_{K,j})) \nabla \delta u_{k+1}^H(x_{K,j}) \cdot \nabla z^H(x_{K,j}) \right. \\
 & \left. + \partial_s a^0(u_k^H(x_{K,j})) \delta u_{k+1}^H \nabla u_k^H(x_{K,j}) \cdot \nabla z^H(x_{K,j}) \right] \\
 & - \sum_{e \in \mathcal{E}} \int_e \left( \{a^0(\cdot, u_k^H) \nabla \delta u_{k+1}^H + \partial_s a^0(\cdot, u_k^H) \delta u_{k+1}^H \nabla u_k^H\}_Y^e(\tilde{a}) \llbracket z^H \rrbracket_e(\tilde{a}) \right. \\
 & \left. + \{ \partial_s a^0(\cdot, u_k^H) \delta u_{k+1}^H \nabla z^H \}_Y^e(\tilde{a}) \llbracket z^H \rrbracket_e(\tilde{a}) + \{a^0(\cdot, u_k^H) \nabla z^H\}_Y^e(\tilde{a}) \llbracket \delta u_{k+1}^H \rrbracket_e(\tilde{a}) \right) d\tilde{a} \\
 & + \sum_{e \in \mathcal{E}} \int_e \mu_e \llbracket \delta u_{k+1}^H \rrbracket_e(\tilde{a}) \llbracket z^H \rrbracket_e(\tilde{a}) d\tilde{a}
 \end{aligned}$$

Diese Bilinearform zeigt, dass bei der Anwendung der DG-HMM nicht nur  $\{a^0(\cdot, v^H) \nabla \tilde{v}^H\}_Y^e$ , sondern auch  $\{a^0(\cdot, u_k^H) \nabla \delta u_{k+1}^H + \partial_s a^0(\cdot, u_k^H) \delta u_{k+1}^H \nabla u_k^H\}_Y^e$ ,  $\{\partial_s a^0(\cdot, u_k^H) \delta u_{k+1}^H \nabla z^H\}_Y^e$  und  $\{a^0(\cdot, u_k^H) \nabla z^H\}_Y^e$  durch Multiskalenflüsse ersetzt werden müssen. Dabei wird analog zu dem linearen Fall vorgegangen. Das bedeutet, dass die Multiskalenflüsse für diese Terme als bilineare Interpolationen berechnet werden können. Dabei werden die Stützstellen mit Hilfe von Gleichung (5.27) für  $j = 1, \dots, 4$  als

$$\begin{aligned}
 \zeta_{j,1} &= a_{K,j}^0(\cdot, u_k^H) \nabla \delta u_{k+1}^H + \partial_s a_{K,j}^0(\cdot, u_k^H) \delta u_{k+1}^H \nabla u_k^H, \\
 \zeta_{j,2} &= \partial_s a_{K,j}^0(\cdot, u_k^H) \delta u_{k+1}^H \nabla z^H, \\
 \zeta_{j,3} &= a_{K,j}^0(\cdot, u_k^H) \nabla z^H
 \end{aligned}$$

berechnet.

Ein wichtiger und zusätzlicher Aspekt dabei ist, dass von den Kantentermen nur die gewichteten Mittelwerte der Multiskalenflüsse unter den Zellen aufgeteilt werden. Weiter werden die Straf-Funktion und die Sprünge mit einem Faktor  $\frac{1}{2}$  auf beiden Zellen, zu denen die Kante gehört, implementiert. Der Grund für diese Wahl ist, dass für die gewichteten Mittelwerte der Multiskalenflüsse die Lösungen von Mikroproblemen auch auf der Nachbarzelle benötigt werden und mit der Aufteilung vermieden wird, dass diese über Zellen gespeichert werden müssen. Dagegen sind für die Straf-Funktion und die Sprünge von der Nachbarzelle nur Informationen auf der Makroskala notwendig, die aber mit internen *deal.II*-Funktionen einfach abrufbar sind. Abbildung 5.8 zeigt, dass die mit dieser umformulierten Bilinearform implementierte DG-HMM für das Testproblem (5.4) in der  $\mathcal{L}^2$ -Norm für die simultane Verfeinerung des Makro- und Mikro-Gitters die optimale und erwartete Konvergenzordnung liefert.

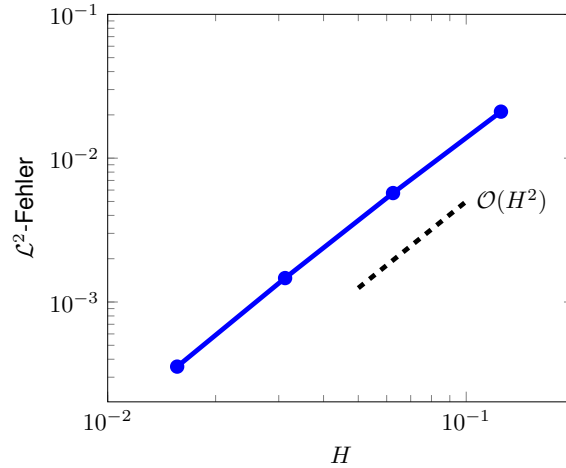


Abbildung 5.8.: Der Fehler  $\|u^0 - u^H\|_{\mathcal{L}^2(\Omega)}$  für die Lösung des Problems (5.4) mit der optimierten Implementierung der DG-HMM mit simultaner Verfeinerung des Makro- und Mikro-Gitters und mit periodischen Randbedingungen für die Mikroprobleme.

## 5.4. Adaptives FE-HMM

Als Abschluss des Kapitels über die Implementierung der FE- und der DG-HMM wird hier die Umsetzung des in Kapitel 4.3.5 vorgestellten adaptiven Algorithmus in *deal.II* diskutiert. Dafür wird erst der für den Fehlerschätzer (4.49) benötigte Sprung des Multiskalenflusses über eine Kante  $e$ ,  $[[\Pi \zeta_{u^H}^{h,u^H}]]_e$ , für viereckige Elemente definiert. Dann wird diskutiert, wie dieser ohne Lösung zusätzlicher Mikroprobleme implementiert werden kann. Anhand des Testproblems (5.3) bzw. (5.4), bei dem keine adaptive Verfeinerung nötig ist, wird gezeigt, dass sowohl der Fehlerschätzer als auch der Fehler mit der gewünschten und erwarteten Ordnung gegen null konvergieren.

Der Multiskalenfluss wurde in Kapitel 5.3 zellweise als die bilineare Interpolation aus den an den Quadraturpunkten der Zelle aus den Lösungen der Mikroprobleme berechneten Stützwerten berechnet. Der Sprung über eine inneren Kante  $e = K^+ \cap K^-$  wird analog zu dem Mittelwert (5.22) als

$$[[\Pi \zeta_{u^H}^{h,u^H}]]_e(x) := \left( \Pi \zeta_{u^H, K^+}^{h,u^H}(x) - \Pi \zeta_{u^H, K^-}^{h,u^H}(x) \right) \cdot \mathbf{n}_{K^+} \quad (5.28)$$

definiert. Dabei wurde der Zusammenhang  $\mathbf{n}_{K^-} = -\mathbf{n}_{K^+}$  ausgenutzt. Für eine Randkante  $e \in K \cap \partial\Omega_D$  wird

$$[[\Pi \zeta_{u^H}^{h,u^H}]]_e(x) := 0$$

gesetzt. Der Multiskalenfluss  $\Pi \zeta_{u^H}^{h,u^H}$  über ein Element  $K \in \mathcal{T}_H$  ist über die bilineare Interpolation auf dieser Zelle gegeben, vergleiche Gleichung (5.21). Die Stützwerte werden analog

wir für den Sprung berechnet. Damit ist die Definition des Fehlerschätzers  $\eta_H(K)$  aus Kapitel 4.3.5, Gleichung (4.49) vollständig. Um dessen Wert auf einer Zelle  $K \in \mathcal{T}_H$  zu bestimmen, ist nach den Definitionen (4.49) und (5.28) neben der stückweise konstanten Approximation von  $f$  auf  $K \in \mathcal{T}_H$  wegen der Definition des Multiskalenflusses auch der Koeffizient  $a_{K,j}^0$  an der Stelle  $s = u^H(x_{K,j})$ ,  $j = 1, \dots, 4$ , notwendig. Von diesen beiden Komponenten bereitet Letztere Schwierigkeiten, da dafür das Mikroproblem (5.10) mit  $s = u^H(x_{K,j})$ ,  $j = 1, \dots, 4$ , gelöst werden muss. Diese Parameter sind aber erst nach Lösung der Gleichung (4.32) mit dem Newton-Verfahren verfügbar. Das steht aber im Widerspruch zu dem an Anfang des Kapitels formulierten Ziels, den Fehlerschätzer nur aus vorher berechneten Mikrolösungen zu bestimmen.

Die Lösung dieser Problematik wird in [16] für lineare Koeffizienten diskutiert. Dort wird ausgenutzt, dass  $a_{K,j}^0$  konstant auf der Zelle  $K \in \mathcal{T}_H$  ist und somit für den Fehlerschätzer keine zusätzlichen Mikrolösungen notwendig sind. Dieser Ansatz kann hier wegen der Nichtlinearität von  $a_{K,j}^0$  nicht angewendet werden. Abhilfe schafft die genauere Betrachtung der linken Seite von Gleichung (5.16) der Vorschrift (5.7) für die Berechnung der Newton-Iterierten  $\delta u_{k+1}^H$ . Diese wurde in Kapitel 5.2 als

$$\begin{aligned} \partial_u B_{\text{FE},H}(u_k^H; u_k^H, z^H)[\delta u_{k+1}^H] &:= \sum_{K \in \mathcal{T}_H} \sum_{j=1}^J \omega_{K,j} \left[ a_{K,j}^0(u_k^H(x_{K,j})) \nabla \delta u_{k+1}^H(x_{K,j}) \cdot \nabla z^H(x_{K,j}) \right. \\ &\quad \left. + \partial_s a_{K,j}^0(u_k^H(x_{K,j})) \delta u_{k+1}^H \nabla u_k^H(x_{K,j}) \cdot \nabla z^H(x_{K,j}) \right] \end{aligned}$$

umgeschrieben. Dabei wird  $a_{K,j}^0$  an den Stellen  $s = u_k^H(x_{K,j})$ ,  $j = 1, \dots, 4$ , ausgewertet. Das bedeutet, dass der Koeffizient an Punkten, die mit Hilfe der alten Newton-Iterierten berechnet wurden, zur Verfügung steht. Diese Tatsache wird ausgenutzt, um den Fehlerschätzer nur aus bekannten Daten zu berechnen. Nach Gleichung (5.7) wird  $u^H = u_{k+1}^H$  mit  $u_{k+1}^H = u_k^H + \delta u_{k+1}^H$  gesetzt, falls  $\delta u_{k+1}^H$  hinreichend klein ist. Das  $k$ , bei dem dieser Fall eintritt wird mit  $k^*$  bezeichnet. Damit wird die Definition des Fehlerschätzers modifiziert und zu

$$\eta_H(K)^2 = H_K^2 \|f^H + \nabla \cdot \Pi \zeta_{u^H}^{h, u_{k^*}^H}\|_{\mathcal{L}^2(K)}^2 + \frac{1}{2} \sum_{e \in \partial K} H_e \|\Pi \zeta_{u^H}^{h, u_{k^*}^H}\|_e\|_{\mathcal{L}^2(e)}^2 \quad (5.29)$$

geändert. Hier wird für den Multiskalenfluss der Koeffizient  $a_{K,j}^0$  an den Stellen  $s = u_{k^*}^H(x_{K,j})$ ,  $j = 1, \dots, 4$ , ausgewertet. Da diese wegen des Newton-Verfahrens bekannt sind, wurde das am Anfang des Kapitels formulierte Ziel erreicht und  $\eta_H(K)^2$  nur aus für die Bilinearform benötigten Mikrolösungen berechnet. Abbildung 5.9 zeigt für das Testproblem (5.4) den  $\mathcal{L}^2$ - und den  $\mathcal{H}^1$ -Fehler der FE-HMM sowie den Wert des anhand Gleichung (4.50) mit der Definition in Gleichung (5.29) kalkulierten Fehlerschätzers  $\eta_H(\Omega)^2$  für die simultane Verfeinerung des Makro- und Mikro-Gitters. Es ist zu erkennen, dass Letzterer mit einer Ordnung zwischen eins und zwei gegen null konvergiert. Somit wurde dieser numerisch validiert.



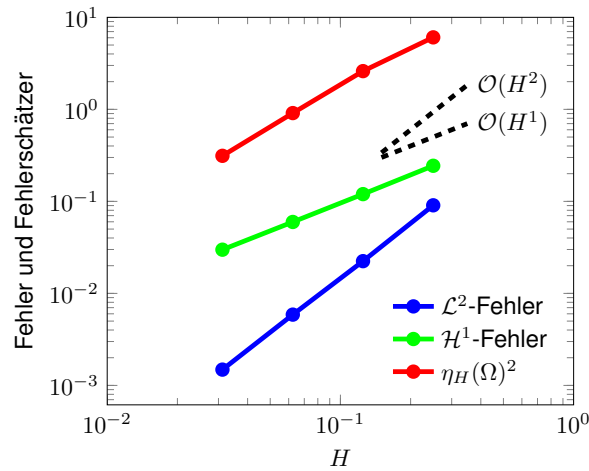


Abbildung 5.9.: Der  $\|u^0 - u^H\|_{\mathcal{L}^2(\Omega)}$ , der  $\|u^0 - u^H\|_{\mathcal{H}^1(\Omega)}$ -Fehler sowie der Fehlerschätzer  $\eta_H(\Omega)^2$  für die Lösung des Problems (5.4) mit der optimierten Implementierung der FE-HMM mit simultaner Verfeinerung des Makro- und Mikro-Gitters und mit periodischen Randbedingungen für die Mikroprobleme.

Als Abschluss des Kapitels wird kurz der Speicherbedarf des Fehlerschätzers diskutiert. Der Koeffizient  $a_{K,j}^0$  muss für jede Zelle  $K \in \mathcal{T}_H$  und jeden Quadraturpunkt  $x_{K,j} \in K$ ,  $j = 1, \dots, 4$ , in jedem Newton-Schritt gespeichert werden. Der Grund dafür ist, dass es zum Zeitpunkt dessen Berechnung noch nicht bekannt ist, ob die Werte wirklich für den Fehlerschätzer benötigt werden. Allerdings können die nicht benötigten im nächsten Newton-Schritt überschrieben werden. Da für die Anzahl der Quadraturpunkte pro Zelle  $J = 4$  gilt, bewegt sich der für den Fehlerschätzer notwendige Speicher in der gleichen Größenordnung wie der Lösungsvektor des Makroproblems und stellt somit keinen großen Speicheraufwand dar.

Somit ist Bearbeitung des ersten der drei in der Einleitung 1 formulierten Ziele dieser Arbeit abgeschlossen. Die FE-HMM und die DG-HMM wurden in der Finite-Elemente-Bibliothek *deal.II* effizient implementiert. Im nächsten Kapitel wird der zweite Punkt der Zielsetzungen bearbeitet.

## 6. Parabolische Probleme mit nichtlinearen Multiskalen-Koeffizienten

Das Ziel dieses Kapitels ist es, der Homogenisierung des in Kapitel 3.3 vorgestellten Batterieproblems (3.1) näher zu kommen. Da dieses eine ähnliche Form wie die quasilineare parabolische Gleichung (4.13) in Kapitel 4.2.3 hat, wird diese nun für Koeffizienten, die schwächere Bedingungen als (4.15), (4.16) und (4.17) in Kapitel (4.2.3) erfüllen, betrachtet. Um zu bestimmen, wie diese Bedingungen genau aussehen sollen, wird untersucht, welche dieser von den Koeffizienten, bzw. der rechten Seite des Batterieproblems (3.1) nicht erfüllt werden. Dies wurde auch schon in Kapitel (4.2.3) angesprochen.

Da die spezifische Wärmekapazität, die Wärmeleitfähigkeit und der Quellterm abhängig von den Schichten sind, sind sie in der Ortsvariable unstetig. Außerdem hängen alle polynomiell und/oder exponentiell von der Temperatur ab. Daraus folgt, dass sie in  $T$  stetig sind und dass die spezifische Wärmekapazität  $c_p$  in  $T$  nicht über ganz  $\mathbb{R}$  monoton wachsend ist. Da das Problem in Kapitel 6.1 und 6.2 mit der FE-HMM gelöst wird, wird dementsprechend auch der Lösungsraum angepasst.

Somit wird die Lösung  $u^\epsilon \in \mathcal{L}^2(0, t_{\text{end}}; \mathcal{H}_0^1(\Omega))$  mit  $\partial_t b^\epsilon(x, u^\epsilon) \in \mathcal{L}^2(0, t_{\text{end}}; \mathcal{H}^{-1}(\Omega))$  von

$$\begin{aligned} \partial_t b^\epsilon(x, u^\epsilon) - \nabla \cdot (a^\epsilon(x, u^\epsilon) \nabla u^\epsilon(t, x)) &= f^\epsilon(x, u^\epsilon) && \text{für alle } (t, x) \in \Omega_{t_{\text{end}}}, \\ u^\epsilon(t, x) &= 0 && \text{für alle } (t, x) \in (0, t_{\text{end}}) \times \partial\Omega, \\ u^\epsilon(0, x) &= u_0(x) && \text{für alle } x \in \Omega \end{aligned} \quad (6.1)$$

mit den Koeffizienten  $a^\epsilon : \Omega \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^{d \times d}$ , den Funktionen  $u^\epsilon : \Omega_{\text{end}} \rightarrow \mathbb{R}$ ,  $b^\epsilon : \Omega \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ ,  $f : \Omega \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  und  $u_0 : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$  gesucht. Für die Koeffizienten gelten jetzt folgende Bedingungen:

- $a^\epsilon$  ist  $\epsilon Y$ -periodisch in der ersten und stetig in der zweiten Variable. Außerdem existieren Konstanten  $\theta, \Theta, \tilde{\Theta}, C_L > 0$  so, dass  $a^\epsilon$  zulässig ist, also gilt

$$\begin{aligned} a^\epsilon &\in \mathcal{M}(\Omega, \theta, \Theta) && \text{und} \\ |a^\epsilon(x, s_1) - a^\epsilon(x, s_2)| &\leq C_L |s_1 - s_2| && \text{f.f.a. } x \in \Omega, \text{ für alle } s_1, s_2 \in \mathbb{R} \end{aligned} \quad (6.2)$$

erfüllt ist. Die letzte Bedingung bedeutet, dass  $a^\epsilon$  gleichmäßig Lipschitz-stetig in der zweiten Variablen ist.

- Die Funktion  $b^\epsilon$  ist  $\epsilon Y$ -periodisch in der ersten und stetig in der zweiten Variablen. Außerdem ist  $b^\epsilon$  von der Form

$$b^\epsilon(x, s) = \widetilde{b}^\epsilon(x, s)s. \quad (6.3)$$

Dabei existieren für  $\widetilde{b}^\epsilon : \Omega \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  Konstanten  $\Lambda_1, \Lambda_2 > 0$  so, dass für alle  $x \in \Omega$  und  $s \in \mathbb{R}$

$$\Lambda_1 \leq \widetilde{b}^\epsilon(x, s) \leq \Lambda_2, \quad (6.4)$$

gilt und  $\widetilde{b}^\epsilon(x, s)$  für alle  $x \in \Omega$  monoton wachsend in  $s$  ist.

- Die rechte Seite  $f^\epsilon$  ist, wie auch  $b^\epsilon$  und  $a^\epsilon$ ,  $\epsilon Y$ -periodisch in der ersten und stetig in der zweiten Variablen. Außerdem gelte für alle  $s \in \mathbb{R}$

$$\begin{aligned} u_0 &\in \mathcal{L}^\infty(\Omega), \\ f^\epsilon(\cdot, s) &\in \mathcal{L}^2(\Omega). \end{aligned} \quad (6.5)$$

Die Beschränktheit der Koeffizienten wird, wie es in Kapitel 6.1.1 gezeigt wird, für die Existenz des homogenisierten Problems benötigt. Aus der Monotonie von  $\widetilde{b}^\epsilon$  folgt die Positivität von  $\partial_t b^\epsilon$ . Das garantiert die Parabolizität des Problems. Unter welchen Annahmen auf die globale Beschränktheit und Monotonie verzichtet werden kann wird am Ende von Kapitel 6.1.2 und in Kapitel 6.2 diskutiert.

Im Vergleich zu den Bedingungen in Kapitel 4.2.3 sind die größten Änderungen, dass der Koeffizient  $b^\epsilon$  nicht mehr stetig in der ersten Variable sein muss und die rechte Seite  $f^\epsilon$   $\epsilon$ -abhängig und nichtlinear ist. Außerdem entspricht Bedingung (6.3) auch der Form des entsprechenden Terms des Batterieproblems (3.1), wie es in Kapitel 7 gezeigt wird. Wie in den vorherigen Kapiteln werden auch hier zur Vereinfachung homogene Dirichlet-Randbedingungen gewählt. Die Ergebnisse lassen sich aber analog auch für andere Randbedingungen herleiten.

Für die Homogenisierung des Problems, die in mehreren Schritten erfolgen wird, werden die in Kapitel 4 vorgestellten Ergebnisse der analytischen und numerischen Homogenisierung verwendet. Es werden auch Fehlerabschätzungen hergeleitet. Die homogenisierte Gleichung wird mit dem in Kapitel 5.2 vorgestellten optimierten Algorithmus gelöst. Anhand diesem werden die Fehlerabschätzungen numerisch validiert.

Als Vereinfachung der Notation werden im ganzen Kapitel bei der Diskussion der Ergebnisse periodische Koeffizienten betrachtet. Diese gelten aber analog für lokal-periodische Koeffizienten. In diesem Fall hängt der homogenisierte Koeffizient auch von der Makrovariablen ab. Beispiele werden dafür bei den Testproblemen in Kapitel 6.1.2 und Kapitel 6.2 gezeigt.

## 6.1. Homogenisierung der erweiterten nichtlinearen elliptischen Gleichung

Im ersten Schritt der Homogenisierung von Gleichung (6.1) wird ein erweitertes elliptisches Problem homogenisiert, da dieses in jedem Zeitschritt des parabolischen Problems auftreten wird, wie es in Kapitel 6.2 gezeigt wird. Für das so erhaltene homogenisierte Problem werden Fehlerabschätzungen hergeleitet, die mit Hilfe der MMS numerisch validiert werden. Das in diesem Kapitel betrachtete und zu homogenisierende elliptische Problem lautet: Finde  $u^\epsilon \in \mathcal{H}_0^1(\Omega)$  mit

$$b^\epsilon(x, u^\epsilon) - \nabla \cdot (a^\epsilon(x, u^\epsilon) \nabla u^\epsilon(x)) = f^\epsilon(x) \quad \text{f.f.a } x \in \Omega. \quad (6.6)$$

Dabei gelten für die Koeffizienten  $a^\epsilon$  und  $\tilde{b}^\epsilon$  mit  $b^\epsilon(x, s) = \tilde{b}^\epsilon(x, s)s$  die Bedingungen (6.2), (6.3) und (6.4). Da es sich um ein elliptisches Problem handelt, wird die an die Zeitableitung der Lösung gestellte Bedingung  $\partial_t b^\epsilon(x, u^\epsilon) \in \mathcal{L}^2(0, t_{\text{end}}; \mathcal{H}^{-1}(\Omega))$  weggelassen und die Monotonie von  $\tilde{b}^\epsilon$  muss hier nicht vorausgesetzt werden. Außerdem wird hier nur eine lineare  $\epsilon$ -abhängige rechte Seite  $f^\epsilon \in \mathcal{H}^{-1}(\Omega)$  betrachtet. Ein nichtlineares  $f^\epsilon$  wird in Kapitel 6.2 diskutiert.

Aus diesen Bedingungen folgt mit Hilfe des Satzes von Lax-Milgram, Satz 2.4, die Existenz der Lösung von Problem (6.6) mit dem Koeffizienten  $a^\epsilon(\cdot, s)$  für einen festen Parameter  $s \in \mathbb{R}$ . Aus dem Fixpunktsatz von Schauder [138, Satz IV.7.16] folgt dann analog zu [52, Satz 11.5] die Existenz einer Lösung von Gleichung (6.6). Aus diesem Satz folgt auch, dass die Lösung  $u^\epsilon$  für jedes  $\epsilon > 0$  in der  $\mathcal{H}^1$ -Norm beschränkt ist. Daraus folgt

$$\|u^\epsilon\|_{\mathcal{L}^2(\Omega)} \leq \|u^\epsilon\|_{\mathcal{H}_0^1(\Omega)} \leq C \|f^\epsilon\|_{\mathcal{H}^{-1}(\Omega)} \leq C. \quad (6.7)$$

### 6.1.1. Aufstellung des homogenisierten Problems

Nachdem die Existenz der Lösung von Gleichung (6.6) festgestellt wurde, soll die dazugehörige homogenisierte Gleichung aufgestellt werden. Dabei wird der Vorgehensweise in [111] gefolgt. Es werden erst mit Hilfe der Abschätzung (6.7) a-priori Schranken für die verschiedenen Terme von Gleichung (6.6) bewiesen. Danach werden die homogenisierten Koeffizienten bestimmt. Dadurch wird die homogenisierte Gleichung vervollständigt. Dafür wird für alle  $\epsilon > 0$  die Beschränktheit der Lösung, also

$$\|u^\epsilon\|_{\mathcal{L}^\infty(\Omega)} \leq M < \infty \quad (6.8)$$

angenommen. Diese Annahme ist ausreichend, um die Existenz des homogenisierten Problems zu zeigen. Um die Fehlerabschätzungen für das homogenisierte Problem zu beweisen, werden in Kapitel 6.1.2 weitere Annahmen an dessen Lösung gestellt.

Da die Beschränktheit von  $\nabla u^\epsilon$  in der  $\mathcal{L}^2(\Omega)$ -Norm für die weiteren Abschätzungen benötigt wird, wird erst dieser Term abgeschätzt. Mit Hilfe der Koerzivität von  $a^\epsilon$ , der Beschränktheit

beider Koeffizienten und mit der Wahl der Testfunktion  $z = u^\epsilon$  in der schwachen Formulierung von Gleichung (6.6), die analog zu der Formulierung in Anhang B aufgestellt wird, wird

$$\begin{aligned}
 \theta \int_{\Omega} |\nabla u^\epsilon(x)|^2 dx &\leq \int_{\Omega} a^\epsilon(x, u^\epsilon(x)) \nabla u^\epsilon(x) \cdot \nabla u^\epsilon(x) dx \\
 &\leq \int_{\Omega} \Lambda_1 (u^\epsilon(x))^2 dx + \int_{\Omega} a^\epsilon(x, u^\epsilon(x)) \nabla u^\epsilon(x) \cdot \nabla u^\epsilon(x) dx \\
 &\leq \int_{\Omega} \tilde{b}^\epsilon(x, u^\epsilon(x)) (u^\epsilon(x))^2 dx + \int_{\Omega} a^\epsilon(x, u^\epsilon(x)) \nabla u^\epsilon(x) \cdot \nabla u^\epsilon(x) dx \\
 &= \int_{\Omega} b^\epsilon(x, u^\epsilon(x)) u^\epsilon(x) dx + \int_{\Omega} a^\epsilon(x, u^\epsilon(x)) \nabla u^\epsilon(x) \cdot \nabla u^\epsilon(x) dx \\
 &= \int_{\Omega} f^\epsilon(x) u^\epsilon(x) dx \leq \|f^\epsilon\|_{\mathcal{L}^2(\Omega)} \|u^\epsilon\|_{\mathcal{L}^2(\Omega)} \leq C_P \|f^\epsilon\|_{\mathcal{L}^2(\Omega)} \|\nabla u^\epsilon\|_{\mathcal{L}^2(\Omega)}
 \end{aligned}$$

hergeleitet. Für die letzten beiden Abschätzungen wurden die Hölder- und die Poincaré-Ungleichung [33, Satz 1.2.8] verwendet. Aus dieser Abschätzung folgt

$$\|\nabla u^\epsilon\|_{\mathcal{L}^2(\Omega)} \leq C_P \frac{\|f^\epsilon\|_{\mathcal{L}^2(\Omega)}}{\theta} \leq \frac{C}{\theta}, \quad (6.9)$$

also ist  $\nabla u^\epsilon$  in der  $\mathcal{L}^2(\Omega)$ -Norm gleichmäßig in  $\epsilon$  beschränkt. Aus der Beschränktheit von  $a^\epsilon$  und aus Abschätzung (6.9) folgt

$$\|a^\epsilon(\cdot, u^\epsilon(\cdot)) \nabla u^\epsilon\|_{\mathcal{L}^2(\Omega)}^2 = \int_{\Omega} |a^\epsilon(x, u^\epsilon(x)) \nabla u^\epsilon(x)|^2 dx \leq \Theta^2 \int_{\Omega} |\nabla u^\epsilon(x)|^2 dx \leq C \frac{\Theta^2}{\theta^2}. \quad (6.10)$$

Damit ist auch  $a^\epsilon(\cdot, u^\epsilon(\cdot)) \nabla u^\epsilon$  in der  $\mathcal{L}^2(\Omega)$ -Norm beschränkt. Mit der Abschätzung (6.7) und den Bedingungen (6.3) bzw. (6.4) wird die Beschränktheit von  $b^\epsilon(\cdot, u^\epsilon(\cdot))$  in der  $\mathcal{L}^2(\Omega)$ -Norm als

$$\begin{aligned}
 \|b^\epsilon(\cdot, u^\epsilon(\cdot))\|_{\mathcal{L}^2(\Omega)} &= \left( \int_{\Omega} |b^\epsilon(x, u^\epsilon(x))|^2 dx \right)^{\frac{1}{2}} = \left( \int_{\Omega} |\tilde{b}^\epsilon(x, u^\epsilon(x))|^2 |u^\epsilon(x)|^2 dx \right)^{\frac{1}{2}} \\
 &\leq \Lambda_2 \left( \int_{\Omega} |u^\epsilon(x)|^2 dx \right)^{\frac{1}{2}} \leq C \Lambda_2
 \end{aligned} \quad (6.11)$$

hergeleitet. Die Abschätzungen (6.7), (6.9), (6.10) und (6.11) zeigen, dass  $u^\epsilon$ ,  $\nabla u^\epsilon$ ,  $a^\epsilon(\cdot, u^\epsilon(\cdot)) \nabla u^\epsilon$  und  $b^\epsilon(\cdot, u^\epsilon(\cdot))$  in der  $\mathcal{L}^2(\Omega)$ -Norm unabhängig von  $\epsilon$  beschränkt sind. Daraus folgt, dass Teilfolgen existieren, die wieder mit dem Index  $\epsilon$  bezeichnet werden, so, dass

$$a^\epsilon \nabla u^\epsilon \rightharpoonup A^0, \quad b^\epsilon \rightharpoonup b^0, \quad f^\epsilon \rightharpoonup f^0 \quad \text{in } \mathcal{L}^2(\Omega) \quad \text{und} \quad u^\epsilon \rightharpoonup u^0 \quad \text{in } \mathcal{H}^1(\Omega)$$

für  $\epsilon \rightarrow 0$  mit  $u^0 \in \mathcal{H}_0^1(\Omega)$  gilt. Die letzte Konvergenz folgt aus der schwachen Konvergenz von  $u^\epsilon$  und  $\nabla u^\epsilon$  in  $\mathcal{L}^2(\Omega)$ . Für  $u^0$  gilt insbesondere mit der Wahl der Testfunktion  $z = u^\epsilon - u^0 \in \mathcal{L}^2(\Omega)$

$$\int_{\Omega} (u^\epsilon(x) - u^0(x))^2 dx \rightarrow 0 \quad \text{für } \epsilon \rightarrow 0,$$

also

$$u^\epsilon \rightarrow u^0 \quad \text{in } \mathcal{L}^2(\Omega) \quad \text{für } \epsilon \rightarrow 0. \quad (6.12)$$

Diese Konvergenzen zeigen, dass die Lösung des nicht homogenisierten Problems in der  $\mathcal{H}^1(\Omega)$ -Norm nur schwach gegen die des homogenisierten Problems konvergiert. Sie stimmen auch mit den Ergebnissen aus der Literatur zusammen, die in Kapitel 4 zitiert wurden. Nach denen ist die Konvergenz in der  $\mathcal{H}^1(\Omega)$ -Norm auch nur schwach. Als Nächstes werden die Koeffizienten  $b^0, A^0$  und die rechte Seite  $f^0$  mitsamt ihrer Abhängigkeiten identifiziert und die homogenisierte Gleichung aufgestellt.

Der Koeffizient  $A^0$  wird analog zu Gleichung (4.19) nach [111, Satz 2.3] als

$$A^0 := a^0(s) \nabla u^0$$

mit

$$a^0(s) := \int_Y a(y, s) (\text{Id} + J_{w(y,s)}^T(x, s)) \, dy \quad (6.13)$$

bestimmt. Dabei wird  $J_{w(y,s)}^T$  wie in Gleichung (4.12) mit den entsprechenden Mikrolösungen von Gleichung (4.20) definiert und  $a(\cdot, s)$  ist der nach Definition 2.1 zu  $a^\epsilon(\cdot, s)$  gehörende  $Y$ -periodische Koeffizient. Analog zu Kapitel 4.2.2 und 4.2.3 erfüllt  $a^0$  dieselben Eigenschaften wie  $a^\epsilon$ . Da  $a^0$  im Allgemeinen analytisch nicht berechnet werden kann, wird für diesen Teil der homogenisierten Gleichung bei der Lösung in Kapitel 6.1.2 die in Kapitel 4.3 vorgestellte FE-HMM mit der in Kapitel 5.2 diskutierten Implementierung verwendet.

In Kapitel 4.2.3 wurde der Koeffizient  $b^0$  nach Gleichung (4.19) bestimmt. Das Ziel besteht nun darin, ihn hier genauso zu berechnen. Allerdings gilt Gleichung (4.19) nur im zeitabhängigen Fall mit der Bedingung (4.16) an  $b^\epsilon$ . Da zentrale Bestandteile des Beweises dieser Gleichung die Stetigkeit von  $b^\epsilon$  in der ersten und ihre Monotonie in der zweiten Variablen sind, kann dieser nicht analog im hier betrachteten elliptischen Fall durchgeführt werden. Es wird in Satz 6.1 trotzdem gezeigt, dass der homogenisierte Koeffizient die Form

$$b^0(s) = \bar{b}(s) = \int_Y b(y, s) \, dy \quad (6.14)$$

mit dem nach Definition 2.1 zu  $b^\epsilon(\cdot, s)$  gehörenden  $Y$ -periodischen Koeffizient  $b(\cdot, s)$  hat. Wegen Bedingung (6.3) folgt dann

$$b^0(s) = \tilde{b}^0(s)s,$$

wobei

$$\tilde{b}^0(s) = \int_Y \tilde{b}(y, s) \, dy \quad (6.15)$$

gilt.

**Satz 6.1** *Unter den Voraussetzungen (6.2), (6.3) und (6.4) hat der Koeffizient  $b^0$  von Gleichung (6.21) die Form von Gleichung (6.14), es gilt also*

$$b^0(s) = \bar{b}(s) = \int_Y b(y, s) dy.$$

Der Beweis von Satz 6.1 basiert auf den Beweis von [111, Prop. 4.3] und wird analog zu dessen Beweis in zwei Schritten erfolgen. Der Unterschied zu [111, Prop. 4.3] ist, dass hier die Stetigkeit von  $b^\epsilon$  in der ersten Variable nicht vorausgesetzt wird.

**Beweis:** Im ersten Schritt wird

$$\|b^\epsilon(\cdot, u^\epsilon(\cdot)) - b^\epsilon(\cdot, u^0(\cdot))\|_{\mathcal{L}^2(\Omega)} \rightarrow 0 \quad \text{für } \epsilon \rightarrow 0 \quad (6.16)$$

gezeigt. Wird  $b^\epsilon$  dann als

$$b^\epsilon(x, u^\epsilon(x)) = \left( b^\epsilon(x, u^\epsilon(x)) - b^\epsilon(x, u^0(x)) \right) + b^\epsilon(x, u^0(x)) \quad (6.17)$$

geschrieben, folgt aus Gleichung (6.16) und Lemma 2.2 die gewünschte Aussage. Um Gleichung (6.16) zu beweisen, wird erst die Beschränktheit von  $u^\epsilon$  aus Abschätzung (6.8) ausgenutzt. Daraus folgt, dass es ausreichend ist,  $b^\epsilon$  auf  $\Omega \times [-\tilde{C}, \tilde{C}]$  zu betrachten. Dabei gilt  $\tilde{C} > M$ , mit  $M$  aus Abschätzung (6.8). Da stetige Funktionen auf beschränkten Gebieten gleichmäßig stetig sind, gilt das für  $b^\epsilon$  auf  $\Omega \times [-\tilde{C}, \tilde{C}]$  in der zweiten Variablen. Somit existiert für jedes feste  $\epsilon_1 > 0$  ein  $\delta_1 > 0$  so, dass falls  $|s_1 - s_2| < \delta_1$  erfüllt ist,

$$|b^\epsilon(x, s_1) - b^\epsilon(x, s_2)| < \epsilon_1 \quad (6.18)$$

für jedes  $x \in \Omega$  gilt. Da nach Gleichung (6.12)  $u^\epsilon \rightarrow u^0$  in  $\mathcal{L}^2(\Omega)$  gilt, existiert eine Teilfolge, die wieder mit dem Index  $\epsilon$  indiziert wird, so, dass

$$u^\epsilon(x) \rightarrow u^0(x) \quad \text{f.f.a } x \in \Omega$$

gilt. Das bedeutet, dass  $u^\epsilon$  punktweise gegen  $u^0$  in  $\Omega$  konvergiert. Daraus folgt mit dem Satz von Egorov [96, Kap. 15, Satz 1], dass es für ein gegebenes  $\epsilon_2 > 0$  eine Teilmenge  $\Omega_1 \subset \Omega$  mit  $|\Omega_1| < \epsilon_2$  existiert, so, dass  $u^\epsilon$  auf  $\Omega_2 := \Omega \setminus \Omega_1$  gleichmäßig gegen  $u^0$  konvergiert. Damit existiert  $\tilde{\epsilon} > 0$  so, dass

$$\sup_{x \in \Omega_2} |u^\epsilon(x) - u^0(x)| < \delta_1 \quad (6.19)$$

für alle  $\epsilon < \bar{\epsilon}$  erfüllt ist. Mit Hilfe dieser Abschätzungen kann nun die Konvergenz (6.16) gezeigt werden. Es gilt

$$\begin{aligned}
 & \|b^\epsilon(\cdot, u^\epsilon(\cdot)) - b^\epsilon(\cdot, u^0(\cdot))\|_{\mathcal{L}^2(\Omega)}^2 \\
 &= \int_{\Omega} |b^\epsilon(x, u^\epsilon(x)) - b^\epsilon(x, u^0(x))|^2 dx \\
 &= \int_{\Omega_1} |b^\epsilon(x, u^\epsilon(x)) - b^\epsilon(x, u^0(x))|^2 dx + \int_{\Omega_2} |b^\epsilon(x, u^\epsilon(x)) - b^\epsilon(x, u^0(x))|^2 dx \\
 &\stackrel{(1)}{\leq} \int_{\Omega_1} |\tilde{b}^\epsilon(x, u^\epsilon(x))u^\epsilon(x) + \tilde{b}^\epsilon(x, u^0(x))u^0(x)|^2 dx + \int_{\Omega_2} \epsilon_1^2 dx \\
 &\stackrel{(2)}{\leq} \Lambda_2^2 \int_{\Omega_1} |u^\epsilon(x) + u^0(x)|^2 dx + |\Omega_2| \epsilon_1^2 \\
 &\stackrel{(3)}{\leq} \Lambda_2^2 2^2 C^2 |\Omega_1| + |\Omega_2| \epsilon_1^2 \\
 &\stackrel{(4)}{\leq} \Lambda_2^2 2^2 C^2 \epsilon_2 + |\Omega_2| \epsilon_1^2.
 \end{aligned}$$

Dabei wurden bei Ungleichung (1) die Bedingungen (6.3) und Bedingung (6.18) verwendet. Letzteres konnte benutzt werden, da nach Ungleichung (6.19) die Bedingung  $|s_1 - s_2| < \delta_1$  von Ungleichung (6.18) mit  $s_1 = u^\epsilon(x)$  und  $s_2 = u^0(x)$  erfüllt ist. Die Ungleichungen (2) und (3) gelten wegen Bedingung (6.4) und der Abschätzung (6.8), da aus der Beschränktheit von  $u^\epsilon$  mit der Konvergenz (6.12) auch die Beschränktheit von  $u^0$  folgt. Da  $\epsilon_1 > 0$  und  $\epsilon_2 > 0$  beliebig gewählt werden können, folgt nun die Konvergenz (6.16). Wie es schon erwähnt wurde, folgt damit aus Gleichung (6.17) mit Lemma 2.2 die Aussage über den homogenisierten Koeffizienten  $b^0$  in Gleichung (6.14).  $\square$

Anhand Gleichung (6.14) lässt sich herleiten, dass  $b^0$  stetig ist und

$$\bar{\Lambda}_1 \leq \tilde{b}^0(s) \leq \bar{\Lambda}_2 \quad \text{für alle } s \in \mathbb{R}$$

gilt. Damit erfüllt  $b^0$  dieselben Eigenschaften wie  $b^\epsilon$ .

Zur Vollständigkeit des homogenisierten Problems fehlt noch die Definition der rechten Seite  $f^0$ . Da nach Voraussetzung  $f^\epsilon \in Y$ -periodisch ist, kann wieder Lemma 2.2 verwendet werden. Mit dem nach Definition 2.1 zu  $f^\epsilon$  gehörenden  $Y$ -periodischen Funktion  $f$  gilt

$$f^0 = \int_Y f(y) dy. \quad (6.20)$$

Damit wurden beide Koeffizienten und die rechte Seite der zu Gleichung (6.6) gehörenden homogenisierten Gleichung bestimmt. Diese wird wie folgt definiert: Finde  $u^0 \in \mathcal{H}_0^1(\Omega)$  mit

$$b^0(u^0(x)) - \nabla \cdot (a^0(u^0(x)) \nabla u^0(x)) = f^0 \quad \text{für alle } x \in \Omega. \quad (6.21)$$

Dabei sind die Koeffizienten in den Gleichungen (6.14), (6.13) und die rechte Seite in Gleichung (6.20) definiert.



### 6.1.2. Lösen des homogenisierten Problems

In Kapitel 6.1.1 wurde das zu Problem (6.6) gehörende homogenisierte Problem aufgestellt. Hier soll es mit Hilfe der FE-HMM gelöst werden. Dabei wird zunächst der Lösungsalgorithmus vorgestellt, wofür dann Fehlerabschätzungen hergeleitet werden. Diese werden in Kapitel 6.1.3 an geeigneten Testproblemen numerisch validiert.

Um die FE-HMM anwenden zu können, wird ebenso wie in Kapitel 4.3.3 eine zulässige Triangulierung  $\mathcal{T}_H$  von  $\Omega$  betrachtet. Die Lösung  $u^H$  von Problem (6.21) wird in dem in Kapitel 4.3.3 definierten Raum  $\mathcal{V}_{\text{FE}}^1(\Omega, \mathcal{T}_H)$  gesucht. Es wird die schwache Formulierung von Gleichung (6.21)

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} b^0(u^H(x))z^H(x) \, dx + \int_{\Omega} a^0(u^H(x))\nabla u^H(x) \cdot \nabla z^H(x) \, dx \\ = \int_{\Omega} f^0 z^H(x) \, dx \quad \text{für alle } z^H \in \mathcal{V}_{\text{FE}}^1(\Omega, \mathcal{T}_H) \end{aligned}$$

betrachtet. Da der Koeffizient  $b^0$  und die rechte Seite  $f^0$  explizit nach den Gleichungen (6.14) und (6.20) berechnet werden können und sie nicht mehr von dem Parameter  $\epsilon$  abhängen, wird für die entsprechenden Terme die Standard-FEM auf der Makroskala verwendet. Dagegen wird der Term mit  $a^0$  analog zu Kapitel 5.2 umgeformt. Das führt zu der Linear- und Bilinearform dieses Problems, die als

$$F_H^0(z^H) := \int_{\Omega} f^0(x)z^H(x) \, dx$$

und als

$$\begin{aligned} B_H(v^H; \tilde{v}^H, z^H) := \int_{\Omega} \tilde{b}^0(v^H(x))\tilde{v}^H(x)z^H(x) \, dx \\ + \sum_{K \in \mathcal{T}_H} \sum_{j=1}^J \omega_{K,j} a_{K,j}^0(v^H(x_{K,j}))\nabla \tilde{v}^H(x_{K,j}) \cdot \nabla z^H(x_{K,j}) \end{aligned} \quad (6.22)$$

definiert werden. Dabei ist  $a_{K,j}^0$  wie in Gleichung (5.12) mit den Lösungen der Mikroprobleme (5.10) im Raum  $\tilde{\mathcal{V}}(K_\delta(x_{K,j}), \mathcal{T}_h)$  definiert. Das Integral in  $F_H^0$  wird, wie auch in Kapitel 4.3.3, mit der im Anhang B.3 diskutierten Quadraturformel berechnet. Damit wird die Lösung des homogenisierten Problems  $u^H \in \mathcal{V}_{\text{FE}}^1(\Omega, \mathcal{T}_H)$  als Lösung von

$$B_H(u^H; u^H, z^H) = F_H^0(z^H) \quad \text{für alle } z^H \in \mathcal{V}_{\text{FE}}^p(\Omega, \mathcal{T}_H) \quad (6.23)$$

gesucht. Dieses Problem wird mit dem in Kapitel 5.2 vorgestellten Algorithmus gelöst. Somit wird auf der Makroskala das Newton-Verfahren verwendet und auf der Mikroskala werden lineare Mikroprobleme gelöst. Die Existenz der Lösung kann ähnlich zu der von Problem (6.6)

am Anfang von Kapitel 6 gezeigt. Der einzige Unterschied besteht darin, dass, um die Existenz der Lösung mit dem Satz von Lax-Milgram, Satz 2.4, für ein festes  $u^H \in \mathcal{V}_{FE}^p(\Omega, \mathcal{T}_H)$  zu zeigen, neben den Bedingungen an  $a^\epsilon$  die Eigenschaften der Mikrolösungen benötigt werden. Aus diesen folgt nach [5, Lemma 3] und [5, Lemma 5] die für die Anwendung des Satzes notwendige Beschränktheit und Koerzivität der Bilinearform. Somit gilt wieder

$$\|u^0\|_{\mathcal{H}^1(\Omega)} \leq C.$$

Um die Fehlerabschätzung herzuleiten, wird der Fehler wie in Kapitel 4.3.4 mit Hilfe der Dreiecksungleichung als

$$\|u^0 - u^H\| \leq e_{MAC} + e_{MOD} + e_{MIC},$$

aufgeteilt. Dabei sind die einzelnen Komponenten wie in Kapitel 4.3.4 definiert. Der Mikrofehler entsteht beim Lösen der Mikroprobleme auf der Mikroskala und der Modellierungsfehler bei der Kopplung dieser mit dem Makroproblem über die Randbedingungen. Da der erste Term der Bilinearform (6.22) mit dem Koeffizienten  $b^0$  keine Mikrolösungen enthält, treten diese Fehler nur für den zweiten Term mit  $a_{K,j}^0$  auf. Deshalb können sie analog zu Kapitel 4.3.4 abgeschätzt werden. Dementsprechend werden an den Koeffizienten  $a^\epsilon$  die Bedingungen aus Kapitel (4.3.4), also die Bedingungen (4.39), (4.40) und (4.41), gestellt. Somit wird hier nur der Makrofehler  $e_{MAC}$  des homogenisierten Problems (6.21) in der  $\mathcal{L}^2(\Omega)$ - und der  $\mathcal{H}^1(\Omega)$ -Norm abgeschätzt.

**Satz 6.2** Für den Makrofehler, also den Fehler zwischen der analytischen und der FEM-Lösung mit numerischer Quadratur,  $u_0^H \in \mathcal{V}_{FE}^1(\Omega, \mathcal{T}_H)$ , des homogenisierten Problems (6.21) gelten

$$\begin{aligned} \|u^0 - u_0^H\|_{\mathcal{H}^1(\Omega)} &\leq CH, \\ \|u^0 - u_0^H\|_{\mathcal{L}^2(\Omega)} &\leq CH^2, \end{aligned}$$

falls zusätzlich zu den Bedingungen an die Koeffizienten aus Kapitel 6.1 die folgende Bedingungen erfüllt sind:

- Die verwendete Quadraturformel erfülle die in Anhang B.3 angegebene Bedingung (B.4).
- Die rechte Seite  $f^0$  erfülle Bedingung (4.36).
- Für die Lösung von Gleichung (6.21) gelte

$$u^0 \in \mathcal{H}^2(\Omega) \cap \mathcal{W}^{1,\infty}(\Omega). \quad (6.24)$$

- Für die homogenisierten Koeffizienten gelte

$$\begin{aligned} a^0, \tilde{b}^0 &\in \mathcal{W}^{2,\infty}(\Omega \times \mathbb{R}), \\ \partial_s a^0 &\in \mathcal{W}^{1,\infty}(\Omega \times \mathbb{R}), \\ \partial_s a^0, \partial_{ss} a^0 &\in \mathcal{L}^\infty(\bar{\Omega} \times \mathbb{R}) \cap C^0(\bar{\Omega} \times \mathbb{R}), \end{aligned} \quad (6.25)$$

wobei  $\partial_s a^0$  und  $\partial_{ss} a^0$  die erste und zweite Ableitung von  $a^0$  nach der zweiten Variable sind.

- $\tilde{b}^0$  sei Lipschitz-stetig, d.h es gelte

$$|\tilde{b}^0(s_1) - \tilde{b}^0(s_2)| \leq C|s_1 - s_2| \quad \text{für alle } s_1, s_2 \in \mathbb{R}. \quad (6.26)$$

Die Bedingungen an die Lösung  $u^0$  und an den homogenisierten Koeffizienten  $a^0$  entsprechen den Bedingungen (4.37) und (4.38) aus Kapitel 4.3.4 für den in diesem Kapitel betrachteten Fall  $p = 1$ . Weiter ist Bedingung (6.24) an die Lösung  $u^0$  in den Anwendungen in der Regel nicht erfüllt, sie ist jedoch notwendig um die Fehlerabschätzungen zu zeigen.

**Beweis:** Der Beweis der Abschätzung in der  $\mathcal{H}^1$ -Norm erfolgt analog zu dem Beweis von [18, Lemma 4], bei welchem das Problem für  $b^0 \equiv 0$  diskutiert wird. Somit wird hier der Beweis aus [18] für den Fall  $b^0 \neq 0$  erweitert. Nach dem Beweis von [18, Lemma 4] wird  $e^H := u_0^H - v^H \in \mathcal{V}_{\text{FE}}^p(\Omega, \mathcal{T}_H)$  mit  $v^H = \mathcal{I}_H u^0$  definiert. Dabei ist  $\mathcal{I}_H : C^0(\overline{\Omega}) \rightarrow \mathcal{V}_{\text{FE}}^1(\Omega, \mathcal{T}_H)$  die nodale Interpolation. Nach dem Sobolevschen Einbettungssatz [23, Satz 4.12] wird  $\mathcal{H}^2(\Omega)$  stetig in  $C^0(\overline{\Omega})$  eingebettet. Daher kann  $\mathcal{I}_H$  auf  $u^0$  angewendet werden. Mit der Dreiecksungleichung gilt

$$\theta \|u^0 - u_0^H\|_{\mathcal{H}^1(\Omega)} \leq \theta \|u^0 - \mathcal{I}_H u^0\|_{\mathcal{H}^1(\Omega)} + \theta \|e^H\|_{\mathcal{H}^1(\Omega)}. \quad (6.27)$$

Mit den Bedingungen (6.2) und (6.4) für  $a^0$ , der Abschätzung (2.2) sowie für  $e^H \in \mathcal{V}_{\text{FE}}^p(\Omega, \mathcal{T}_H)$  aus der Elliptizitätsbedingung (B.4) an die Quadraturformel folgt

$$\begin{aligned} \theta \|e^H\|_{\mathcal{H}^1(\Omega)}^2 &\leq C \|\nabla e^H\|_{\mathcal{L}^2(\Omega)}^2 \\ &\leq C \sum_{K \in \mathcal{T}_H} \sum_{j=1}^J \omega_{K,j} a^0(x_{K,j}, u_0^H(x_{K,j})) \nabla e^H(x_{K,j}) \cdot \nabla e^H(x_{K,j}) \\ &\leq C \sum_{K \in \mathcal{T}_H} \sum_{j=1}^J \omega_{K,j} a^0(x_{K,j}, u_0^H(x_{K,j})) \nabla e^H(x_{K,j}) \cdot \nabla e^H(x_{K,j}) \\ &\quad + C \sum_{K \in \mathcal{T}_H} \sum_{j=1}^J \omega_{K,j} \tilde{b}^0(x_{K,j}, (u_0^H)(x_{K,j})) (e^H(x_{K,j}))^2 \\ &= CB_{\text{FE},0,H}(u_0^H; u_0^H - v^H, e^H), \end{aligned}$$

wobei die Bilinearform  $B_{\text{FE},0,H}$  die über numerische Quadratur definierte Bilinearform des homogenisierten Problems ist und als

$$\begin{aligned} B_{\text{FE},0,H}(v^H; \tilde{v}^H, z^H) &:= \sum_{K \in \mathcal{T}_H} \sum_{j=1}^J \omega_{K,j} a^0(x_{K,j}, v^H(x_{K,j})) \nabla \tilde{v}^H(x_{K,j}) \cdot \nabla z^H(x_{K,j}) \\ &\quad + \sum_{K \in \mathcal{T}_H} \sum_{j=1}^J \omega_{K,j} \tilde{b}^0(x_{K,j}, v^H(x_{K,j})) \tilde{v}^H(x_{K,j}) z^H(x_{K,j}) \end{aligned}$$

definiert wird. Analog zu [18, Lemma 4] wird  $B_{\text{FE},0,H}(u_0^H; u_0^H - v^H, e^H)$  mit der zum homogenisierten Problem (6.21) gehörenden Bilinearform  $B_0$ , als

$$\begin{aligned} B_{\text{FE},0,H}(u_0^H; u_0^H - v^H, e^H) &= [B_{\text{FE},0,H}(u_0^H; u_0^H, e^H) - B_0(u^0; u^0, e^H)] \\ &\quad + [B_0(u^0; u^0 - v^H, e^H)] \\ &\quad + [B_0(u^0; v^H, e^H) - B_0(v^H; v^H, e^H)] \\ &\quad + [B_0(v^H; v^H, e^H) - B_{\text{FE},0,H}(v^H; v^H, e^H)] \\ &\quad + [B_{\text{FE},0,H}(v^H; v^H, e^H) - B_{\text{FE},0,H}(u_0^H; v^H, e^H)] \end{aligned} \quad (6.28)$$

aufgeteilt. Jetzt werden alle fünf Terme von Gleichung (6.28) abgeschätzt. Für den ersten Term gilt wegen  $e^H \in \mathcal{V}_{\text{FE}}^p(\Omega, \mathcal{T}_H) \subset \mathcal{H}^1(\Omega)$  nach Gleichung (15) aus [18, Kap 2.2]

$$|B_{\text{FE},0,H}(u_0^H; u_0^H, e^H) - B_0(u^0; u^0, e^H)| = |F_H^0(e^H) - F(e^H)| \leq CH \|e^H\|_{\mathcal{H}^1(\Omega)}.$$

Dabei ist  $F$  die zu der rechten Seite des homogenisierten Problems (6.21) gehörende Linearform. Bei der Abschätzung wurde Abschätzung (B.6) aus Anhang B.1 verwendet. Da alle anderen Terme der rechten Seite von Gleichung (6.28) als Summe und Differenz von Termen, die die Koeffizienten  $a^0$  und  $b^0$  enthalten, geschrieben werden können, werden für diejenigen mit  $a^0$  die Abschätzungen aus [18, Lemma 4] benutzt. Daher ist es ausreichend, hier nur die, die  $b^0$  enthalten, abzuschätzen. Das Ergebnis folgt am Ende als Summe der einzelnen Abschätzungen. Somit gilt für den noch zu betrachtenden Teil des zweiten Terms

$$\int_{\Omega} \tilde{b}(x, u^0(x))(u^0 - v^H)(x) e^H(x) dx \leq \tilde{\Lambda}_2 \|u^0 - v^H\|_{\mathcal{H}^1(\Omega)} \|e^H\|_{\mathcal{H}^1(\Omega)} \leq \tilde{\Lambda}_2 H \|e^H\|_{\mathcal{H}^1(\Omega)}.$$

Hierbei wurden für die erste Ungleichung die Hölder-Ungleichung und Abschätzung (2.1) und für die zweite die Eigenschaften der nodalen Interpolation  $v^H = \mathcal{I}_H u^0$ , [18, Kap. 3.2], für  $u^0 \in \mathcal{H}^2(\Omega)$  verwendet. Für den dritten Term folgt aus der Lipschitz-Stetigkeit von  $\tilde{b}^0$ , vergleiche Ungleichung (6.26), und der zweifachen Anwendung der Hölder-Ungleichung mit Exponenten 2, 3 und 6

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \left( \tilde{b}^0(u^0(x)) - \tilde{b}^0(v^H(x)) \right) v^H(x) e^H(x) dx &\leq C \|u^0 - v^H\|_{\mathcal{L}^3(\Omega)} \|v^H\|_{\mathcal{L}^6(\Omega)} \|e^H\|_{\mathcal{L}^2(\Omega)} \\ &\leq C \|u^0 - v^H\|_{\mathcal{H}^1(\Omega)} \|v^H\|_{\mathcal{W}^{1,6}(\Omega)} \|e^H\|_{\mathcal{H}^1(\Omega)} \\ &\leq CH \|e^H\|_{\mathcal{H}^1(\Omega)}. \end{aligned}$$

Dabei folgt die Abschätzung  $\|u^0 - v^H\|_{\mathcal{L}^3(\Omega)} \leq C \|u^0 - v^H\|_{\mathcal{H}^1(\Omega)}$  aus der zweifachen Anwendung der Hölder-Ungleichung und anschließenden Anwendung der Poincaré-Ungleichung sowie der stetigen Einbettung  $\mathcal{H}^1(\Omega) \subset \mathcal{L}^6(\Omega)$  für  $\Omega \subset \mathbb{R}^d$  mit  $d \leq 3$ . Werden zudem wieder die Eigenschaften der nodalen Interpolation und  $u^0 \in \mathcal{H}^2(\Omega)$  verwendet, folgt damit die letzte

Ungleichung. Die Hölder-Ungleichung ist nach [18, Kap. 3.1] auch für den Raum  $\mathcal{V}_{\text{FE}}^p(\Omega, \mathcal{T}_H)$ ,  $1 \leq p < \infty$ , mit dem diskreten Skalarprodukt

$$(z_1^H, z_2^H)_{\mathcal{V}_{\text{FE}}^p(\Omega, \mathcal{T}_H)} := \sum_{K \in \mathcal{T}_H} \sum_{j=1}^J \omega_{K,j} z_1^H(x_{K,j}) z_2^H(x_{K,j}), \quad z_1^H, z_2^H \in \mathcal{V}_{\text{FE}}^p(\Omega, \mathcal{T}_H),$$

gültig. Mit Ungleichung (29) in [18],

$$\|v^H\|_{\mathcal{V}_{\text{FE}}^p(\Omega, \mathcal{T}_H)} \leq \|v^H\|_{\mathcal{L}^p(\Omega)} \quad \text{für } p \geq 1,$$

die bei der Ungleichung (★) für  $p = 2, 3$  und  $6$  angewendet wird, mit der Lipschitz-Stetigkeit von  $\tilde{b}^0$ , mit den Eigenschaften der nodalen Interpolation und mit  $u^0 \in \mathcal{H}^2(\Omega)$  gilt damit für den fünften Term, analog zum dritten,

$$\begin{aligned} & \sum_{K \in \mathcal{T}_H} \sum_{j=1}^J \omega_{K,j} \left( \tilde{b}^0(v^H(x_{K,j})) - \tilde{b}^0(u_0^H(x_{K,j})) \right) v^H(x_{K,j}) e^H(x_{K,j}) \\ & \leq C \|e^H\|_{\mathcal{V}_{\text{FE}}^3(\Omega, \mathcal{T}_H)} \|v^H\|_{\mathcal{V}_{\text{FE}}^6(\Omega, \mathcal{T}_H)} \|e^H\|_{\mathcal{V}_{\text{FE}}^2(\Omega, \mathcal{T}_H)} \\ & \stackrel{(\star)}{\leq} C \|e^H\|_{\mathcal{L}^3(\Omega)} \|v^H\|_{\mathcal{L}^6(\Omega)} \|e^H\|_{\mathcal{L}^2(\Omega)} \\ & \leq C \|e^H\|_{\mathcal{L}^3(\Omega)} \|v^H\|_{\mathcal{W}^{1,6}(\Omega)} \|e^H\|_{\mathcal{H}^1(\Omega)} \\ & \leq C \|e^H\|_{\mathcal{L}^3(\Omega)} \|e^H\|_{\mathcal{H}^1(\Omega)}. \end{aligned}$$

Dabei wurde für die letzte Ungleichung die Ungleichung (38) aus [18, Kap. 3.2] für  $v^H = \mathcal{I}_H u^0$  und  $u^0 \in \mathcal{H}^2(\Omega)$  verwendet. Als letztes wird der vierte Term abgeschätzt. Da  $\tilde{b}^0 \in \mathcal{W}^{2,\infty}(\Omega \times \mathbb{R})$  vorausgesetzt wurde, kann [18, Prop. 1] angewendet werden. Danach gilt

$$\left| \int_{\Omega} \tilde{b}^0(v^H(x)) v^H(x) e^H(x) dx - \sum_{K \in \mathcal{T}_H} \sum_{j=1}^J \omega_{K,j} \tilde{b}^0(v^H(x_{K,j})) v^H(x_{K,j}) e^H(x_{K,j}) \right| \leq CH \|e^H\|_{\mathcal{H}^1(\Omega)}.$$

Damit wurde jeder Term auf der rechten Seite von Gleichung (6.28) abgeschätzt. Werden die hier hergeleiteten Abschätzungen und die aus dem Beweis von [18, Lemma 4] zusammengefügt, ergibt sich

$$\|e^H\|_{\mathcal{H}^1(\Omega)} \leq C(H + \|e^H\|_{\mathcal{L}^3(\Omega)}).$$

Wird der Zusammenhang  $\mathcal{H}^1(\Omega) \subset \mathcal{L}^6(\Omega)$  für  $\Omega \subset \mathbb{R}^d$  mit  $d \leq 3$  verwendet, folgt analog zum Beweis von [18, Lemma 4] aus der Cauchy-Schwarz-, der Hölder- und der Young'schen Ungleichung [102, Satz B.79] mit  $p = q = 2$  für  $\|e^H\|_{\mathcal{L}^2(\Omega)}^{\frac{1}{2}} / \sqrt{\tilde{\epsilon}}$  und  $\|e^H\|_{\mathcal{H}^1(\Omega)}^{\frac{1}{2}} / \sqrt{\tilde{\epsilon}}$  mit  $\tilde{\epsilon} > 0$

$$\|e^H\|_{\mathcal{L}^3(\Omega)} \leq \|e^H\|_{\mathcal{L}^2(\Omega)}^{\frac{1}{2}} \|e^H\|_{\mathcal{H}^1(\Omega)}^{\frac{1}{2}} \leq C\tilde{\epsilon}^{-1} \|e^H\|_{\mathcal{L}^2(\Omega)} + C\tilde{\epsilon} \|e^H\|_{\mathcal{H}^1(\Omega)}.$$

Als Nächstes wird  $\tilde{\epsilon}$  klein genug gewählt und diese Abschätzung in Gleichung (6.27) eingesetzt. Mit der Dreiecksungleichung in der  $\mathcal{L}^2(\Omega)$ - und der  $\mathcal{H}^1(\Omega)$ -Norm folgt mit den Eigenschaften der nodalen Interpolation

$$\begin{aligned} \theta \|u^0 - u_0^H\|_{\mathcal{H}^1(\Omega)} &\leq \theta \|u^0 - \mathcal{I}_H u^0\|_{\mathcal{H}^1(\Omega)} + \theta \|e^H\|_{\mathcal{H}^1(\Omega)} \\ &\leq \theta \|u^0 - \mathcal{I}_H u^0\|_{\mathcal{H}^1(\Omega)} + \theta C(H + \|e^H\|_{\mathcal{L}^2(\Omega)}) \\ &\leq \theta \|u^0 - \mathcal{I}_H u^0\|_{\mathcal{H}^1(\Omega)} + \theta C(H + \|u^0 - u_0^H\|_{\mathcal{L}^2(\Omega)} + \|v^H - u^0\|_{\mathcal{L}^2(\Omega)}) \\ &\leq C(H + \|u^0 - u_0^H\|_{\mathcal{L}^2(\Omega)}). \end{aligned} \quad (6.29)$$

Mit ähnlichen Argumenten lässt sich basierend auf [18, Lemma 6] die Abschätzung

$$\|u^0 - u_0^H\|_{\mathcal{L}^2(\Omega)} \leq C(H^2 + \|u^0 - u_0^H\|_{\mathcal{H}^1(\Omega)}^2) \quad (6.30)$$

zeigen. Allerdings wird dabei statt der nodalen Interpolation die globale  $\mathcal{L}^2$ -Projektion auf den Raum  $\mathcal{V}_{\text{FE}}^1(\Omega, \mathcal{T}_H)$  und ihre Eigenschaften verwendet. Wird die Abschätzung (6.30) in die Abschätzung (6.29) eingesetzt, alle Terme mit  $\|u^0 - u_0^H\|_{\mathcal{H}^1(\Omega)}$  auf die linke Seite gebracht und dort  $\|u^0 - u_0^H\|_{\mathcal{H}^1(\Omega)}$  ausgeklammert, folgt

$$(1 - C\|u^0 - u_0^H\|_{\mathcal{H}^1(\Omega)}) \|u^0 - u_0^H\|_{\mathcal{H}^1(\Omega)} \leq CH.$$

Da  $\|u^0 - u_0^H\|_{\mathcal{L}^2(\Omega)} \rightarrow 0$  für  $H \rightarrow 0$  folgt aus Abschätzung (6.29)  $\|u^0 - u_0^H\|_{\mathcal{H}^1(\Omega)} \rightarrow 0$  für  $H \rightarrow 0$ . Somit existiert ein  $H_1 > 0$  mit  $1 - C\|u^0 - u_0^H\|_{\mathcal{H}^1(\Omega)} > 0.5$ . Daraus folgt dann die Abschätzung

$$\|u^0 - u_0^H\|_{\mathcal{H}^1(\Omega)} \leq CH.$$

Wird diese Ungleichung in Abschätzung (6.30) eingesetzt, folgt

$$\|u^0 - u_0^H\|_{\mathcal{L}^2(\Omega)} \leq CH^2.$$

□

Damit wurde der Makrofehler in den verschiedenen Normen abgeschätzt. Werden diese zwei Abschätzungen mit den Abschätzungen des Mikro- und Modellierungsfehlers aus Kapitel 4.3.4 kombiniert, folgen für das Problem (6.23) dieselben Fehlerabschätzungen wie in Kapitel 4.3.4 für den Fall  $p = q = 1$ . Es gelten also

$$\begin{aligned} \|u^0 - u^H\|_{\mathcal{L}^2(\Omega)} &\leq C(H^2 + (h/\epsilon)^2), \\ \|u^0 - u^H\|_{\mathcal{H}^1(\Omega)} &\leq C(H^1 + (h/\epsilon)^2). \end{aligned} \quad (6.31)$$

### 6.1.3. Validierung der Fehlerabschätzungen

Die Fehlerabschätzungen (6.31) für die Lösung von Gleichung (6.23) mit der FE-HMM werden im Folgenden anhand von zwei Testproblemen mit Koeffizienten  $a^\epsilon$  und  $b^\epsilon$ , die verschiedene Bedingungen erfüllen, mit Hilfe der MMS numerisch validiert. Bei beiden wird die Lösung  $u^\epsilon : \Omega \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ ,  $u^\epsilon \in \mathcal{H}_0^1(\Omega)$ , einer Gleichung der Form (6.6) gesucht. Dabei ist die Lösung des homogenisierten Problems, wie auch in Kapitel 5, durch

$$u^0(x) = 8 \sin(\pi x_1) x_2 (1 - x_2)$$

gegeben. Die rechte Seite  $f$  wird bei beiden Testproblemen entsprechend der MMS analog zu Kapitel 5 bestimmt, also so, dass  $u^0$  die Lösung des homogenisierten Problems ist.

Das erste Testproblem ist eine Erweiterung des Problems (5.3). Somit wird Gleichung (6.6) bzw. das dazugehörige homogenisierte Problem (6.21) mit  $a^\epsilon$  aus Gleichung (5.1) bzw.  $a^0$  aus Gleichung (5.2) und für  $y := \frac{x}{\epsilon}$  mit

$$\tilde{b}_1(x, y, s) := \begin{cases} 1, & -\frac{1}{2} \leq y_1, y_2 \leq 0, \\ 1 + y_1 + \sin(2\pi y_2) x_1, & -\frac{1}{2} \leq y_1 \leq 0 < y_2 \leq \frac{1}{2}, \\ \cos(s) x_2, & -\frac{1}{2} \leq y_2 \leq 0 < y_1 \leq \frac{1}{2}, \\ 3y_2 \sin(s), & 0 \leq y_1, y_2 \leq \frac{1}{2}, \end{cases}$$

betrachtet.  $\tilde{b}_1(\cdot, \cdot, s)$  ist die nach Definition 2.1 zu  $\tilde{b}_1^\epsilon$  gehörender  $Y$ -periodischer Koeffizient und wird  $Y$ -periodisch auf  $\Omega$  fortgesetzt. Der homogenisierte Koeffizient wird nach Formel (6.15) als

$$b_1^0(x, s) = \tilde{b}_1^0(x, s) s = s \int_Y \tilde{b}_1(x, y, s) dy = s \left( \frac{9}{16} + \frac{1}{4} \cos(s) x_2 + \frac{1}{2\pi} x_1 + \frac{3}{16} \sin(s) \right)$$

berechnet. Da diese Koeffizienten und die Lösung  $u^0$  alle in diesem Kapitel gestellten Bedingungen erfüllen, wird bei einer simultanen Verfeinerung des Makro- und Mikro-Gitters die optimale Konvergenzordnung in der  $\mathcal{L}^2(\Omega)$ -Norm erwartet. Diese wird auch erreicht, wie es in Abbildung 6.1 gezeigt wird.

Für das zweite Testproblem werden diese Koeffizienten so modifiziert, dass sie unbeschränkt in  $s$  sind. Es werden für  $y = \frac{x}{\epsilon}$

$$a_2(x, y, s) := \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} (2 + \sin(2\pi y_1))(2 + \exp(s)) & 0 \\ 0 & (2 + \sin(2\pi y_2))(2 + x_2(s + s^2)) \end{pmatrix} \quad (6.32)$$

und

$$\tilde{b}_2(x, y, s) := \begin{cases} 1, & -\frac{1}{2} \leq y_1, y_2 \leq 0, \\ 1 + y_1 + \sin(2\pi y_2) x_1, & -\frac{1}{2} \leq y_1 \leq 0 < y_2 \leq \frac{1}{2}, \\ s^2 x_2, & -\frac{1}{2} \leq y_2 \leq 0 < y_1 \leq \frac{1}{2}, \\ 3y_2 \exp(s), & 0 \leq y_1, y_2 \leq \frac{1}{2}, \end{cases} \quad (6.33)$$

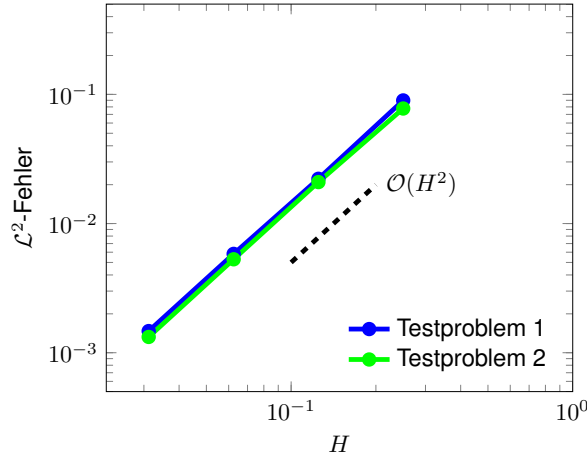


Abbildung 6.1.: Der Fehler  $\|u^0 - u^H\|_{\mathcal{L}^2(\Omega)}$  für die Lösung des Problems (6.6) mit den entsprechenden Koeffizienten der Testprobleme mit der FE-HMM mit simultaner Verfeinerung des Makro- und Mikro-Gitters, also mit  $h/\epsilon = H$ .

definiert. Dabei werden  $a_2(\cdot, \cdot, s)$  und  $\tilde{b}_2(\cdot, \cdot, s)$  analog zum ersten testproblem definiert. Aus diesen Koeffizienten werden  $a^0$  und  $b^0$  analog wie in Kapitel 5 bzw. bei Testproblem 1 als

$$a_2^0(x, s) := \begin{pmatrix} (2 + \exp(s)) & 0 \\ 0 & (2 + x_2(s + s^2)) \end{pmatrix}$$

und als

$$b_2^0(x, s) = \tilde{b}_1^0(x, s)s = s \int_Y \tilde{b}(x, y, s) dy = s \left( \frac{9}{16} + \frac{1}{4}s^2x_2 + \frac{1}{2\pi}x_1 + \frac{3}{16}\exp(s) \right)$$

berechnet. Der  $\mathcal{L}^2$ -Fehler wird bei einer simultanen Verfeinerung des Makro- und Mikro-Gitters in Abbildung 6.1 dargestellt. Die Notwendigkeit einer solchen Verfeinerung lässt sich analog zu Kapitel 4.3.4 aus den Abschätzungen (6.31) herleiten. Es ist zu erkennen, dass auch bei diesem Problem, wo die Koeffizienten nur nach unten, aber nicht nach oben beschränkt sind, die optimale Konvergenzordnung erreicht wird.

Der Grund der erreichten Konvergenzordnung ist in der Verwendung der Beschränktheit zu finden. Für die Existenz der Lösung des nicht homogenisierten Problems wird nur die Beschränktheit nach unten benötigt, die auch beim zweiten Testproblem gegeben ist. Nach Annahme (6.8) gilt  $\|u^\epsilon\|_{\mathcal{L}^\infty(\Omega)} \leq M$ . Da bei dem Beweis der Existenz der homogenisierten Lösung für den Parameter  $s$  immer  $u^\epsilon(x)$  für  $x \in \Omega$  verwendet wird, reicht es, wenn  $a^\epsilon$  und  $b^\epsilon$  nach oben auf  $[-M, M]$  in  $s$  beschränkt sind. Das ist aber wegen der Stetigkeit der beiden Koeffizienten in der zweiten Variablen über  $\mathbb{R}$  gegeben. Damit kann die Beschränktheit von  $a^\epsilon$  und  $b^\epsilon$  nach oben durch die Annahme (6.8) ersetzt werden. Diese Aussage wird bei der Behandlung des Batterieproblems (3.1) in Kapitel 7 eine wichtige Rolle spielen, da dessen



Koeffizienten in der zweiten Variable über  $\mathbb{R}$  unbeschränkt sind. Da  $u^\epsilon \rightarrow u^0$  für  $\epsilon \rightarrow 0$  punktweise gilt, folgt aus Annahme (6.8), dass auch  $u^0$  in der  $\mathcal{L}^\infty(\Omega)$ -Norm beschränkt ist. Damit wird mit der analogen Überlegung ebenfalls die Beschränktheit der homogenisierten Koeffizienten nach oben, welche aus der  $\epsilon$ -abhängigen folgt, im Beweis der Fehlerabschätzung nicht mehr benötigt. Somit kann auch bei Testproblem 2 die optimale Konvergenzordnung bei der simultanen Verfeinerung des Makro- und Mikro-Gitters erreicht werden, wie es in Abbildung 6.1 zu sehen ist. Abbildung 6.2 zeigt, dass diese Verfeinerung auch notwendig ist, da sowohl bei fester Mikro-Gitterweite (Abbildung 6.2a) als auch bei fester Makro-Gitterweite (Abbildung 6.2b) die optimale Ordnung nicht erreicht wird.

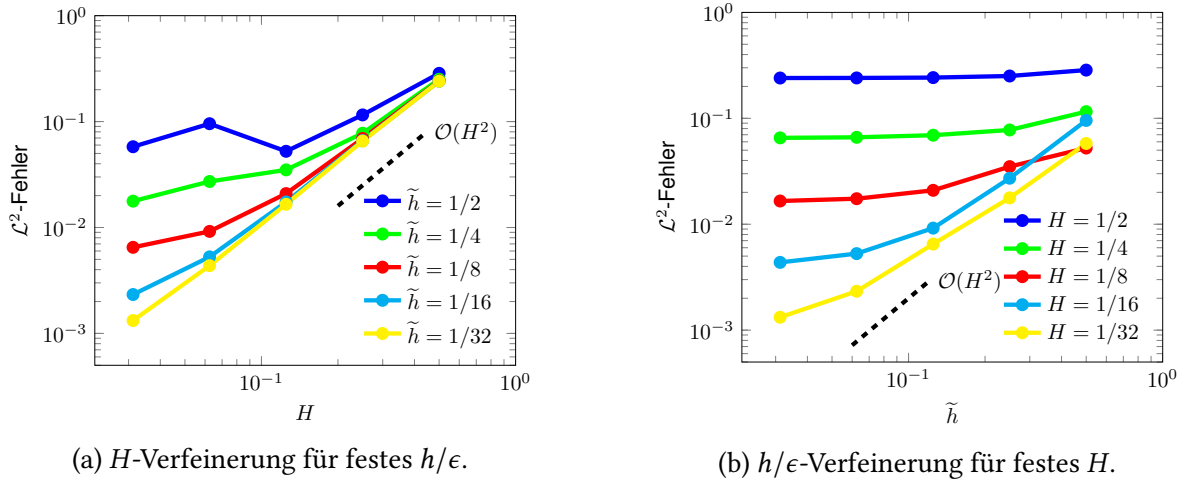


Abbildung 6.2.: Der Fehler  $\|u^0 - u^H\|_{\mathcal{L}^2(\Omega)}$  für die Lösung des zweiten homogenisierten Testproblems mit der FE-HMM mit unterschiedlicher Verfeinerung des Makro- und Mikro-Gitters.

## 6.2. Homogenisierung der parabolischen Gleichung

In Kapitel 6.1 wurde die erweiterte quasilineare elliptische Gleichung (6.6) unter der Annahme (6.8) mit unbeschränkten und nichtlinearen Koeffizienten homogenisiert und die homogenisierte Gleichung (6.21) mit Hilfe der FE-HMM gelöst. In diesem Kapitel werden die dort hergeleiteten Ergebnisse verwendet, um die parabolische Gleichung (6.1) unter derselben Annahme und unter den Bedingungen (6.2), (6.3), (6.4) und (6.5) zu behandeln. Dabei ist im Gegensatz zu Kapitel 6.1 auch die rechte Seite nichtlinear.

Mit derselben Überlegung wie bei der Beschränktheit der Koeffizienten in Kapitel 6.1.2 kann auch die Monotonie von  $b^\epsilon$  in der zweiten Variablen über  $\mathbb{R}$  abgeschwächt werden. Wird für  $x \in \Omega$   $M_1 \leq |u^\epsilon(x)| \leq M_2$  für  $M_1, M_2 \in \mathbb{R}$  angenommen, ist es ausreichend, wenn  $\tilde{b}^\epsilon$  im Intervall  $[M_1, M_2]$  monoton wachsend ist. Da die spezifische Wärmekapazität  $c_p$  nicht global

monoton wachsend ist und sie, wie es in Kapitel 7 gezeigt wird,  $\widetilde{b}^\epsilon$  entspricht, wird dieser Zusammenhang in Kapitel 7 beim Batterieproblem (3.1) verwendet. Dort wird auch begründet, dass eine Annahme der Form von (6.8) den physikalischen Prozessen entspricht.

Gleichung (6.1) wird mit der Rothe-Methode [126] erst in der Zeit und dann im Raum diskretisiert. Somit wird bei dieser Methode in jedem Zeitschritt eine PDGI gelöst, weshalb sie sich gegenüber der vertikalen Linienmethode (*method of lines*) [131] für diese Arbeit anbietet. Für die einzelne PDGI können die Ergebnisse aus Kapitel 6.1 verwendet werden.

Für die zeitliche Diskretisierung wird das implizite Euler-Verfahren verwendet. Dabei wird das Zeitintervall  $[0, t_{\text{end}}]$  in  $N \in \mathbb{N}$  Intervalle mit den Zeitpunkten  $0 = t^0 < \dots < t^N = t_{\text{end}}$  aufgeteilt und die Lösung der Gleichung in diesen in der Form

$$u^\epsilon(t^n, x) \approx u^{\epsilon, n}(x), \quad n = 1, \dots, N,$$

mit  $u^{\epsilon, n} \in \mathcal{H}_0^1(\Omega)$  für  $n = 1, \dots, N$  gesucht. Die Zeitpunkte werden äquidistant gewählt, d.h. es gilt  $t^n = nt_{\text{end}}/N$ , für  $n = 0, \dots, N$ . Somit wird die Zeitschrittweite als

$$\Delta t := \frac{t_{\text{end}}}{N}$$

definiert, woraus  $t^n = n\Delta t$  für  $n = 0, \dots, N$  folgt. Ein Vorteil des Verfahrens besteht darin, dass es für jedes  $\Delta t > 0$  ein stabiles Verfahren ist. Mit dieser Zeitschrittweite wird für  $n \in \{1, \dots, N\}$  die Zeitableitung als

$$\partial_t b^\epsilon(x, u^{\epsilon, n}(x)) \approx \frac{b^\epsilon(x, u^{\epsilon, n}(x)) - b^\epsilon(x, u^{\epsilon, (n-1)}(x))}{\Delta t}$$

approximiert. Wird dieser Zusammenhang in Gleichung (6.1) eingesetzt, führt das für alle  $x \in \Omega$  und  $n \in \{1, \dots, N\}$  zu der semidiskreten Gleichung

$$\frac{b^\epsilon(x, u^{\epsilon, n}(x)) - b^\epsilon(x, u^{\epsilon, (n-1)}(x))}{\Delta t} - \nabla \cdot (a^\epsilon(x, u^{\epsilon, n}) \nabla u^{\epsilon, n}(t, x)) = f^\epsilon(x, u^{\epsilon, n}). \quad (6.34)$$

Für  $n = 0$  wird der Anfangswert

$$u^{\epsilon, 0}(x) := u_0(x) \quad \text{für alle } x \in \Omega$$

definiert. Wird Gleichung (6.34) mit  $\Delta t$  multipliziert und die Terme abhängig von der enthaltenen zeitdiskreten Lösung sortiert, folgt für alle  $x \in \Omega$  und  $n \in \{1, \dots, N\}$

$$(b^\epsilon(x, u^{\epsilon, n}(x)) - \Delta t f^\epsilon(x, u^{\epsilon, n})) - \Delta t \nabla \cdot (a^\epsilon(x, u^{\epsilon, n}) \nabla u^{\epsilon, n}(t, x)) = b^\epsilon(x, u^{\epsilon, (n-1)}(x)). \quad (6.35)$$

Mit der Definition

$$\widehat{b}^\epsilon(x, s) := b^\epsilon(x, s) - \Delta t f^\epsilon(x, s) \quad (6.36)$$

wird Gleichung (6.35) in die Form von Gleichung (6.6) gebracht. Falls  $\widehat{b}^\epsilon$  und die rechte Seite die in Kapitel 6.1 gestellten Bedingungen erfüllen, kann Gleichung (6.35) homogenisiert und mit der FE-HMM gelöst werden.

Nach der Abschätzung (6.11) gilt  $b^\epsilon(\cdot, u^\epsilon(\cdot)) \in \mathcal{L}^2(\Omega)$  und somit  $b^\epsilon(\cdot, u^\epsilon(\cdot)) \in \mathcal{H}^{-1}(\Omega)$ . Da außerdem  $b^\epsilon$   $\epsilon Y$ -periodisch in der ersten und stetig in der zweiten Variablen ist, erfüllt die rechte Seite für jedes  $n \in \{1, \dots, N\}$  Bedingung (6.5). Aus Voraussetzung (6.8) folgt  $u_0 \in \mathcal{L}^\infty(\Omega)$ . Da außer  $b^\epsilon$  auch  $f^\epsilon$  nach Voraussetzung  $\epsilon Y$ -periodisch in der ersten und stetig in der zweiten Variablen ist, gilt dies auch für  $\widehat{b}^\epsilon$ . Somit muss nur noch vorausgesetzt werden, dass

$$\widehat{b}^\epsilon(x, s) := \widehat{b}^{\star, \epsilon}(x, s)s$$

mit

$$0 < \widehat{\Lambda}_0 \leq \widehat{b}^{\star, \epsilon}(x, s)$$

gilt. In Kapitel 7 wird gezeigt, dass diese Bedingung für die Koeffizienten bzw. die rechte Seite des Batterieproblems (3.1) erfüllt ist.

In diesem Fall kann Gleichung (6.35) mit den Ergebnissen aus Kapitel 6.1.1 homogenisiert werden. Mit Hilfe von Formel (6.14) und der Linearität des Integrals folgt für jedes  $x \in \Omega$  und  $n \in \{1, \dots, N\}$

$$(b^0(x, u^{0,n}(x)) - \Delta t f^0(x, u^{0,n})) - \Delta t \nabla \cdot (a^0(x, u^{0,n}) \nabla u^{0,n}(t, x)) = b^0(x, u^{0,(n-1)}(x)). \quad (6.37)$$

Dabei wird analog zum nicht homogenisierten Problem der Anfangswert für  $n = 0$  als

$$u^{0,0}(x) := u_0(x) \quad \text{für alle } x \in \Omega$$

definiert. Mit Umformung der Gleichung (6.37) und der Näherung

$$\partial_t b^0(x, u^{0,n}(x)) \approx \frac{b^0(x, u^{0,n}(x)) - b^0(x, u^{0,(n-1)}(x))}{\Delta t}$$

folgt die mit dem impliziten Euler-Verfahren in der Zeit diskretisierte semidiskrete homogenisierte Gleichung

$$\partial_t b^0(x, u^{0,n}) - \nabla \cdot (a^0(x, u^{0,n}) \nabla u^{0,n}(x)) = f^0(x, u^{0,n}) \quad \text{für alle } x \in \Omega.$$

Diese wird in der Form von Gleichung (6.37) in jeden Zeitschritt mit der FE-HMM gelöst, wie es in Kapitel 6.1.2 beschrieben wurde.

### 6.2.1. Validierung der Konvergenzordnung in der Zeit

Um zu zeigen, dass die in Kapitel 6.2 berechnete Lösung mit der für das implizite Euler-Verfahren erwarteten Konvergenzordnung eins gegen die Lösung des kontinuierlichen homogenisierten Problems

$$\begin{aligned} \partial_t b^0(x, u^0) - \nabla \cdot (a^0(x, u^0) \nabla u^0(t, x)) &= f^0(x, u^0) && \text{für alle } (t, x) \in \Omega_{t_{\text{end}}}, \\ u^0(t, x) &= 0 && \text{für alle } (t, x) \in (0, t_{\text{end}}) \times \partial\Omega, \\ u^0(0, x) &= u_0(x) && \text{für alle } x \in \Omega \end{aligned} \quad (6.38)$$

in der Zeit konvergiert und eine optimale Verfeinerungsstrategie für die Ort- und Zeitdiskretisierung zu finden, wird wieder die MMS verwendet. Dabei wird Problem (6.1) auf  $\Omega_{t_{\text{end}}} = (0, t_{\text{end}}) \times \Omega$  mit  $t_{\text{end}} = 0.04$  und den unbeschränkten Koeffizienten (6.32) und (6.33) aus Kapitel 6.1.2 betrachtet. Die rechte Seite wird so gewählt, dass

$$u^0(t, x) := e^{-2\pi^2 t} \sin(\pi x_1) \sin(\pi x_2)$$

die analytische Lösung des homogenisierten Problems (6.38) ist. Außerdem wird

$$u_0(x) := u^0(0, x) = \sin(\pi x_1) \sin(\pi x_2)$$

gesetzt. Um den Zeitfehler untersuchen zu können, wird die Ortsdiskretisierung so gewählt, dass der Ortsfehler im Gesamtfehler vernachlässigt werden kann. Da das Verfahren bzgl. des  $\mathcal{L}^2(\Omega)$ -Fehlers Ordnung zwei im Ort hat, wird  $H = h/\epsilon = 2^{-5}$  gewählt. Daraus folgt, dass für den normierten Zeitschritt

$$\widetilde{\Delta t} := \frac{\Delta t}{t_{\text{end}}} \quad (6.39)$$

der Größe  $2^{-n}$  für  $n = 0, \dots, 6$  der Zeitfehler dominieren wird. Abbildung 6.3 zeigt, dass das Verfahren für kleinere  $\widetilde{\Delta t}$  sogar mit einer Ordnung größer eins in der Zeit konvergiert. Das ist besser als die für das implizite Euler-Verfahren erwartete Ordnung eins.

Als Nächstes wird das Verhältnis des Fehlers im Zeit und Ort betrachtet. Abbildung 6.4 zeigt den  $\mathcal{L}^2$ -Fehler  $\|u^0 - u^H\|_{\mathcal{L}^2(\Omega)}$  für die Lösung des homogenisierten Testproblems (6.38) mit der FE-HMM einerseits mit fester Orts- und variierender Zeitdiskretisierung, Abbildung 6.4a, andererseits mit fester Zeit- und variierender Ortsdiskretisierung, Abbildung 6.4b. Es ist zu erkennen, dass wegen der in Abbildung 6.3 zu sehenden zeitlichen Konvergenzordnung, die größer als eins ist, ist nicht wie erwartet  $\widetilde{\Delta t} = H^2 = (h/\epsilon)^2$  die optimale Verfeinerungsstrategie. Diese ist ungefähr  $\widetilde{\Delta t} \approx H^{1.2} = (h/\epsilon)^{1.2}$ .

Damit wurde die zu der quasilinearen parabolischen Gleichung (6.1) gehörende, mit dem impliziten Euler-Verfahren in der Zeit diskretisierte und mit Hilfe analytischer und numerischer Homogenisierung hergeleitete semidiskrete homogenisierte Gleichung mit der FE-HMM

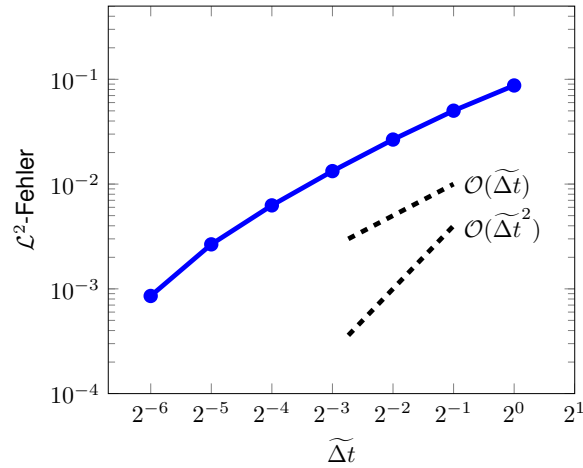
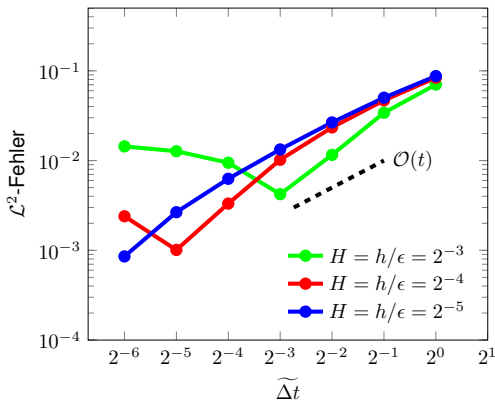
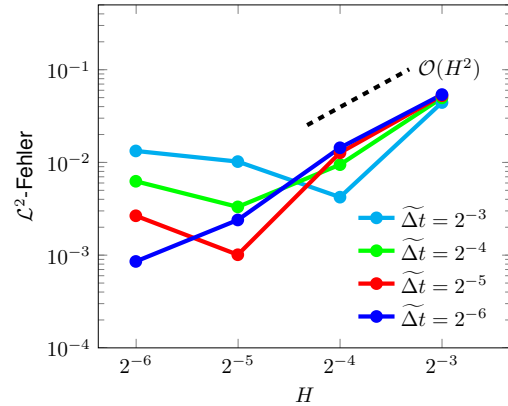


Abbildung 6.3.: Der Fehler  $\|u^0 - u^H\|_{\mathcal{L}^2(\Omega)}$  für die Lösung des homogenisierten Testproblems (6.38) mit der FE-HMM mit  $H = h/\epsilon = 2^{-5}$  sowie verschiedenen Zeitschritten  $\widetilde{\Delta t}$ .

gelöst. Es wurde gezeigt, dass sowohl im Ort als auch in der Zeit die bewiesenen bzw. erwarteten Konvergenzordnungen, für das in *deal.II* mit dem in Kapitel 5.2 vorgestellten Algorithmus implementierte Verfahren, erreicht werden. Damit ist die Bearbeitung des zweiten Punktes der in der Einleitung erwähnten Zielsetzungen dieser Arbeit, also die Erweiterung der FE-HMM auf Probleme mit mehreren unstetigen und nichtlinearen Multiskalen-Koeffizienten, vollendet. Es bleibt somit nur der dritte Punkt, die Anwendung der entwickelten Methode auf thermische Simulationen in LIB, übrig. Dieser wird im nächsten Kapitel bearbeitet.



(a)  $\widetilde{\Delta t}$ -Verfeinerung für festes  $H = h/\epsilon$ .



(b)  $H = h/\epsilon$ -Verfeinerung für festes  $\widetilde{\Delta t}$ .

Abbildung 6.4.: Der Fehler  $\|u^0 - u^H\|_{\mathcal{L}^2(\Omega)}$  für die Lösung des homogenisierten Testproblems (6.38) mit der FE-HMM mit fester Orts- und variierender Zeitdiskretisierung, Abbildung 6.4a, sowie mit fester Zeit- und variierender Ortsdiskretisierung, Abbildung 6.4b.

## 7. Numerische Ergebnisse – Lösung des Batterieproblems

In diesem Kapitel wird mit Hilfe der in Kapitel 6 vorgestellten Methode das Batterieproblem (3.1) aus Kapitel 3 homogenisiert und die homogenisierte Gleichung für verschiedene Randbedingungen und rechte Seiten gelöst. Um diese Methode anwenden und die homogenisierte Gleichung mit der FE-HMM nach dem optimierten Algorithmus aus Kapitel 5 lösen zu können, wird in Kapitel 7.1 zunächst identifiziert, welcher physikalischer Parameter welchen Koeffizienten der Methode entspricht. Für die nach Anhang A entdimensionalisierten Koeffizienten wird gezeigt, dass sie die für die Existenz des homogenisierten Problems notwendigen Bedingungen aus Kapitel 6, die Bedingungen (6.2)–(6.5), erfüllen und die Annahme (6.8) über die Beschränktheit der Lösung gerechtfertigt ist. Nachdem die Anwendbarkeit der Methode gezeigt wurde, wird in Kapitel 7.2 an einer vereinfachten Geometrie untersucht, inwieweit eine Multiskalen-Methode für das Batterieproblem von Vorteil ist. Als Abschluss der Arbeit werden Ergebnisse für die vollständige 2D- und 3D-Geometrie präsentiert. Dabei werden ausgewählte Anwendungsfälle simuliert, die die vielseitige Einsetzbarkeit der Methode zeigen.

Um die Diskussion über das Batterieproblem zu erleichtern, wird es an dieser Stelle kurz wiederholt. Gesucht ist die zeit- und ortsabhängige Temperatur  $T$ , die

$$\rho(x) \partial_t (c_p(x, T) T) = \nabla \cdot (\lambda(x, T) \nabla T) + \dot{Q}_{\text{src}}(x, T) \quad \text{für alle } (t, x) \in \Omega_{t_{\text{end}}} \quad (7.1)$$

erfüllt. Dabei ist  $\Omega$  die in Kapitel 3.2 vorgestellte, in Abbildung 3.4 gezeigte und im Anhang A, in Gleichung (A.2) definierte Geometrie der Batterie. Im Kapitel 7.2 wird das in Gleichung (A.1) definierte vereinfachte Gebiet, welches den Stack darstellt, verwendet.  $\rho$  ist die Dichte,  $c_p$  die spezifische Wärmekapazität,  $\lambda$  die Wärmeleitfähigkeit und  $\dot{Q}_{\text{src}}$  der Wärmequellterm. Diese Koeffizienten und ihre Abhängigkeiten wurden in Kapitel 3.3 diskutiert. Die Maße der Batterie, bzw. ihrer Komponenten, sowie die Werte der Koeffizienten und die Parameter des nichtlinearen Quellterms sind im Anhang A in Tabelle A.1, Tabelle A.2, Tabelle A.3 und Gleichung (A.4) angegeben. Die nichtlinearen Ausdrücke für  $\lambda$  und  $c_p$  sind in Gleichung (3.4) aufgeführt. Diese werden während des ganzen Kapitels verwendet. Alle Koeffizienten hängen von den Schichten bzw. von den Komponenten der Batterie ab und sind somit unstetig in der Ortsvariable. Außerdem sind alle außer  $\rho$  nichtlinear in der Temperatur. Der Wärmequellterm  $\dot{Q}_{\text{src}}$  wird im Aktivmaterial entweder durch den Ausdruck (3.5) oder durch den Ausdruck (3.6) beschrieben. Im ersten Fall wird er als  $\dot{Q}_{1,\text{src},\text{AM}}$  und im zweiten als  $\dot{Q}_{2,\text{src},\text{AM}}$  bezeichnet. Falls nicht explizit erwähnt ist welches  $\dot{Q}_{\text{src},\text{AM}}$  im betrachteten Anwendungsfall verwendet wird,

wird  $\dot{Q}_{2,\text{src,AM}}$  benutzt. Der Grund dafür ist, dass  $\dot{Q}_{2,\text{src,AM}}$  nur unter den in Kapitel 3.3 diskutierten speziellen Rand- und Anfangsbedingungen gültig ist,  $\dot{Q}_{1,\text{src,AM}}$  aber auch für andere verwendet werden kann. Die zu Gleichung (7.1) gehörende Anfangs- und Randbedingungen werden immer bei der konkreten Anwendung angegeben.

Es ist wichtig zu wiederholen, dass, wie es in Kapitel 4.2.1 diskutiert wurde, der Parameter der kleinen Skala  $\epsilon$  als die Dicke der Einheitszelle (Abbildung 3.4 rechts) der Batterie definiert wird.

## 7.1. Homogenisierung und Lösung der Gleichung

Bevor gezeigt wird, dass die Koeffizienten die Bedingungen aus Kapitel 6 erfüllen, wird zunächst Annahme (6.8) für die Lösung von Gleichung (7.1) gerechtfertigt. Wie es im Anhang C gezeigt wird, kann die Lösung des Batterieproblems (7.1) in der  $\mathcal{L}^\infty(\Omega)$ -Norm mit Hilfe des Vergleichsprinzips nach oben und unten beschränkt werden. Es ergibt sich abhängig von dem genauen Anwendungsfall, also abhängig von der Wahl des Quellterm, der Simulationszeit sowie der Rand- und Anfangswerte, nach Anhang C für  $T$  in der  $\mathcal{L}^\infty$ -Norm eine untere Schranke  $M_1 \in (259.5, 262]$  und eine obere Schranke  $M_2 \in (298.15.5, 343.15]$ . Diese entsprechen den in Kapitel 3.3 erwähnten realen Bedingungen, unter denen LIB verwendet werden sollen. Somit können die Bedingungen an den Koeffizienten unter dieser Annahme geprüft werden. Hier wird nur der Stack, also der Fall wo  $\Omega$  über Gleichung (A.1) definiert ist, betrachtet. Der Grund dafür ist, dass nur in diesem Teil der Batterie die Koeffizienten, die die Materialeigenschaften beschreiben, einen Multiskalencharakter aufweisen und somit eine Multiskalen-Methode nur hier notwendig ist. Wie das Problem für die komplette Geometrie, also wo  $\Omega$  über Gleichung (A.2) definiert wird, gelöst werden kann, wird in Kapitel 7.3 diskutiert.

Zunächst wird der Fall  $\dot{Q}_{1,\text{src,AM}}$  betrachtet, bei dem  $\dot{Q}_{\text{src}}$  im Aktivmaterial in  $T$  konstant ist. Damit folgt aus dem Vergleich von Gleichung (7.1) und Gleichung (6.1), dass sich die Produkte  $\rho(x) c_p(x, T) T$  und  $\rho(x) c_p(x, T)$  als  $b^\epsilon(x, T)$  und  $\tilde{b}^\epsilon(x, T)$  sowie  $\lambda(x, T)$  als  $a^\epsilon(x, T)$  und  $\dot{Q}_{\text{src}}(x)$  als  $f^\epsilon(x)$  identifizieren lassen.

Mit dieser Identifizierung können nun die Bedingungen (6.2)–(6.5) überprüft werden. Da die nichtlinearen Koeffizienten stetig in  $T$  sind, ist auch das Produkt  $\rho(x) c_p(x, T)$  stetig in  $T$ . Somit ist sowohl  $\lambda$  als auch  $\rho c_p$  über  $\Omega \times [M_1, M_2]$  beschränkt. Es bleibt noch  $\lambda \in \mathcal{M}(\Omega, \theta, \Theta)$  für  $0 < \theta < \Theta$ , die Lipschitz-Stetigkeit in  $T$  von  $\lambda$ , die Beschränktheit nach unten sowie die Monotonie von  $\rho c_p$  über  $[M_1, M_2]$  für jedes  $x \in \Omega$  in der zweiten Variable zu zeigen. Da in den Ableiterschichten alle Koeffizienten konstant sind, sind dort alle Bedingungen erfüllt. Da sowohl  $\lambda_{\text{AM},\perp}$  als auch  $\lambda_{\text{AM},\parallel}$  im Aktivmaterial für  $T \in [M_1, M_2]$  monoton fallend sind, gilt für  $\xi \in \mathbb{R}^d$

$$\min\{\lambda_{\text{AM},\parallel}(M_2), \lambda_{\text{AM},\perp}(M_2)\}|\xi|^2 \leq \lambda_{\text{AM}}(x, T)\xi \cdot \xi \leq \max\{\lambda_{\text{AM},\parallel}(M_1), \lambda_{\text{AM},\perp}(M_1)\}|\xi|^2.$$

Daraus folgt  $\lambda \in \mathcal{M}(\Omega, \theta, \Theta)$  mit

$$\theta = \min\{\lambda_{AM,\parallel}(M_2), \lambda_{AM,\perp}(M_2), \lambda_{CCC}, \lambda_{ACC}\} \approx 1.$$

und

$$\Theta = \max\{\lambda_{AM,\parallel}(M_1), \lambda_{AM,\perp}(M_1), \lambda_{CCC}, \lambda_{ACC}\} \approx 400.$$

Außerdem gelten für  $T_1, T_2 \in [M_1, M_2]$  wie im Anhang C

$$|\lambda_{AM,\parallel}(x, T_1) - \lambda_{AM,\parallel}(x, T_2)| = |-0.0015(T_1 - T_2)| \leq 0.0015|T_1 - T_2|$$

und mit

$$|\lambda_{AM,\perp}(x, T_1) - \lambda_{AM,\perp}(x, T_2)| = |-1.4425 \cdot 10^{-4}(T_1 - T_2)| \leq 1.4425 \cdot 10^{-4}|T_1 - T_2|.$$

Somit ist  $\lambda$  in jeder Komponente Lipschitz-stetig in  $T$  mit Lipschitz-Konstante  $C_L = 0.0015$  und Bedingung (6.2) ist erfüllt. Für die Ableitung von  $\rho c_p$  nach  $T$  gilt für  $x \in \Omega$  nach Gleichung (3.4) analog zu Anhang C

$$\frac{\partial}{\partial u}(\rho(x) c_p(x, T)) = \rho(x)(1.0257 \cdot 10^{-4}T + 2.5216).$$

Da  $\rho > 0$  gilt, ist dieser Ausdruck für  $T \in [M_1, M_2]$  für jedes  $x \in \Omega$  positiv. Somit ist das Produkt  $\rho c_p$  über  $[M_1, M_2]$  in der zweiten Variable monoton wachsend. Daraus folgt, dass das Minimum von  $\rho c_p$  in  $M_1$  und das Maximum in  $M_2$  angenommen wird. Somit gilt

$$1.87 \cdot 10^6 \approx \rho_{AM} c_p(x, 259.5) \leq \rho(x) c_p(x, T) \leq \rho_{AM} c_p(x, 343.15) \approx 2.4 \cdot 10^6. \quad (7.2)$$

Daraus folgt, dass  $\Lambda_1 \leq \rho c_p \leq \Lambda_2$  mit

$$\Lambda_1 = \min\{1.87 \cdot 10^6, \rho_{CCC} c_{p,CCC}, \rho_{ACC} c_{p,ACC}\} \approx 1.87 \cdot 10^6$$

und mit

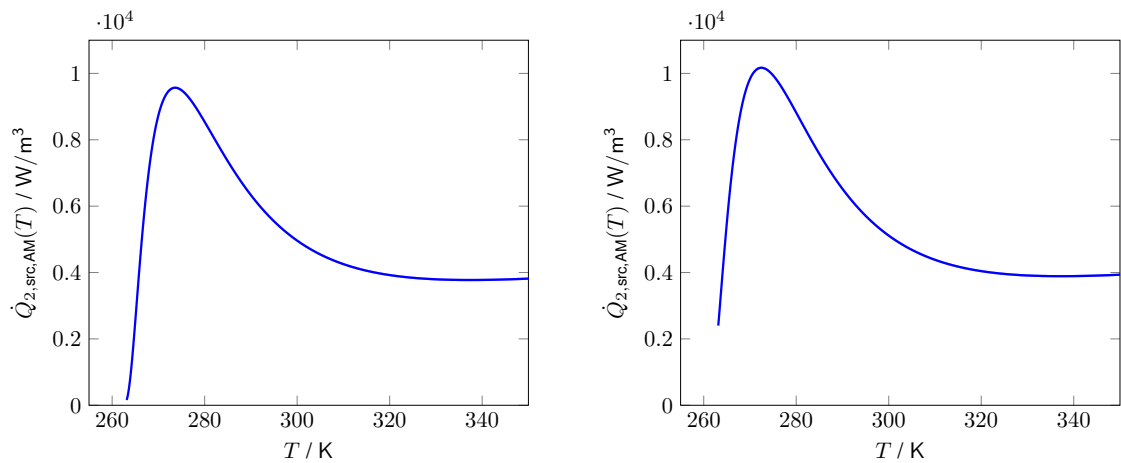
$$\Lambda_2 = \max\{2.4 \cdot 10^6, \rho_{CCC} c_{p,CCC}, \rho_{ACC} c_{p,ACC}\} \approx 3.4 \cdot 10^6$$

gilt ist und die Bedingungen (6.3) und (6.4) erfüllt sind. Da  $\dot{Q}_{1,src,AM}$  schichtweise konstant ist und als Anfangsbedingung in dieser Arbeit entweder konstante oder polynomielle Temperaturverläufe gewählt werden, ist auch Bedingung (6.5) erfüllt.

Falls der Wärmequellterm  $\dot{Q}_{2,src,AM}$  betrachtet wird, also falls  $\dot{Q}_{src}$  nichtlinear in  $T$  ist, wird wieder  $\rho(x) c_p(x, T) T$  als  $b^\epsilon(x, T)$  und  $\lambda(x, T)$  als  $a^\epsilon(x, T)$  identifiziert. Jedoch wird nach Gleichung (6.36) das Produkt  $(\rho(x) c_p(x, T) - \Delta t \dot{Q}_{2,src,AM}(x, T) T)$  als  $\widehat{b}^\epsilon(x, T)$  und  $(\rho(x) c_p(x, T) - \frac{\Delta t}{T} \dot{Q}_{2,src,AM}(x, T))$  als  $\widehat{b}^{\star,\epsilon}(x, T)$  bestimmt. Dabei ist  $\Delta t$  der beim impliziten Euler-Verfahren verwendete Zeitschritt. Wie es im Fall von  $\dot{Q}_{1,src,AM}$  gezeigt wurde, erfüllt  $\lambda$  die notwendigen



Bedingungen und  $\rho c_p$  ist monoton wachsend über  $[M_1, M_2]$ . Es bleibt noch die Beschränktheit von  $\widehat{b}^{\star, \epsilon}$  nach unten und nach oben für  $T \in [M_1, M_2]$  und  $x \in \Omega$  zu zeigen. Abbildung 7.1 zeigt für beide in dieser Arbeit betrachteten Fälle  $\dot{Q}_{2, \text{src}, \text{AM}}$  mit den Parametern aus Anhang A. Es wird festgestellt, dass  $\dot{Q}_{2, \text{src}, \text{AM}}$  über  $[M_1, M_2]$  für beide Fälle nach unten durch 100 und nach oben durch  $1.5 \cdot 10^5$  beschränkt ist. Diese Tatsache lässt sich auch mit Hilfe von Extremwertberechnungen nachprüfen. Abbildung 7.1 zeigt die Notwendigkeit des nichtlinearen Quellterms, da dieser für niedrigere Temperaturen ungefähr um den Faktor zwei größer ist als für höhere Temperaturen. Da nach Gleichung (7.2)  $\rho c_p$  sowohl nach unten durch  $1.87 \cdot 10^6$  als auch nach oben durch  $8.4 \cdot 10^6$  beschränkt ist, ist auch  $\rho c_p - \frac{\Delta t}{T} \dot{Q}_{2, \text{src}, \text{AM}}$  sowohl nach unten als auch nach oben für jedes hinreichend kleine  $\Delta t > 0$  beschränkt. Eine obere Schranke für  $\Delta t$  ergibt sich dann aus der Bedingung  $\rho c_p - \frac{\Delta t}{T} \dot{Q}_{2, \text{src}, \text{AM}} > 0$ . Daraus folgt  $\Delta t < 10^3$ . Damit sind Bedingungen (6.3) und (6.4) auch für diesen Fall für  $0 < \Delta t < 10^3$  erfüllt. Somit wurden alle für die Existenz des homogenisierten Problems notwendigen Bedingungen aus Kapitel 6 an die Koeffizienten nachgeprüft und die Methode aus Kapitel 6 kann angewendet werden.



(a)  $\dot{Q}_{2, \text{src}, \text{AM}}(T)$  für homogene Dirichlet-Randbedingungen.

(b)  $\dot{Q}_{2, \text{src}, \text{AM}}(T)$  für inhomogene Dirichlet-Randbedingungen.

Abbildung 7.1.: Der Wärmequellterm  $\dot{Q}_{2, \text{src}, \text{AM}}$  für die beiden in dieser Arbeit betrachteten Dirichlet-Randbedingungen.

Um die semidiskrete homogenisierte Gleichung aufstellen zu können, werden die homogenisierten Koeffizienten berechnet. Nach Gleichung (6.15) und Gleichung (6.14) gilt

$$\begin{aligned}
 (\rho c_p)^0(T) & \int_{\epsilon Y} \rho(x) c_p(x, T) dx \\
 & = \frac{1}{\epsilon} \left( \int_0^{h_{\text{ACC}}} \rho_{\text{ACC}} c_{p,\text{ACC}} dx + \int_{h_{\text{ACC}}}^{h_{\text{ACC}}+h_{\text{AM}}} \rho_{\text{AM}} c_{p,\text{AM}}(x, T) dx \right. \\
 & \quad \left. + \int_{h_{\text{ACC}}+h_{\text{AM}}}^{h_{\text{ACC}}+h_{\text{AM}}+h_{\text{CCC}}} \rho_{\text{CCC}} c_{p,\text{CCC}} dx + \int_{h_{\text{ACC}}+h_{\text{AM}}+h_{\text{CCC}}}^{\epsilon} \rho_{\text{AM}} c_{p,\text{AM}}(x, T) dx \right) \\
 & = \frac{1}{\epsilon} \left( h_{\text{ACC}} \rho_{\text{ACC}} c_{p,\text{ACC}} + h_{\text{CCC}} \rho_{\text{CCC}} c_{p,\text{CCC}} + 2h_{\text{AM}} \rho_{\text{AM}} c_{p,\text{AM}}(T) \right).
 \end{aligned} \tag{7.3}$$

Analog werden

$$\begin{aligned}
 \dot{Q}_{1,\text{src}}^0(T) & = \int_{\epsilon Y} \dot{Q}_{1,\text{src}}(x, T) dx \\
 & = \int_{h_{\text{ACC}}}^{h_{\text{ACC}}+h_{\text{AM}}} \dot{Q}_{1,\text{src,AM}}^0(x, T) dx + \int_{h_{\text{ACC}}+h_{\text{AM}}+h_{\text{CCC}}}^{\epsilon} \dot{Q}_{1,\text{src,AM}}^0(x, T) dx \\
 & = \frac{1}{\epsilon} 2h_{\text{AM}} \dot{Q}_{1,\text{src,AM}}(T) = \frac{6}{\epsilon} \frac{h_{\text{AM}}}{|V_{\text{AM}}|}
 \end{aligned} \tag{7.4}$$

und

$$\begin{aligned}
 \dot{Q}_{2,\text{src}}^0(T) & = \int_{\epsilon Y} \dot{Q}_{2,\text{src}}(x, T) dx \\
 & = \int_{h_{\text{ACC}}}^{h_{\text{ACC}}+h_{\text{AM}}} \dot{Q}_{2,\text{src,AM}}^0(x, T) dx + \int_{h_{\text{ACC}}+h_{\text{AM}}+h_{\text{CCC}}}^{\epsilon} \dot{Q}_{2,\text{src,AM}}^0(x, T) dx \\
 & = \frac{1}{\epsilon} 2h_{\text{AM}} \dot{Q}_{2,\text{src,AM}}(T)
 \end{aligned} \tag{7.5}$$

berechnet. Für die letzten Gleichheit bei der Berechnung von  $\dot{Q}_{1,\text{src}}^0$  wurde Gleichung (3.6) verwendet. Die Ausdrücke in den Gleichungen (7.3), (7.4) und (7.5) können für ein gegebenes  $\epsilon$ , wie es beim Batterieproblem (7.1) der Fall ist, explizit berechnet werden. Damit kann die semidiskrete homogenisierte Gleichung für  $n \in \{1, \dots, N\}$  analog zu Kapitel 6.2 unter Verwendung des impliziten Euler-Verfahrens mit der Näherung

$$\partial_t((\rho c_p)^0(T^{0,n})T^{0,n}) \approx \frac{(\rho c_p)^0(T^{0,n})T^{0,n} - (\rho c_p)^0(T^{0,(n-1)})T^{0,(n-1)}}{\Delta t}$$

mit

$$T^{0,0}(x) := T_0(x) \quad \text{für alle } x \in \Omega$$

als

$$\partial_t((\rho c_p)^0(T^{0,n})T^{0,n}) - \nabla \cdot (\lambda^0(T^{0,n})\nabla T^{0,n}) = \dot{Q}_{\text{src}}^0(T^{0,n}) \quad \text{für alle } x \in \Omega \quad (7.6)$$

geschrieben werden. Dabei ist, wie auch in Kapitel 6.2,  $\lambda^0$  der homogenisierte Koeffizient, der analytisch im Allgemeinen nicht berechnet werden kann. Um Gleichung (7.6) in jedem Zeitschritt mit der FE-HMM zu lösen, werden analog zu Kapitel 6.1.2 für  $z^H \in \mathcal{V}_{\text{FE}}^1(\Omega, \mathcal{T}_H)$  die Linearform

$$F_{H,\text{Bat}}^0(z^H) := \int_{\Omega} (\rho c_p)^0(T^{0,(n-1)}(x))T^{0,(n-1)}(x)z^H(x) dx$$

und die Bilinearform

$$\begin{aligned} B_{H,\text{Bat}}(v^H; \tilde{v}^H, z^H) &:= \int_{\Omega} \left( (\rho c_p)^0(v^H(x))\tilde{v}^H(x) - \dot{Q}_{\text{src}}^0(\tilde{v}^H(x)) \right) z^H(x) dx \\ &+ \sum_{K \in \mathcal{T}_H} \sum_{j=1}^J \omega_{K,j} \lambda_{K,j}^0(v^H(x_{K,j})) \nabla \tilde{v}^H(x_{K,j}) \cdot \nabla z^H(x_{K,j}) \end{aligned} \quad (7.7)$$

definiert. Dabei wird  $\lambda_{K,j}^0$  nach Gleichung (5.12) berechnet. Damit wird in jedem Zeitschritt, also für  $n \in \{1, \dots, N\}$ , die Lösung von

$$B_{H,\text{Bat}}(T^{0,n,H}; T^{0,n,H}, z^H) = F_{H,\text{Bat}}^0(z^H) \quad \text{für alle } z^H \in \mathcal{V}_{\text{FE}}^1(\Omega, \mathcal{T}_H) \quad (7.8)$$

gesucht. Falls für  $\dot{Q}_{\text{src}}$  der konstante Ausdruck  $\dot{Q}_{1,\text{src}}$  verwendet wird, ist in Gleichung (7.4) der Term  $\dot{Q}_{1,\text{src}}^0$  konstant und kann statt der Bilinearform der Linearform zugeordnet werden.

## 7.2. Ergebnisse – Stack

In diesem Kapitel wird untersucht, ob es von Vorteil ist, die in den Kapiteln 5 und 6 entwickelte Methode auf das Batterieproblem (7.1) anzuwenden. Dazu wird zunächst festgelegt, in welchem Sinne die Anwendung sich lohnen soll und die Kriterien dafür definiert. Danach wird nur der Stack der Batterie, also der Teil der Batterie, in dem sich die verschiedenen Schichten befinden, mit verschiedenen Randbedingungen nach den festgelegten Kriterien untersucht. Es werden drei Methoden verglichen: Die Standard-FEM mit Ordnung  $p = 1$ , die FE-HMM und die *layered Battery FOAM* (LBF). Letztere ist im Rahmen einer vom Autor betreuten HiWi-Tätigkeit entstanden, basiert auf der FVM, wurde in OpenFOAM entwickelt und in [136] für den Fall von linearen Koeffizienten vorgestellt. Für den Vergleich wird die Schichtzahl bei derselben Höhe der Zelle variiert. Es werden außer der realen Zelle mit  $N = 133$  Schichten, die Schichtzahlen  $N = 73$  und  $N = 265$  betrachtet. Das bedeutet eine

Änderung der Parameters  $\epsilon$ , die der Dicke der Einheitszelle der Batterie entspricht. Aus den Werten aus Anhang A kann dieser als

$$\begin{aligned}\epsilon_{73} &= 0.000463694, \\ \epsilon_{133} &= 0.0002255, \\ \epsilon_{265} &= 0.000112917\end{aligned}\tag{7.9}$$

berechnet werden. Für die reale Zelle, also im Fall  $N = 133$ , wird außerdem das Konvergenzverhalten für verschiedene Verfeinerungen des Mikro- und Makro-Gitters untersucht. Es wird der Frage nachgegangen, ob für das Batterierproblem (7.1) auch die simultane Verfeinerung des Mikro- und Makro-Gitters, in einem noch zu definierenden Sinne, die beste Resultate liefert. Dies war in Kapitel 5.2 und Kapitel 6.1.3 für die Testprobleme, dessen Lösung und Koeffizienten die gestellten Bedingungen erfüllten, der Fall.

In den Kapiteln 5 und 6 wurden Testprobleme, deren homogenisierte Gleichungen eine analytische Lösung besitzen, betrachtet. Anhand diesen wurde das Konvergenzverhalten der entwickelten Methoden untersucht. Für das Batterieproblem (7.1) existiert das homogenisierte Problem explizit nicht, d.h. die Koeffizienten können nicht explizit angegeben werden. Somit existiert auch keine dazugehörige analytische Lösung. Deshalb ist das in den Kapiteln 5 und 6 angewendete Vorgehen hier nicht anwendbar. Aus demselben Grund lässt sich auch keine numerische Referenzlösung für das homogenisierte Problem berechnen. Allerdings gilt nach [95, Kap. 1.4] im elliptischen Fall unter Regularitätsvoraussetzungen an die Lösung des nicht homogenisierten,  $T^\epsilon$ , und des homogenisierten Problem,  $T^0$ ,

$$\|T^\epsilon - T^0\|_{\mathcal{L}^2(\Omega)} \leq C\epsilon.$$

Diese Aussage lässt sich mit Hilfe einer asymptotischen Entwicklung, wie es in Kapitel 4.2.2 vorgeführt wurde, zeigen. Falls die Bedingungen (4.36)–(4.41) aus Kapitel 4.3.4 erfüllt sind, folgt daraus mit der Dreiecksungleichung und den in Kapitel 4.3.4 vorgestellten Fehlerabschätzungen (4.42) für  $p = q = 1$  und für die Lösung des homogenisierten Problems  $T^H$

$$\begin{aligned}\|T^\epsilon - T^H\|_{\mathcal{L}^2(\Omega)} &= \|T^\epsilon - T^0 + T^0 - T^H\|_{\mathcal{L}^2(\Omega)} \\ &\leq \|T^\epsilon - T^0\|_{\mathcal{L}^2(\Omega)} + \|T^0 - T^H\|_{\mathcal{L}^2(\Omega)} \leq C\left(\epsilon + H^2 + h/\epsilon^2\right).\end{aligned}\tag{7.10}$$

Wie auch schon die für die erste Abschätzung notwendige Bedingungen, beinhalten auch die Bedingungen (4.36)–(4.41) Regularitätsbedingungen an die homogenisierte Lösung und an die homogenisierten Koeffizienten, die in den Anwendungen in der Regel nicht erfüllt sind. Somit kann die Ordnung zwei aus der Ungleichung (7.10) nicht erwartet werden. Allerdings bedeutet diese Ungleichung, dass die mit der FE-HMM berechnete Lösung  $T^H$  und die Lösung des nicht homogenisierten Problems  $T^\epsilon$  für  $\epsilon, H, h/\epsilon \rightarrow 0$  gegeneinander konvergieren. Da auch die mit der Standard-FEM in *deal.II* und der FVM in OpenFOAM berechneten Lösungen des nicht homogenisierten Problems für  $H < \epsilon$  und  $H \rightarrow 0$  gegen  $T^\epsilon$  konvergieren, wie es in Kapitel 4.1 gezeigt wurde, können diese drei Lösungen anhand des  $\mathcal{L}^2$ -Fehler bezüglich  $T^\epsilon$  verglichen

werden. Der Grund für die Wahl der  $\mathcal{L}^2$ -Norm ist, dass für die  $\mathcal{H}^1$ -Norm  $T^\epsilon \rightarrow T^0$  für  $\epsilon \rightarrow 0$  nicht gilt, da die Gradienten der Oszillation auf der feinen Skala von  $T^0$  nicht erfasst werden. Um diese auch zu erfassen und somit eine starke Konvergenz in der  $\mathcal{H}^1$ -Norm zu erreichen, werden sogenannte Korrektoren benötigt. Diese beinhalten Informationen über die feine Skala und können mit demselben Rechenaufwand wie die homogenisierte Lösung berechnet werden. Sie werden unter anderem in [5, Kap. 3.3.3] diskutiert, wo auch ihre Definition gegeben und aus Folge dessen der genannte Rechenaufwand begründet wird. Da das Ziel dieser Arbeit die effiziente Berechnung der homogenisierten Lösung des Batterieproblems (7.1) ist, werden diese Korrektoren hier nicht berücksichtigt und somit wird der Fehler bezüglich der  $\mathcal{L}^2$ -Norm betrachtet.

Die Idee für den Vergleich von  $T^\epsilon$  und  $T^0$  im elliptischen Fall wird auf das Batterieproblem übertragen. Da dieses ein zeitabhängiges Problem ist, würde in der Fehlerabschätzung auch der Fehler des in Kapitel 6.2 diskutierten Impliziten-Euler-Verfahren vorkommen. Allerdings ist hier hauptsächlich der räumliche Fehler von Interesse. Deshalb wird für die zeitliche Diskretisierung aller drei Methoden ein solcher Zeitschritt verwendet, dass der Fehler vom räumlichen Fehler dominiert wird. Wie dieser gewählt wird, wird nachdem die Fehlergrenze für den räumlichen Fehler festgelegt wurde, bestimmt. Da neben dem homogenisierten auch das nicht homogenisierte Problem keine bekannte analytische Lösung besitzt, wird als Referenzlösung eine hochaufgelöste Standard-FEM-Lösung höherer Ordnung verwendet. Um bei jeder betrachteten Zelle, also mit  $N = 73$ ,  $N = 133$  und  $N = 265$  Schichten, jede Schicht aufzulösen, wird für die Referenzlösung das Gitter in beide Raumrichtungen elfmal halbiert, woraus sich die normierte Gitterweite

$$h_{\text{Ref,norm}} := \frac{h_{\text{Ref}}}{\text{diam}(\Omega_{\text{Stack}})} = 2^{-11} \quad (7.11)$$

mit der Gitterweite der Referenzlösung  $h_{\text{Ref}}$  und dem Durchmesser des Stacks  $\text{diam}(\Omega_{\text{Stack}})$  ergibt. Dabei wird das Gebiet  $\Omega_{\text{Stack}}$  in Gleichung (A.1) definiert. Außerdem wird als Finite-Elemente-Ordnung  $p = 3$  verwendet.

Es ist wichtig zu erwähnen, dass die Konvergenz in Gleichung (7.10) unter den notwendigen Bedingungen nur für  $\epsilon, H, h \rightarrow 0$  gilt. Deshalb wird der Fehler für ein festes  $\epsilon > 0$ , wie es z.B. beim Batterieproblem (7.1) gewählt wird, nicht beliebig klein. Allerdings wird das auch nicht benötigt, da der Fehler nur eine gewisse Schranke unterschreiten soll. Diese wird anhand der Anwendungen bestimmt. Am TVT am KIT, auf dessen Arbeiten das Batteriemodell aus Kapitel 3 basiert, werden zur Messung der Temperatur der Batterien oft Thermoelemente vom Typ K [135, Kap. 1–2] verwendet. Diese sind nach [135, Tabelle 12] bis auf 1.5 K genau. Sie werden am TVT so kalibriert, dass sie eine Genauigkeit von annähernd 0.1 K erreichen [118]. Wird dieser Wert als Fehlerwert über den ganzen Stack angenommen, ergibt sich daraus mit der Raumtemperatur 298.15 K (25 °C), der in vielen Anwendungsfällen als Anfangswert

dienen wird, als Referenzwert ein relativer Fehler von

$$\text{err}_{\mathcal{L}^2, \text{rel}} := \frac{\left( \int_{\Omega_{\text{Stack}}} 0.1 \, dx \right)^{\frac{1}{2}}}{\left( \int_{\Omega_{\text{Stack}}} 298.15 \, dx \right)^{\frac{1}{2}}} = 0.00033. \quad (7.12)$$

Mit der Betrachtung des relativen Fehlers wird erreicht, dass der Fehler unabhängig von der genauen Geometrie ist. Da in den Anwendungen der maximale Fehler auch von Interesse ist und dieser bei einem kleinen relativen  $\mathcal{L}^2$ -Fehler beliebig groß werden kann, wird zusätzlich zum relativen  $\mathcal{L}^2$ -Fehler auch der  $\mathcal{L}^\infty$ -Fehler betrachtet. Dieser soll kleiner als die Messgenauigkeit der Thermoelemente sein, also kleiner als 0.1 K. Somit gilt

$$\text{err}_{\mathcal{L}^\infty} := 0.1. \quad (7.13)$$

Das bedeutet, dass punktuell große Abweichungen vermieden werden. Somit ist das am Anfang des Kapitels erwähnte Kriterium: Ein relativer  $\mathcal{L}^2$ -Fehler kleiner als 0.00033, vergleiche Gleichung (7.12), und ein  $\mathcal{L}^\infty$ -Fehler kleiner als 0.1, vergleiche Gleichung (7.13), bezüglich der Referenzlösung. Die Lösungen der drei Methoden werden bezüglich der Rechenzeit verglichen, die benötigt wird, um dieses Kriterium zu erreichen. Um nur dem räumlichen Fehler betrachten zu können, wird der Zeitschritt so gewählt, dass der Gesamtfehler, mindestens so lange bis dieses Kriterium nicht erreicht wird, vom Ersteren dominiert wird. Somit wird hier der normierte Zeitschritt  $\widetilde{\Delta t} = \frac{\Delta t}{t_{\text{end}}} = 10^{-4}$ , vergleiche Gleichung (6.39), gewählt. Sie wird während des ganzen Kapitels verwendet. Mit diesem Zeitschritt wird sowohl die Referenzlösung, als auch die Lösungen der drei Methoden berechnet. Es wird ein Zeitraum von 10 s simuliert, es gilt also  $t_{\text{end}} = 10$  s. Das Im Folgenden wird für zwei verschiedene Kühlmöglichkeiten, die über die Randbedingungen umgesetzt werden, untersucht ob sich die Anwendung der FE-HMM für das Batterieproblem (7.1) lohnt. Da bei diesen nur der Quellterm  $\dot{Q}_{2, \text{src}, \text{AM}}$  aus Gleichung (3.6) gültig ist, wird in dem ganzen Kapitel dieser verwendet.

In diesem Kapitel werden Punkte in  $\mathbb{R}^d$  für  $d = 2$  als  $x = (X, Y)$  und für  $d = 3$  als  $x = (X, Y, Z)$  dargestellt.

### 7.2.1. Bodenkühlung

Als erstes wird der Fall der Bodenkühlung des Stacks durch eine Kühlplatte untersucht. Dies entspricht am ganzen unteren Rand, d.h. bei  $Y = 0$ , konstanten Dirichlet-Randbedingungen und an allen anderen Teilen des Randes homogenen Neumann-Randbedingungen, vergleiche Abbildung 7.2. Die Anfangstemperatur  $T_0$  beträgt konstant 298 K, was einer Raumtemperatur von 24.85 °C entspricht. Somit gelten für das betrachtete Gebiet  $\Omega_{\text{Stack}}$  aus Gleichung (A.1)

$$\begin{aligned} \partial\Omega_{\text{D}, \text{Boden}, \text{Stack}} &:= [0, 0.112] \times \{0\}, \\ \partial\Omega_{\text{N}, \text{Boden}, \text{Stack}} &:= \partial\Omega \setminus \partial\Omega_{\text{D}, \text{Boden}, \text{Stack}} \end{aligned} \quad (7.14)$$

sowie

$$\begin{aligned}
 T_{\text{BC}}(t, x) &= 293.15 && \text{für alle } (t, x) \in (0, t_{\text{end}}) \times \partial\Omega_{\text{D},\text{Boden},\text{Stack}}, \\
 \dot{Q}_{\text{BC}}(t, x) &= 0 && \text{für alle } (t, x) \in (0, t_{\text{end}}) \times \partial\Omega_{\text{N},\text{Boden},\text{Stack}}, \\
 T_0(x) &= 298 && \text{für alle } x \in \Omega_{\text{Stack}}.
 \end{aligned} \tag{7.15}$$

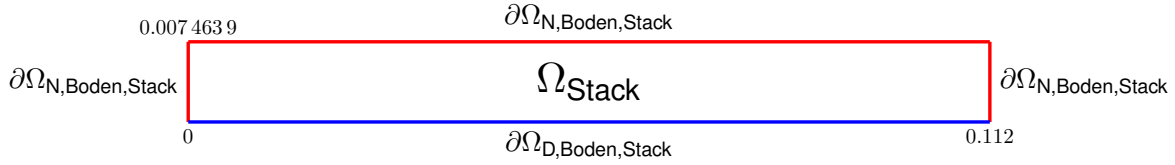


Abbildung 7.2.: Das Gebiet  $\Omega_{\text{Stack}}$  mit dem entsprechend für den Fall der Bodenkühlung aufgeteilten Rand.

Gleichung (7.15) zeigt, dass die Anfangsbedingung die Randbedingungen nicht erfüllt. Um dies zu gewährleisten wird die Anfangsbedingung modifiziert. Es wird in einer  $\epsilon$  hohen Schicht durch ein Polynom dritten Grades ersetzt. Somit wird

$$\tilde{T}_{0,\text{Boden}}(x) := \begin{cases} T_0(x) + cY^2 + dY^3, & Y \leq \epsilon, \\ T_0(x), & \text{sonst,} \end{cases} \tag{7.16}$$

mit  $c = 3 \frac{T_0(x) - T_{\text{BC}}(t,x)}{\epsilon^2}$  und  $d = -2 \frac{T_0(x) - T_{\text{BC}}(t,x)}{\epsilon^3}$  definiert. Dieser Anfangswert erfüllt die Randbedingungen, ist stetig und seine Normalenableitung am Dirichlet-Rand ist gleich Null. Die letzte Tatsache wird in Kapitel 7.3 verwendet, wo nicht am kompletten unteren Rand Dirichlet-Randbedingungen aufgeprägt werden.

Abbildung 7.3 zeigt die Referenzlösung für den Stack mit 133 Schichten nach  $t = 10$  s mit dem normierten Zeitschritt  $\tilde{\Delta}t = 10^{-4}$  und soll als Veranschaulichung des Abkühlungsprozesses dienen. Dabei wurden die Rand- und Anfangsbedingungen aus den Gleichungen (7.15) und (7.16) verwendet.

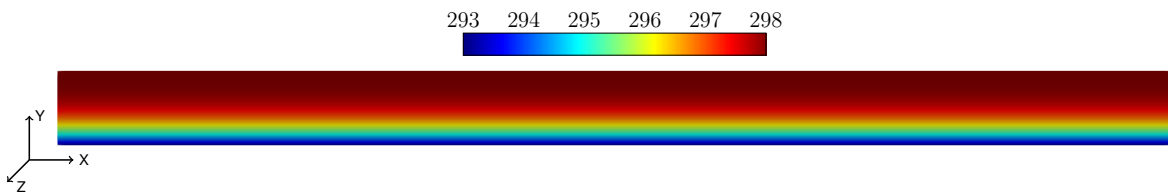


Abbildung 7.3.: Referenzlösung mit  $\tilde{\Delta}t = 10^{-4}$  und  $h_{\text{Ref, Norm}} = 2^{-11}$  des Batterieproblems (7.1) für den Stack mit  $N = 133$  Schichten, d.h.  $\epsilon_{133} = 0.0002255$  und  $\Omega_{\text{Stack}}$ , für die Bodenkühlung, d.h.  $\partial\Omega_{\text{D}} = \partial\Omega_{\text{D},\text{Boden},\text{Stack}}$  und  $\partial\Omega_{\text{N}} = \partial\Omega_{\text{N},\text{Boden},\text{Stack}}$  aus Gleichung (7.14) sowie die Rand- und Anfangsbedingungen aus den Gleichungen (7.15) und (7.16) bei  $t = 10$  s.

Abbildung 7.4a zeigt den Verlauf der Referenzlösung in der Mitte des Stacks in Y-Richtung. Es ist zu erkennen, dass der Stack ausgehend von dem unteren Rand abkühlt, wobei die Abkühlung durch den Quellterm, also der Wärmezeugung in der Batterie, verlangsamt wird. Wie groß der Einfluss des Quellterms ist, wird in Kapitel 7.3 untersucht. Der Verlauf der Referenzlösung in der Mitte der Batterie wird in Abbildung 7.4b näher angeschaut. Dort sind die wegen der Schichten, bzw. wegen der unterschiedlichen Materialeigenschaften dieser, auftretenden Oszillationen zu erkennen. Die Wärmeleitfähigkeit, vergleiche Tabelle A.2 und Formel (3.4), ist in den dünneren Ableiterschichten deutlich größer als im Aktivmaterial. Deshalb wird dort die Wärme besser geleitet. Aus diesem Grund bildet sich dort kein bzw. nur ein kleiner Temperaturgradient, was in diesen Schichten zu einer nahezu konstanten Temperatur führt. Diese Oszillationen werden zwar von der FE-HMM-Lösung, wie es in Abbildung 7.5 zu sehen ist, nicht abgebildet. Jedoch wird der Verlauf, also die Lösung des homogenisierten Problems, unter Berücksichtigung der Wärmeleitfähigkeit der verschiedenen Schichten durch die Mikrolösungen wiedergegeben. Die FE-HMM-Lösung wurde mit der Makro- und Mikro-Gitterweite, die für das Unterschreiten der Fehlerschranken notwendig ist und im nächsten Abschnitt diskutiert wird, berechnet.

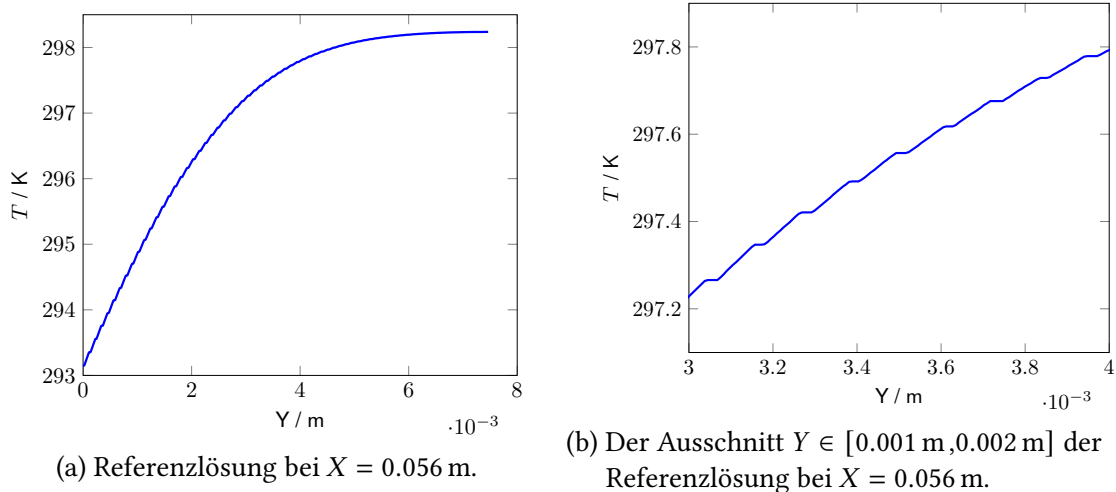


Abbildung 7.4.: Die in Abbildung 7.3 dargestellte Referenzlösung des Batterieproblems (7.1) in Y-Richtung für Bodenkühlung bei  $t = 10$  s für den Stack mit  $N = 133$  Schichten bei  $X = 0.056$  m, Abbildung 7.4a, und der Ausschnitt  $Y \in [0.003 \text{ m}, 0.004 \text{ m}]$ , Abbildung 7.4b, davon.

Tabelle 7.1 zeigt die durchschnittliche Gesamtrechnzeit pro Zeitschritt, die Anzahl der Freiheitsgrade (Dofs), im Falle der FE-HMM die Anzahl der Makro-Freiheitsgrade, und die durchschnittliche Anzahl der CG-Schritte pro Newton-Iteration, die bei den verschiedenen Methoden, um die genannten Fehlergrenzen aus den Gleichungen (7.12) und (7.13) bezüglich der Referenzlösung bei  $t = 10$  s mit einem normierten Zeitschritt  $\Delta t = 10^{-4}$ , zu unterschreiten, benötigt werden. Für die FE-HMM wurde für die Verfeinerung des Makro- und Mikro-Gitters die simultane Verfeinerung, also  $h/\epsilon = H$ , gewählt, da dies für die Testprobleme in Kapitel 5.2



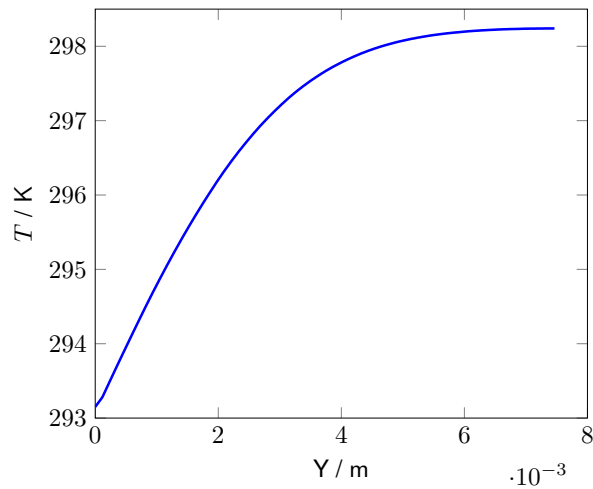


Abbildung 7.5.: Die mit  $\widetilde{\Delta t} = 10^{-4}$  und  $h/\epsilon = H_{\text{norm}} = 2^{-4}$  homogenisierte Lösung des Batterieproblems (7.1) in Y-Richtung für Bodenkühlung bei  $t = 10$  s für den Stack mit  $N = 133$  Schichten, d.h.  $\epsilon_{133} = 0.0002255$ , bei  $X = 0.056$  m.

optimale Ergebnisse geliefert hat. Ob mit einer anderen Verfeinerungsstrategie bessere Ergebnisse erreicht werden können, wir später in diesem Kapitel untersucht. Um die Fehlergrenzen zu unterschreiten, wurden bei der Standard-FEM- und der LBF-Lösung bei  $N = 73$  Schichten 8, bei der Standard-FEM bei  $N = 133$  Schichten 9 und bei  $N = 265$  Schichten 10 Halbierungen des Gitters benötigt, bei der FE-HMM-Lösung immer nur 4. Dies entspricht bei den Ersteren Verfahren der normierten Gitterweite, vergleiche Gleichung (7.11),  $h_{\text{norm}} = 2^{-8}$ ,  $h_{\text{norm}} = 2^{-9}$  und  $h_{\text{norm}} = 2^{-10}$ , beim Letzteren  $H_{\text{norm}} = 2^{-4}$ . Daraus folgen die Anzahl der Freiheitsgrade die in Tabelle 7.1 zu sehen sind. An der Tabelle ist es erkennen, dass sogar bei einer Schichtzahl von  $N = 73$  die FE-HMM-Lösung ungefähr genauso schnell wie die Standard-FEM-Lösung zu berechnen ist. Bei einer höheren Schichtzahl ist die FE-HMM schneller. Im Vergleich dazu ist die LBF für  $N = 73$  Schichten schneller als die anderen Löser. Das liegt daran, dass bei der LBF nichtlineare Probleme linearisiert werden und damit kein Newton-Verfahren zum Lösen des nichtlinearen Problems verwendet wird. Das führt einerseits zu der kurzen Rechenzeit die bei  $N = 73$  zu beobachten ist, andererseits dazu, dass in den anderen Fällen die vorgegebene Fehlerschranken, vergleiche Gleichung (7.12) und Gleichung (7.13), auch mit einer höheren Auflösung des Gitters nicht unterschritten werden können. Dieses Problem könnte mit der Wahl von kleineren Zeitschritten umgangen werden. Dies wird aber in dieser Arbeit nicht betrachtet.

Tabelle 7.1.: Benötigte durchschnittliche Gesamtrechenzeit pro Zeitschritt in Sekunden sowie Anzahl der CG-Schritte pro Newton-Iteration (CG) und Anzahl der Freiheitsgrade (Dofs), um bei verschiedenen Methoden den vorgegebenen  $\mathcal{L}^2$ - und  $\mathcal{L}^\infty$ -Fehler, vergleiche Gleichung (7.12) und Gleichung (7.13), bezüglich der Referenzlösung des Batterieproblems (7.1) bei gegebener Schichtzahl  $N$  und Bodenkühlung zu erreichen.

Methode	$N=73$			$N=133$			$N=265$		
	Zeit	Dofs	CG	Zeit	Dofs	CG	Zeit	Dofs	CG
LBF	0.416	65536	16	-	-	-	-	-	-
FEM	2.255	66049	27	14.707	263169	64	89.312	1050625	123
FE-HMM	2.11	289	2	2.262	289	2	3.11	289	2

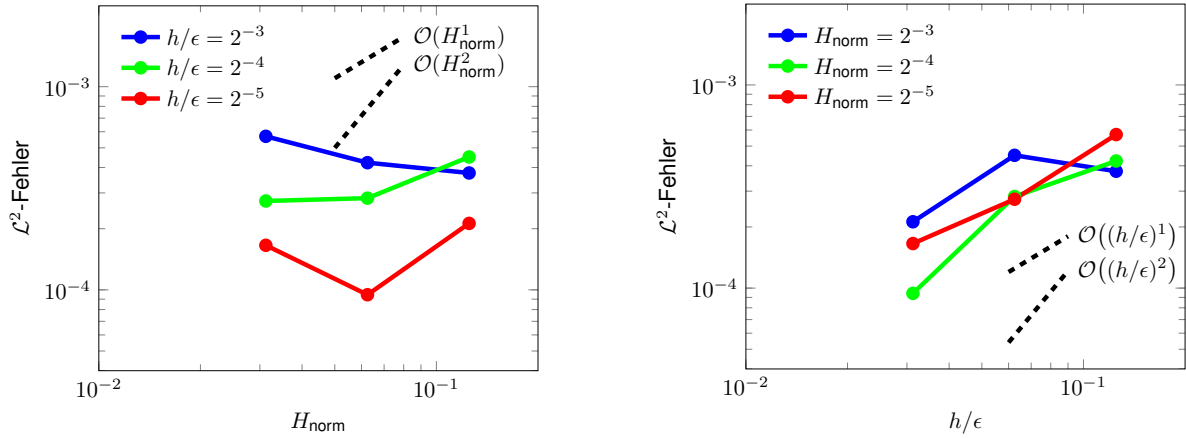
Zwei wichtige Aspekte, die die Rechenzeit der Methoden beeinflussen sind die Anzahl der benötigten Newton-Iteration und die Anzahl der benötigten CG-Schritte um in einem Newton-Schritt das LGS zu lösen. Die Anzahl der Newton-Schritte ist bei der FEM und bei der FE-HMM über die Zeit konstant drei, abgesehen von der FE-HMM im Fall  $N = 265$ , dort ist sie konstant vier. Das führt auch zu der etwas längeren Rechenzeit der FE-HMM bei  $N = 265$  im Vergleich zu den anderen beiden Fällen. Aus dieser Anzahl lässt sich die quadratische Konvergenz des Newton-Verfahrens folgern. Die Anzahl der CG-Schritte wird vom verwendeten Vorkonditionierer beeinflusst. Wie es in Kapitel 5.2 diskutiert wurden, wird für die Mikroprobleme ein einziger Jacobi-Vorkonditionierer verwendet. Da das Makroproblem nur wenige Freiheitsgrade hat, führt die Verwendung eines Vorkonditionierers nur zu einer minimalen Reduzierung der Rechenzeit. Der Grund dafür ist, dass die Rechenzeit, die über die reduzierten Anzahl der CG-Schritte gewonnen wird, über die zur Berechnung des Vorkonditionierers benötigten Zeit fast ausgeglichen wird, da das Makroproblem im Gegensatz zu den Mikroproblemen nur einmal gelöst wird. Die in der Tabelle 7.1 dargestellten Werte wurden mit einem Jacobi-Vorkonditionierer für das Makroproblem berechnet. Dabei wurden im Durchschnitt zwei CG-Schritte pro Newton-Iteration benötigt. Diese Zahlen werden auch in Tabelle 7.1 dargestellt. Bei der Standard-FEM wurde auch ein Jacobi-Vorkonditionierer verwendet. Die daraus resultierende Anzahl an CG-Schritten ist auch in Tabelle 7.1 zu sehen. Bei der LBF wurde der *Preconditioned Diagonal Incomplete Cholesky* (DIC) Vorkonditionierer verwendet [81]. Dessen Anwendung führt im Vergleich zu der Standard-FEM zu einer geringeren Anzahl an CG-Schritten.

Die in Tabelle 7.1 dargestellten Ergebnisse bedeuten, dass obwohl die Oszillationen von der FE-HMM-Lösung nicht explizit abgebildet werden, die Lösung des nicht homogenisierten Problems im Sinne der Anwendungen hinreichend gut approximiert wird. Der Grund dafür ist, dass bei der Standard-FEM und bei dem LBF auch die dünnen Ableiterschichten mit dem Gitter aufgelöst werden müssen, was zu einer hohen Anzahl an Freiheitsgraden und somit zu längeren Rechenzeiten führt.

Nachdem festgestellt wurde, dass die Anwendung der FE-HMM für das reale Batterieproblem, also für  $N = 133$  Schichten und  $\epsilon_{133} = 0.0002255$ , sich lohnt, wird das Konvergenzverhalten der Methode für diesen Fall untersucht. Das Ziel ist dabei nach Möglichkeit eine bessere Verfeinerungsstrategie für die Verfeinerung des Mikro- und Makro-Gitters zu finden als die in Kapitel 4.3.4 anhand der Fehlerabschätzung (4.42) festgestellte und für Testprobleme in Kapitel 5.2 verifizierte simultane Verfeinerung. Abbildung 7.6 zeigt den relativen  $\mathcal{L}^2$ -Fehler  $\|T_{\text{ref}}^\epsilon - T^H\|_{\mathcal{L}^2(\Omega), \text{rel}}$ , also den Fehler der FE-HMM-Lösung bezüglich der Referenzlösung für verschiedene Makro- und feste Mikro-Gitterweiten, Abbildung 7.6a und umgekehrt, Abbildung 7.6b. Es wird festgestellt, dass die theoretisch erwartete Konvergenzordnung zwei in keinem der Fälle erreicht wird. Das liegt daran, dass diese Ordnung nur unter Annahmen an die homogenisierte Lösung und an den nicht explizit bekannten homogenisierten Koeffizienten gilt. Diese sind in dieser Anwendung nicht erfüllt. Weiter zeigt Abbildung 7.6a, dass bei gegebener Mikro-Gitterweite die Verfeinerung des Makro-Gitters zu kaum einer Reduzierung des Fehler führt. Im Gegensatz dazu reduziert sich für feste Makro-Gitterweiten  $H_{\text{norm}}$ , abgesehen von einem Ausreißer bei  $H_{\text{norm}} = 2^{-3}$ , der Fehler mit einer Ordnung die ungefähr eins ist. Das zeigt, dass der Ortsfehler von dem Mikrofehler, also dem Fehler der beim Lösen der Mikroprobleme entsteht, dominiert wird. Es ist wichtig zu erwähnen, dass der Fehler bei diesem konkreten Anwendungsfall, also für  $\epsilon_{133} = 0.0002255$  und der normierte Zeitschritt  $\widetilde{\Delta t} = 10^{-4}$ , für die Verfeinerung des Mikro- und Makro-Gitters in keinem der Fälle gegen Null konvergiert. Das liegt daran, dass der Fehler sowohl einen  $\epsilon$  als auch einen  $\widetilde{\Delta t} = 10^{-4}$ -Term enthält, die für kleinere  $H_{\text{norm}}$  und  $h/\epsilon$  den Fehler dominieren werden. Somit wird hier, wie es auch schon für die Berechnung für Tabelle 7.1 der Fall war, die Verfeinerung  $H = h/\epsilon = 2^{-4}$  als optimal für den Anwendungsfall identifiziert. Eine konkrete Verfeinerungsstrategie lässt sich nicht herleiten.

### 7.2.2. Tabkühlung

In dieser Arbeit wird neben der Boden- auch die Tabkühlung der Batterie untersucht. Dabei bildet sich der Temperaturgradient nicht wie bei der Bodenkühlung senkrecht, sondern hauptsächlich parallel zu den Schichten. Aus diesem Grund wird untersucht, ob und welche Auswirkung dies auf die Rechenzeiten hat, die um die Fehlergrenzen, vergleiche Gleichung (7.12) und (7.13), zu unterschreiten benötigt werden. Die Tabkühlung für den Stack, also für  $\Omega_{\text{Stack}}$ , entspricht konstanten Dirichlet-Randbedingungen am linken und rechten Rand, also bei  $X = 0$  und  $X = 0.112$ , sowie homogenen Neumann-Randbedingungen an den anderen Teilen des Randes, vergleiche Abbildung 7.7. Der Grund dafür ist, dass der in Abbildung 3.4 auf der linken Seite der Zelle zu sehende Tab eine viel höhere Wärmeleitfähigkeit als die anderen Komponenten der Batterie hat, vergleiche Tabelle A.2, und somit die an den Tabs aufgeprägte Temperatur über die Ableiterschichten sich direkt auf die Seite des Stacks übertragen lässt. Die Anfangstemperatur  $T_0$  beträgt, wie auch in Kapitel 7.2.1 bei der Bodenkühlung, konstant


 (a)  $H$ -Verfeinerung für festes  $h/\epsilon$ .

 (b)  $h/\epsilon$ -Verfeinerung für festes  $H_{\text{norm}}$ .

Abbildung 7.6.: Der Fehler  $\|T_{\text{ref}}^\epsilon - T^H\|_{\mathcal{L}^2(\Omega), \text{rel}}$  für die Lösung des Batterieproblems (7.1) mit der FE-HMM mit unterschiedlicher Verfeinerung des Makro- und Mikro-Gitters für die Bodenkühlung des Stacks mit  $N = 133$  Schichten, d.h.  $\epsilon_{133} = 0.0002255$ ,  $\partial\Omega_{\text{D}} = \partial\Omega_{\text{D}, \text{Boden}, \text{Stack}}$  und  $\partial\Omega_{\text{N}} = \partial\Omega_{\text{N}, \text{Boden}, \text{Stack}}$  aus Gleichung (7.14) sowie die Rand- und Anfangsbedingungen aus den Gleichungen (7.15) und (7.16) bei  $t = 10$  s mit  $\Delta t = 10^{-4}$ .

298 K. Somit gelten für das betrachtete Gebiet  $\Omega_{\text{Stack}}$  aus Gleichung (A.1)

$$\begin{aligned} \partial\Omega_{\text{D}, \text{Tab}, \text{Stack}} &:= \{0\} \times [0, 0.0074639] \cup \{0.112\} \times [0, 0.0074639], \\ \partial\Omega_{\text{N}, \text{Tab}, \text{Stack}} &:= \partial\Omega \setminus \partial\Omega_{\text{D}, \text{Tab}, \text{Stack}} \end{aligned} \quad (7.17)$$

sowie

$$\begin{aligned} T_{\text{BC}}(t, x) &= 293.15 && \text{für alle } (t, x) \in (0, t_{\text{end}}) \times \partial\Omega_{\text{D}, \text{Tab}, \text{Stack}}, \\ \dot{Q}_{\text{BC}}(t, x) &= 0 && \text{für alle } (t, x) \in (0, t_{\text{end}}) \times \partial\Omega_{\text{N}, \text{Tab}, \text{Stack}}, \\ T_0(x) &= 298 && \text{für alle } x \in \Omega_{\text{Stack}}. \end{aligned} \quad (7.18)$$

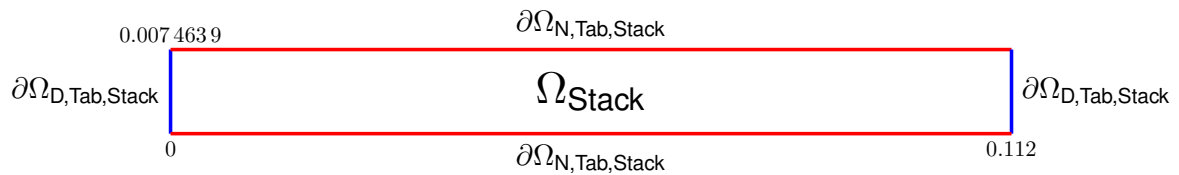


Abbildung 7.7.: Das Gebiet  $\Omega_{\text{Stack}}$  mit dem entsprechend für den Fall der Tabkühlung aufgeteilten Rand.

Die Anfangswerte werden analog zu Kapitel 7.2.1, Gleichung (7.15) so modifiziert, dass sie die Randbedingung erfüllen. Somit wird

$$\tilde{T}_{0,\text{Tab}}(x) := \begin{cases} T_0(x) + cX^2 + dX^3, & X \leq \epsilon, \\ T_0(x) + c(0.112 - X)^2 + d(0.112 - X)^3, & X \geq 0.112 - \epsilon, \\ T_0(x), & \text{sonst,} \end{cases} \quad (7.19)$$

mit  $c = 3 \frac{T_0(x) - T_{\text{BC}}(t,x)}{\epsilon^2}$  und  $d = -2 \frac{T_0(x) - T_{\text{BC}}(t,x)}{\epsilon^3}$  definiert. Dabei ist 0.112 die in Tabelle A.1 aufgeführte Länge des Stacks. Dieser Anfangswert erfüllt die Randbedingungen und ist stetig.

Abbildung 7.8 zeigt, analog zu Abbildung 7.3, im Falle der Tabkühlung, die Referenzlösung für den Stack mit 133 Schichten nach  $t = 10$  s mit dem Zeitschritt  $\Delta t = 10^{-4}$  s und soll wieder als Veranschaulichung des Abkühlungsprozesses dienen. Dabei wurden die Rand- und Anfangsbedingungen aus den Gleichungen (7.18) und (7.19) verwendet. Die Batterie kühlt in diesem Fall erwartungsgemäß in X-Richtung ab.

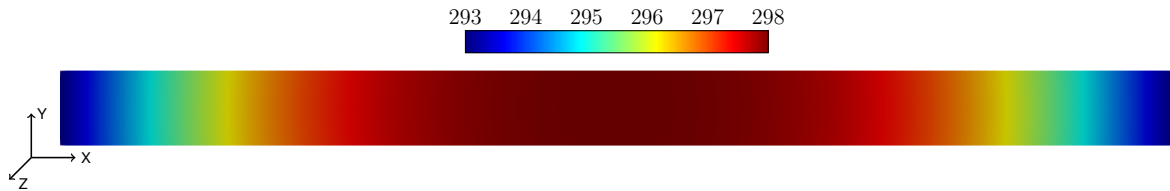


Abbildung 7.8.: Referenzlösung mit  $\tilde{\Delta t} = 10^{-4}$  und  $h_{\text{Ref, Norm}} = 2^{-11}$  des Batterieproblems (7.1) für den Stack mit  $N = 133$  Schichten, d.h.  $\epsilon_{133} = 0.0002255$  und  $\Omega_{\text{Stack}}$ , für die Tabkühlung, d.h.  $\partial\Omega_{\text{D}} = \partial\Omega_{\text{D, Tab, Stack}}$  und  $\partial\Omega_{\text{N}} = \partial\Omega_{\text{N, Tab, Stack}}$  aus Gleichung (7.17) sowie die Rand- und Anfangsbedingungen aus den Gleichungen (7.18) und (7.19) bei  $t = 10$  s.

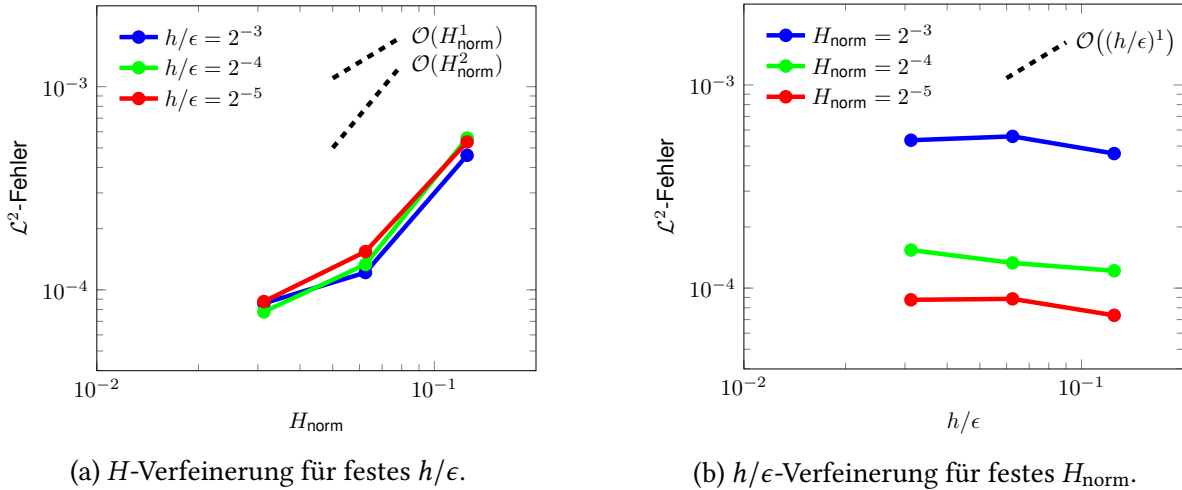
Wie es bei der Bodenkühlung in Tabelle 7.1 dargestellt wurde, approximiert die FE-HMM-Lösung die Lösung des nicht homogenisierten Problems auch für den Fall der Tabkühlung hinreichend genau. Das zeigt Tabelle 7.2, die wie Tabelle 7.1 im Falle der Bodenkühlung, die Gesamtrechenzeit pro Zeitschritt, die Anzahl der Freiheitsgrade (Dofs) und die Anzahl der CG-Schritte (CG) pro Newton-Iteration der Methoden, um die vorgegebene Fehlerschranken, vergleiche Gleichung (7.12) und Gleichung (7.13), bei der Tabkühlung bezüglich der Referenzlösung zu unterschreiten, für verschiedene Schichtzahlen  $N$  des Stacks zum Zeitpunkt  $t = 10$  s mit  $\tilde{\Delta t} = 10^{-4}$  s, darstellt. Dafür wurden für die jeweiligen Methoden Gitter, die dieselben Gitterweiten wie bei der Bodenkühlung besitzen, benötigt. Deshalb stimmt die Anzahl der Freiheitsgrade mit denen aus Tabelle 7.1 überein. Für die jeweiligen Methoden wurden dieselben Vorkonditionierer wie bei der Bodenkühlung in Kapitel 7.2.1 verwendet, also Jacobi-Vorkonditionierer für die FEM und die FE-HMM und DIC-Vorkonditionierer für die LBF. Wird die Anzahl der CG-Schritte für die zwei Fälle verglichen, wird festgestellt, dass diese dieselbe Größenordnung haben, die genaue Anzahl ist bei der Tabkühlung etwas höher. Daraus resultieren die etwas höheren Rechenzeiten der FEM bei  $N = 265$ . Auch die

durchschnittliche Anzahl der Newton-Schritte pro Zeitschritt bei der FEM und FE-HMM mit dem konstanten Wert drei ist gleich zu dem in Kapitel 7.2.1. Mit der LBF lassen sich bei den Schichtzahlen  $N = 133$  und  $N = 265$  die Fehlergrenzen, vergleiche Gleichung (7.12) und Gleichung (7.13), wieder nicht unterschreiten. Die Argumente dafür sind dieselben wie in Kapitel 7.2.1. Aus diesen Ergebnissen folgt, dass sich die Anwendung der FE-HMM auch für die Tabkühlung lohnt.

Tabelle 7.2.: Benötigte durchschnittliche Gesamtrechenzeit pro Zeitschritt in Sekunden sowie Anzahl der CG-Schritte pro Newton-Iteration (CG) und Anzahl der Freiheitsgrade (Dofs), um bei verschiedenen Methoden den vorgegebenen  $\mathcal{L}^2$ - und  $\mathcal{L}^\infty$ -Fehler, vergleiche Gleichung (7.12) und Gleichung (7.13), bezüglich der Referenzlösung des Batterieproblems (7.1) bei gegebener Schichtzahl  $N$  und Bodenkühlung zu erreichen.

Methode	$N=73$			$N=133$			$N=265$		
	Zeit	Dofs	CG	Zeit	Dofs	CG	Zeit	Dofs	CG
LBF	0.42705	65536	24	-	-	-	-	-	-
FEM	2.544	66049	33	16.773	263169	79	104.451	1050625	144
FE-HMM	2.19	289	2	2.439	289	2	2.45	289	2

Analog zu der Bodenkühlung wird auch für die Tabkühlung, also  $\Omega_{\text{Stack}}, \partial\Omega_D = \partial\Omega_{D,\text{Tab},\text{Stack}}$  und  $\partial\Omega_N = \partial\Omega_{N,\text{Tab},\text{Stack}}$  aus Gleichung (7.17) sowie die Rand- und Anfangsbedingungen aus den Gleichungen (7.18) und (7.19), der realen Zelle, also  $N = 133$  Schichten und  $\epsilon = 0.0002255$ , das Konvergenzverhalten der FE-HMM untersucht. Abbildung 7.9 stellt den relativen  $\mathcal{L}^2$ -Fehler  $\|T_{\text{ref}}^\epsilon - T^H\|_{\mathcal{L}^2(\Omega),\text{rel}}$ , also den Fehler der FE-HMM-Lösung bezüglich der Referenzlösung für verschiedene Makro- und feste Mikro-Gitterweiten, Abbildung 7.9a und umgekehrt, Abbildung 7.9b dar. Es wird festgestellt, dass im Vergleich zu der Bodenkühlung in diesem Fall die betrachteten Mikro-Gitterweiten  $h/\epsilon$  keinen Einfluss auf den Fehler haben, vergleiche Abbildung 7.9b. Dagegen reduziert sich der Fehler des Verfahrens für jedes betrachtete  $h/\epsilon$  mit einer Ordnung zwischen eins und zwei. Das zeigt, dass in diesem Fall der Ortsfehler von dem Makrofehler, also dem Fehler der auf der Makroskala beim Lösen des homogenisierten Problems mit numerischer Quadratur entsteht, dominiert wird. Somit ergibt sich die Verfeinerungsstrategie in diesem Fall die Mikro-Gitterweite fest zu wählen und das Makro-Gitter zu verfeinern. Analog zum Fall der Bodenkühlung in Kapitel 7.2.1 lässt sich begründen, dass der Fehler trotz der in Abbildung 7.9a zu sehenden Fehlerreduktion bei diesem konkreten Anwendungsfall, also für  $\epsilon_{133} = 0.0002255$  und dem Zeitschritt  $\widetilde{\Delta t} = 10^{-4}$ , für die Verfeinerung des Mikro- und Makro-Gitters in keinem der Fälle gegen Null konvergiert.


 (a)  $H$ -Verfeinerung für festes  $h/\epsilon$ .

 (b)  $h/\epsilon$ -Verfeinerung für festes  $H_{\text{norm}}$ .

Abbildung 7.9.: Der Fehler  $\|T_{\text{ref}}^\epsilon - T^H\|_{\mathcal{L}^2(\Omega), \text{rel}}$  für die Lösung des Batterieproblems (7.1) mit der FE-HMM mit unterschiedlicher Verfeinerung des Makro- und Mikro-Gitters für die Tabkühlung des Stacks mit  $N = 133$  Schichten, d.h.  $\epsilon_{133} = 0.0002255$ ,  $\partial\Omega_D = \partial\Omega_{D, \text{Tab}, \text{Stack}}$  und  $\partial\Omega_N = \partial\Omega_{N, \text{Tab}, \text{Stack}}$  aus Gleichung (7.14) sowie die Rand- und Anfangsbedingungen aus den Gleichungen (7.18) und (7.19) bei  $t = 10$  s mit  $\Delta t = 10^{-4}$ .

Die Ergebnisse zu den zwei Kühlmöglichkeiten der Batterie zeigen, dass mit der FE-HMM nicht nur die homogenisierte Lösung des Batterieproblems (7.1) approximiert werden kann, sondern sogar mit einer für die Anwendungen ausreichenden Genauigkeit die Lösung des nicht homogenisierten Problems. Somit ist die Anwendung der Methode gerechtfertigt und ab einer entsprechenden Schichtzahl, unter anderem für die in dieser Arbeit zu simulierenden Kokam SLPB 8043140H5 Zelle mit 133 Schichten, vorteilhaft. Allerdings ist zu beachten, dass in den beiden betrachteten Fällen verschiedene Verfeinerungen das Mikro- und Makro-Gitter die besten Ergebnisse bezüglich der Lösung des nicht homogenisierten Problems liefern.

### 7.2.3. Adaptive Gitterverfeinerung

Im Folgenden wird wiederholt der Fall der Bodenkühlung für den Stack der realen Zelle untersucht. Somit gelten  $N = 133$ , also  $\epsilon_{133} = 0.0002255$ ,  $\partial\Omega_D = \partial\Omega_{D, \text{Boden}, \text{Stack}}$  und  $\partial\Omega_N = \partial\Omega_{N, \text{Boden}, \text{Stack}}$  aus Gleichung (7.14) sowie  $T_{\text{BC}}(t, x) = 293.15$  K und  $\dot{Q}_{\text{BC}}(t, x) = 0$ . Für die Anfangstemperatur wird  $\tilde{T}_0$  aus Gleichung (7.16) verwendet. Die bei der FE-HMM benötigte und in Tabelle 7.1 dargestellte Rechenzeit kann mit dem in Kapitel 4.3.5 vorgestellten und in Kapitel 5.4 implementierten adaptiven Algorithmus reduziert werden. Der Grund dafür ist, dass, wie es sich zeigen wird, der Fehler nahe am Rand wegen den Dirichlet-Randbedingungen größer ist. Es wird ein Zeitschritt auf dem Gitter mit der normierten Gitterweite  $H_{\text{norm}} = 2^{-3}$  ausgeführt und dann der adaptive Algorithmus angewendet. Dabei wird erst der Fehlerschätzer

aus Gleichung (4.49) verwendet um den Fehler auf den einzelnen Zellen abzuschätzen. Dann wird mit Hilfe der Abschätzung (4.51) mit Parameter  $\vartheta = 0.3$  die zu verfeinernde Menge der Zellen bestimmt. Diese werden anschließend verfeinert, also in beide Koordinatenrichtungen einmal halbiert. Abbildung 7.10 zeigt das zweimal adaptiv verfeinerte und in X-Richtung halbierte Gitter. Nach Auswertung des Fehlers nach 10 s mit dem Zeitschritt  $\widetilde{\Delta t} = 10^{-4}$  auf dem so erhaltenen Gitter wird festgestellt, dass sogar ein adaptiver Schritt ausreichend ist, um die vorgegebenen Fehlerschranken bezüglich der Referenzlösung, vergleiche Gleichung (7.12) und Gleichung (7.13), zu erreichen. Das resultiert im Vergleich zum Gitter mit normierter Gitterweite  $H_{\text{norm}} = 2^{-4}$  in einer Reduzierung der Anzahl der Freiheitsgrade von 289 auf 189 und der durchschnittlichen Gesamtrechnzeit pro Zeitschritt von 2.262 s auf 1.692 s.



Abbildung 7.10.: Das zweimal adaptiv verfeinerte und in der X-Richtung halbierte Gitter für den Fall der Bodenkühlung.

### 7.3. Ergebnisse – Vollständige 2D-Geometrie

In diesem Kapitel wird die makroskopische Temperaturverteilung, also die homogenisierte Lösung der Gleichung (7.1), in der Batterie mit Hilfe der FE-HMM betrachtet, nachdem in Kapitel 7.2 die Rentabilität der Methode gezeigt wurde. Somit wird hier die in Kapitel 3.2, Abbildung 3.4 vorgestellte vollständige Geometrie der Batterie in 2D verwendet. Das bedeutet, dass nicht nur der Stack wie in Kapitel 7.2 betrachtet wird, sondern auch die Teile mit Argon, sowie die Ableiterschichten an den Seiten, die Ableitertabs und die alles außer den Tabs umgebende äußere Hülle. Dieses Gebiet  $\Omega_{2D}$  wird in Gleichung (A.2) definiert. Der Stack besteht, wie bei der betrachteten Kokam-Zelle, aus 133 Schichten, es gilt also  $\epsilon_{133} = 0.0002255$ . Die genauen Parameter der Geometrie sind wieder im Anhang A aufgelistet. Es werden zunächst verschiedene Kühlmöglichkeiten der Batterie verglichen, die über die Randbedingungen umgesetzt werden. Es wird bei einem konstanten Wärmequellterm untersucht, wie sich die mittlere und die maximale Temperatur über die Zeit bei einer Boden- oder Tabkühlung entwickelt. Danach wird der nichtlineare Wärmequellterm mit den Randbedingungen betrachtet, unter denen er nach Kapitel 3.3 gültig ist. Es soll identifiziert werden, welchen Temperaturanstieg er verursacht.



### 7.3.1. Vergleich der Boden- und der Tabkühlung

Bei dem Vergleich der Boden- mit der Tabkühlung wird eine Kühlplatte an die untere Seite des Stacks bzw. der Tabs gelegt. Diese Art von Kühlung wird über Dirichlet-Randbedingungen modelliert. Da bei der Boden- mit der Tabkühlung die Kühlplatte nur mit dem Stack in Berührung kommen soll, wird die Dirichlet-Randbedingung nicht auf der ganzen unteren Seite der in Abbildung 3.4 dargestellten Geometrie angewendet, sondern nur an der Länge des Stacks. Sowohl bei der Boden- als auch bei der Tabkühlung gelten an den Teilen des Randes, wo keine Dirichlet-Randbedingungen verwendet werden, homogene Neumann-Randbedingungen. Die Anfangs- und Randtemperatur betragen, wie auch in Kapitel 7.2, in beiden Fällen  $T_0 = 298 \text{ K}$  bzw.  $293.15 \text{ K}$ . Für die Anfangstemperatur werden  $\widetilde{T}_{0,\text{Boden},2D}$  und  $\widetilde{T}_{0,\text{Tab},2D}$  analog zu Gleichung (7.16) konstruiert. Diese erfüllen deshalb die Randbedingungen. Somit gelten bei der Boden- mit der Tabkühlung

$$\begin{aligned}\partial\Omega_{D,\text{Boden},2D} &:= [0.0013938, 0.1133938] \times \{0\}, \\ \partial\Omega_{N,\text{Boden},2D} &:= \partial\Omega \setminus \partial\Omega_{D,\text{Boden},2D}\end{aligned}\tag{7.20}$$

sowie  $T_{BC}(t, x) = 293.15 \text{ K}$  und  $\dot{Q}_{BC}(t, x) = 0$ . In diesem Fall ist es wichtig, dass  $\widetilde{T}_{0,\text{Boden}}$  so konstruiert wurde, dass sie auch auf dem ganzen unteren Rand eine Normalenableitung gleich Null hat, da hier der Dirichlet-Rand nicht die komplette untere Seite beinhaltet. Bei der Tabkühlung gelten entsprechend

$$\begin{aligned}\partial\Omega_{D,\text{Tab},2D} &:= [-0.0271062, 0] \times \{0.00382575\} \cup [0.1147876, 0.1418938] \times \{0.00382575\}, \\ \partial\Omega_{N,\text{Tab},2D} &:= \partial\Omega \setminus \partial\Omega_{D,\text{Tab},2D}\end{aligned}\tag{7.21}$$

sowie wie bei der Boden- mit der Tabkühlung  $T_{BC}(t, x) = 293.15 \text{ K}$  und  $\dot{Q}_{BC}(t, x) = 0$ . Der Grund warum die hier vorgestellte Tabkühlung aus Sicht des Stacks sich mit dem aus Kapitel 7.2.2 vergleichen lässt ist, wurde in Kapitel 7.2.2 gegeben. Hier wird wieder der Quellterm  $\dot{Q}_{2,\text{src},\text{AM}}$  aus Gleichung (3.6) verwendet, da unter den in Gleichung (7.20) und in Gleichung (7.21) vorgestellten Randbedingungen nach der Begründung zu Gleichung (3.6) in Kapitel 3.3 nur dieser gültig ist. Da in Kapiteln 7.2.1 und 7.2.2 festgestellt wurde, dass die optimale Wahl des Makro- und Mikro-Gitters von der genauen Anwendung, bzw. Randbedingung abhängt, werden diese Erkenntnisse hier berücksichtigt. Deshalb werden die Simulation der Boden- mit der Tabkühlung mit  $H_{\text{Norm}} = h/\epsilon = 2^{-4}$  und die der Tabkühlung mit  $H_{\text{Norm}} = 2^{-4}$  und  $h/\epsilon = 2^{-3}$  ausgeführt. Es ist wichtig zu erwähnen, dass die in den Kapiteln 5 und 6 entwickelte Methode nur in dem Teil der Batterie angewendet wird, wo sich die Schichten befinden, also im Stack. Der Grund dafür ist, dass sich die Koeffizienten, die die Materialeigenschaften beschreiben, nur dort einen Multiskalencharakter aufweisen und somit eine Multiskalen-Methode nur dort notwendig ist. In den anderen Teilen der Batterie wird die Standard-FEM mit einer Gitterweite die gleich der Gitterweite des Makro-Gitter im Stack ist, verwendet. Diese Aufteilung wird über die Aufteilung der zugrunde liegenden Linear- und Bilinearform erreicht. Es wird mit dem Ziel den Temperaturverlauf bis einem nahezu stationären Zustand zu betrachten eine Gesamtzeit

von 5 Minuten simuliert, es gilt also  $t_{\text{end}} = 300$  s. Dass diese Wahl dafür ausreichend ist, wird durch die nachfolgenden Ergebnisse gerechtfertigt. Der Zeitschritt wird, wie auch in Kapitel 7.2, als  $\widetilde{\Delta t} = 10^{-4}$  gewählt. Damit wird gewährleistet, dass der Fehler vom Ortsfehler dominiert wird.

Abbildung 7.11 stellt den Verlauf der Maximaltemperatur  $T_{\text{max}}$ , Abbildung 7.11a, und der Mitteltemperatur  $T_{\text{avg}}$ , Abbildung 7.11b, des Stacks, also nicht der gesamten Zelle, bei Boden- und Tabkühlung über die Zeit dar. Der Grund für die Fokussierung auf den Stack besteht darin, dass sich in diesem die elektrochemischen Prozesse abspielen und die Temperatur somit hauptsächlich in diesem relevant ist. Es ist zu erkennen, dass sowohl die Mittel- als auch die Maximaltemperatur bei der Bodenkühlung am Ende des betrachteten Zeitintervalls um ungefähr 1 K niedriger ist als bei der Tabkühlung. Ein Grund dafür ist, dass bei der Bodenkühlung die gekühlte Fläche größer und die Transportpfade kürzer sind, was zu einem besseren Wärmetransport führt. Bei beiden Kühlmöglichkeiten ist in den ersten 20 Sekunden ein Anstieg der Maximaltemperatur zu erkennen. Dies ist eine Folge der Wärmeerzeugung durch den Wärmequellterm, dessen Effekt mit der Zeit durch die Kühlung entgegen gewirkt wird.

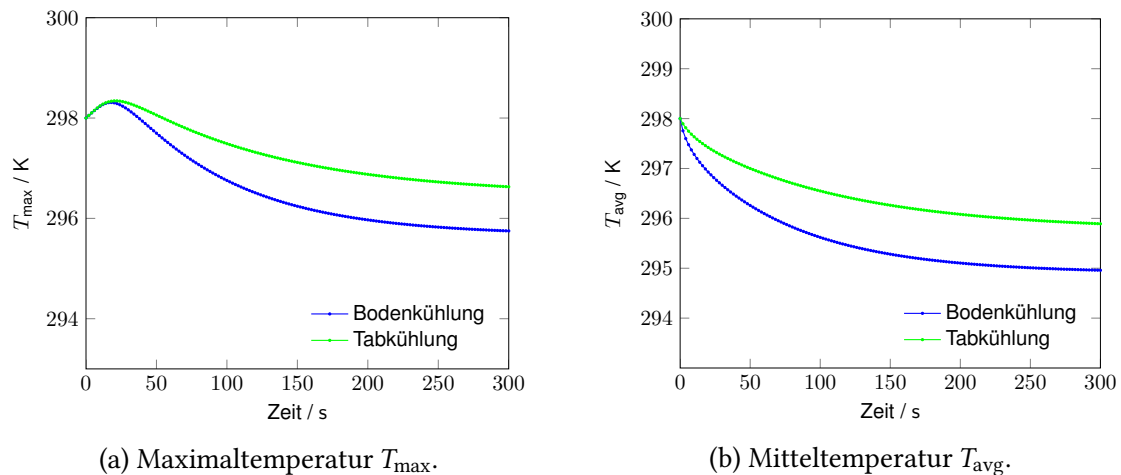


Abbildung 7.11.: Vergleich des Verlaufs der Maximaltemperatur  $T_{\text{max}}$ , Abbildung 7.11a, und der Mitteltemperatur  $T_{\text{avg}}$ , Abbildung 7.11b, des Stacks über die Zeit bei Boden- und Tabkühlung, vergleiche Gleichung (7.20) und Gleichung (7.21).

Außerdem spielt die Richtungsabhängigkeit der Wärmeleitfähigkeit  $\lambda$  eine Rolle. Diese ist nach Formel (3.4) im betrachteten Temperaturbereich parallel zu den Schichten größer. Das hätte zur Folge, dass die Batterie bei einer Kühlung, die parallel zu den Schichten abläuft, schneller abkühlt als bei einer, die senkrecht dazu ist. Ersteres ist bei der Tab-, Letzteres bei der Bodenkühlung der Fall. Somit wären die Unterschiede in Abbildung 7.11 bei einer isotropen, also nicht richtungsabhängigen, Wärmeleitfähigkeit noch größer. Da die Wärmeleitfähigkeit des Anodenableiters (rechter Tab) größer als die des Kathodenableiters (linker Tab) ist, kühlt die Batterie an der rechten Seite etwas mehr ab. Das ist auch in Abbildung 7.12 an der

dunkleren blauen Farbe an der rechten Seite (rechter Tab) zu erkennen. Diese stellt die Temperaturverteilung bei der Tabkühlung nach 5 Minuten dar. Sowohl die Maximal- als auch die Mitteltemperatur in Abbildung 7.11 sind nach ungefähr 250 Sekunden annähernd konstant. Somit ist die gewählte Simulationszeit von 5 Minuten ausreichend um sowohl den Verlauf der Mittel- und Maximaltemperatur als auch den nahezu stationären Zustand beobachten zu können.

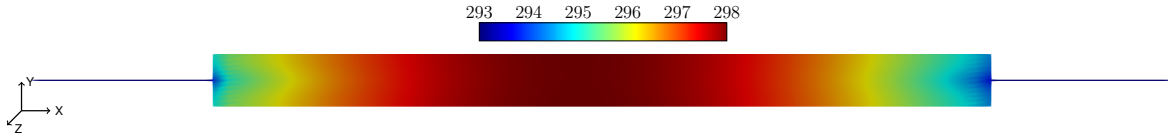


Abbildung 7.12.: Lösung des Batterieproblems (7.1) für  $\tilde{T}_0 = 298$  K nach 5 Minuten ( $t = 300$  s und  $\tilde{\Delta}t = 10^{-4}$  mit der FE-HMM mit  $h/\epsilon = H_{\text{Norm}} = 2^{-4}$  bei Tabkühlung, also  $\partial\Omega_D = \partial\Omega_{D,\text{Tab},2D}$  und  $\partial\Omega_N = \partial\Omega_{N,\text{Tab},2D}$  aus Gleichung (7.21) sowie  $T_{BC}(t, x) = 293.15$  K und  $\dot{Q}_{BC}(t, x) = 0$ .

### 7.3.2. Bodenkühlung unter Robin-Randbedingungen

Wie eben erläutert, zeigt Abbildung 7.11, dass die Bodenkühlung bei derselben Randtemperatur zu einer niedrigeren Maximal- und Mitteltemperatur führt. Deshalb wird als nächstes diese bei Robin-Randbedingungen untersucht. Diese Art von Randbedingung modelliert den Anwendungsfall, bei dem die Batterie an einem Teil des Randes zwar gekühlt wird, aber die Wärmeübertragung nicht perfekt ist. Das ist z.B. der Fall, falls statt einer Kühlplatte eine Flüssigkeit oder ein Gas zum Kühlen verwendet wird. Wie es in Kapitel 3.3 erläutert wurde, wird eine Robin-Randbedingung über den Zusammenhang

$$-\lambda(x, T)\partial_{\mathbf{n}}T(t, x) = \alpha(T(t, x) - T_{BC}(t, x)) \quad \text{für alle } (t, x) \in (0, t_{\text{end}}) \times \partial\Omega_R$$

dargestellt. Für den Wärmeübergangskoeffizienten  $\alpha$  werden bei einer Kühlung durch Gase typischerweise Werte zwischen  $25 \text{ W/m}^2\text{K}$  und  $250 \text{ W/m}^2\text{K}$  verwendet [93, Kap. 2.2]. Hier wird  $\alpha \in \{100, 150\}$  gewählt und mit der Bodenkühlung mit einer Kühlplatte verglichen, die in Abbildung 7.11 dargestellt wurde. An den Teilen des Randes wo keine Robin-Randbedingungen angewendet werden, gelten homogene Neumann-Randbedingungen. Es wird dieselbe Anfangsbedingung wie beim Vergleich der Tab- und Bodenkühlung gewählt, es wird also  $\tilde{T}_{0,\text{Boden},2D}$  verwendet. Außerdem wird  $T_{BC} = 293.15$  K gesetzt. Das entspricht der Dirichlet-Randbedingung vom vorherigen Vergleich. Somit gelten

$$\begin{aligned} \partial\Omega_{R,\text{Boden},2D} &:= [0.0013938, 0.1133938] \times \{0\}, \\ \partial\Omega_{N,\text{Boden},2D} &:= \partial\Omega \setminus \partial\Omega_{R,\text{Boden},2D} \end{aligned} \quad (7.22)$$

sowie  $T_{BC}(t, x) = 293.15$  K und  $\dot{Q}_{BC}(t, x) = 0$ . Es wird weiterhin der Quellterm  $\dot{Q}_{2,\text{src},AM}$  aus Gleichung (3.6) verwendet. Wie zuvor, werden wieder 5 Minuten mit dem Zeitschritt

$\widetilde{\Delta t} = 10^{-4}$  simuliert. Da es sich um eine Variante der Bodenkühlung handelt, wird  $H_{\text{Norm}} = h/\epsilon = 2^{-4}$  gewählt. Abbildung 7.13 zeigt, dass in diesem Anwendungsfall keiner der angewendeten Robin-Randbedingungen, also keiner der gewählten Wärmeübergangskoeffizienten, zu einer Senkung der Maximal- und Mitteltemperatur führt. Das bedeutet, dass bei den gewählten Bedingungen die Robin-Randbedingungen mit diesen Wärmeübergangskoeffizienten nicht ausreichend sind, um die Batterie abzukühlen. Möglicherweise reicht es jedoch um die Batterie in einem für die Anwendungen guten Temperaturbereich zu halten. Eine Besserung ließe sich mit kleinerem  $T_{\text{BC}}$  oder größerem  $\alpha$  erzielen.

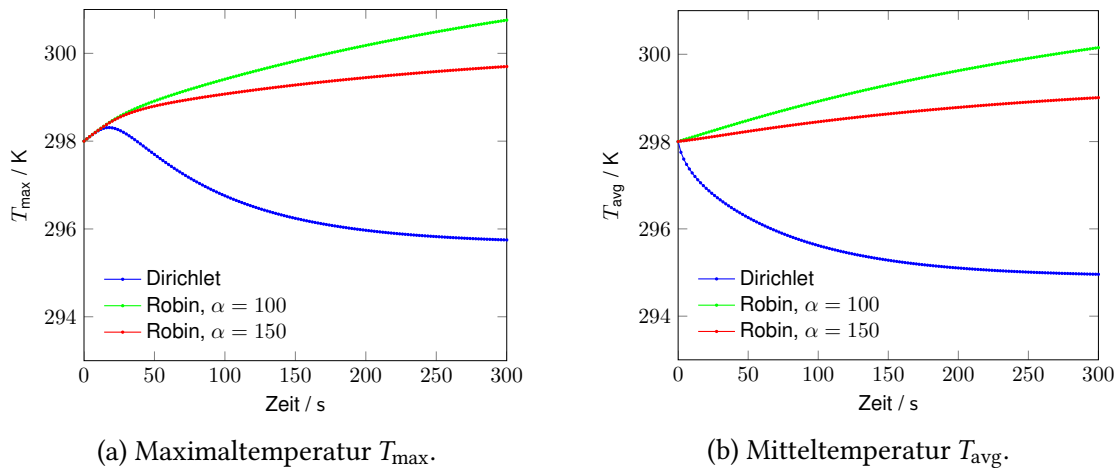


Abbildung 7.13.: Vergleich des Verlaufs der Maximaltemperatur  $T_{\text{max}}$ , Abbildung 7.13a, und der Mitteltemperatur  $T_{\text{avg}}$ , Abbildung 7.13b, des Stacks über die Zeit bei Bodenkühlung, vergleiche Gleichung (7.20), bei Robin- und Dirichlet-Randbedingungen.

Obwohl die gewählten Robin-Randbedingungen nicht zu der Abkühlung der Batterie führen, senkt sich bei  $\alpha = 150$  die Temperatur am Rand, an welchem diese angewendet werden ( $Y = 0$  m). Im Gegensatz dazu erhöht sich diese bei  $\alpha = 100$  sogar um ungefähr 1 K. Das zeigt Abbildung 7.14, welche den Verlauf der Temperatur in der Mitte des Stacks nach 5 Minuten in den betrachteten Fällen darstellt.

### 7.3.3. Nichtlinearer Wärmequellterm

Als letztes Anwendungsbeispiel werden in diesem Kapitel im Gegensatz zu den in Kapitel 7.2, Kapitel 7.3.1 und Kapitel 7.3.2 verwendeten Quellterm aus Gleichung (3.6), nichtlineare Quellterme der Form von Gleichung (3.5) betrachtet. Da diese nur unter einer Anfangsbedingung die die Randbedingung erfüllt gültig ist, muss Ersteres, um die Randbedingung zu erfüllen, im Gegensatz zu den anderen betrachteten Fällen nicht modifiziert werden. Es werden zwei Fälle untersucht: Erstens der Fall, bei dem die Dirichlet-Randbedingung über die Länge des Stacks

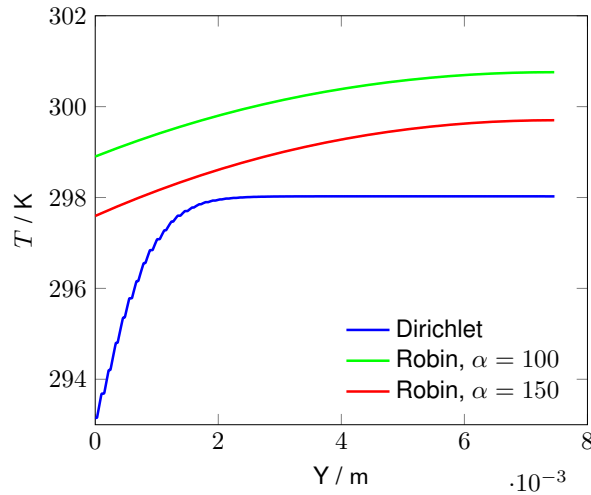


Abbildung 7.14.: Verlauf der Temperatur in der Mitte des Stacks, also bei  $X = 0.056$  m, nach 5 Minuten ( $t = 300$  s) bei den betrachteten Robin- und Dirichlet-Randbedingungen.

konstant  $298.15$  K ( $25$  °C) beträgt, also

$$T_{\text{BC}}(t, x) = T_0(x) = 298.15 \text{ K} \quad (7.23)$$

gilt. Zweitens, bei dem über die Länge des Stacks ein linearer Gradient zwischen  $273.15$  K ( $0$  °C) und  $323.15$  K ( $50$  °C) angelegt wird. In diesem Fall gilt

$$T_{\text{BC,Q,grad}}(t, x) := \begin{cases} 273.15 + (X - 0.0013938) \cdot \frac{50}{0.112}, & X \in [0.0013938, 0.1133938], \\ 273.15, & X < 0.0013938, \\ 323.15, & X > 0.1133938 \end{cases} \quad (7.24)$$

und  $T_{0,\text{Q,grad}}(x) = T_{\text{BC,Q,grad}}(0, x)$ . Für die Teile des Randes an denen keine Dirichlet-Randbedingungen angewendet werden, gelten in beiden Fällen wieder homogene Neumann-Randbedingungen. Für beide nichtlineare Quellterme sind die Parameter des Quellterms in Tabelle A.3 im Anhang A zu finden. Es wird wieder die Maximal- und Mitteltemperatur untersucht. Allerdings beträgt hier die Simulationszeit nur 2.5 Minuten ( $t = 150$  s), da sich schon früher ein stationärer Zustand einstellt, vergleiche Abbildung 7.15 und Abbildung 7.16. Es wird mit derselben Begründung wie in Kapitel 7.3.1 und in Kapitel 7.3.2 der Zeitschritt  $\widetilde{\Delta t} = 10^{-4}$  und  $H_{\text{Norm}} = h/\epsilon = 2^{-4}$  gewählt. Es wird untersucht, wie weit sich die Temperatur erhöht und welche Auswirkung auf die Temperaturerhöhung die Anwendung des Gradienten und die Aufprägung der Randbedingungen auch an den Ableitertabs haben. Falls die Tabs nicht temperiert werden gilt

$$\partial\Omega_{\text{D,Q}} := [0.0013938, 0.1133938] \times \{0\} \cup [0.0013938, 0.1133938] \times \{0.0078515\} \quad (7.25)$$

und falls sie temperiert werden gilt

$$\begin{aligned} \partial\Omega_{D,Q,Tab} := & [0.0013938, 0.1133938] \times \{0\} \cup [0.0013938, 0.1133938] \times \{0.0078515\} \cup \\ & [-0.0271062, 0] \times \{0.00382575\} \cup [0.1147876, 0.1418938] \times \{0.00382575\}. \end{aligned} \quad (7.26)$$

In beiden Fällen gilt  $\partial\Omega_N = \partial\Omega \setminus \partial\Omega_D$ , wobei  $\partial\Omega_D$  entweder über Gleichung (7.25) oder über Gleichung (7.26) definiert wird.

Abbildung 7.15 zeigt die Maximal- und Mitteltemperatur des Stacks über die Zeit im Fall der konstanten Randbedingungen, also falls die Rand- und Anfangsbedingungen über Gleichung (7.23) definiert werden. Es wird festgestellt, dass der Quellterm in diesem Fall eine vernachlässigbare Temperaturerhöhung von weniger als 0.1 K, sowohl im Mittel als auch beim Maximum verursacht. Der Anstieg ist bei der zusätzlichen Anwendung der Randbedingungen an den Tabs sogar noch niedriger, da dadurch die Batterie auch von der Seite gekühlt wird.

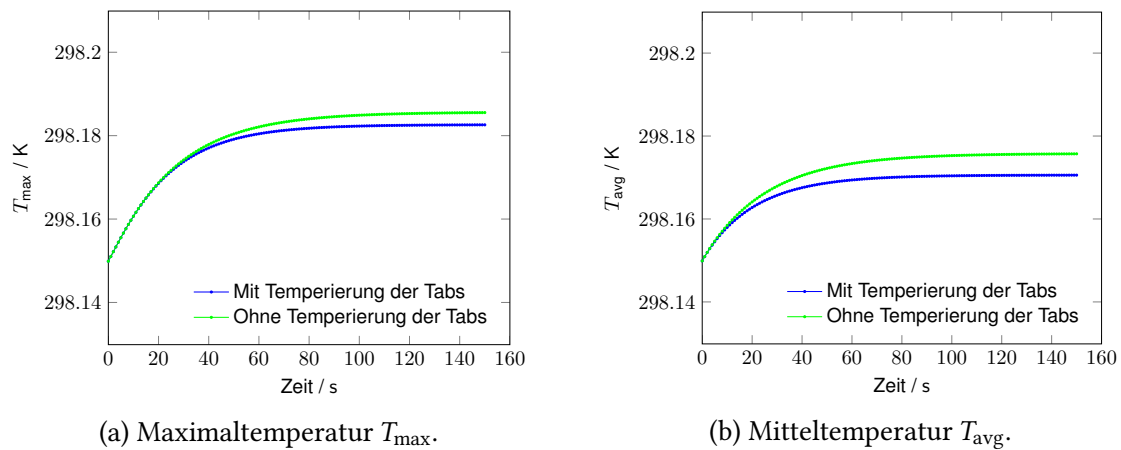


Abbildung 7.15.: Vergleich des Verlaufs der Maximaltemperatur  $T_{max}$ , Abbildung 7.15a, und der Mitteltemperatur  $T_{avg}$ , Abbildung 7.15b, des Stacks über die Zeit bei konstanten Dirichlet-Randbedingungen von  $T_{BC}$ , vergleiche Gleichung (7.23), am Stack mit, vergleiche Gleichung (7.25), und ohne Aufprägung, vergleiche Gleichung (7.26), der Randbedingung an den Tabs.

Bei der Anwendung des Gradienten im zweiten Fall, also falls die Rand- und Anfangsbedingungen über die Gleichung (7.24) definiert werden, ist der Anstieg der Mitteltemperatur etwas größer als bei dem konstanten Fall, bei der Temperierung der Tabs deutlich größer, sogar um 0.3 K. Dies zeigt Abbildung 7.16b. Der größere Anstieg lässt sich durch den Quellterm begründen. Dieser ist nach Abbildung 7.1 für niedrigere Temperaturen deutlich höher und somit wird im Fall mit dem Gradienten insgesamt mehr Wärme freigesetzt als im Fall eines konstanten Quellterms. Somit hat die Verwendung des Gradienten im Vergleich zu dem Fall mit der konstanten Mitteltemperatur einen negativen Effekt auf die Mitteltemperatur. Dieser ist aber nahezu vernachlässigbar. Die Auswirkung des Gradienten wurde in [119] genauer

untersucht. Was in diesem Fall jedoch nicht mehr vernachlässigbar ist, ist die Senkung der Maximaltemperatur. Der Unterschied für diesen beträgt ohne Temperierung der Tabs ungefähr 5 K, wie es Abbildung 7.16a zeigt. Dieses Verhalten wird aber hauptsächlich nicht durch den nichtlinearen Quellterm, sondern durch den Gradienten über die Länge des Stacks verursacht. Das zeigt auch Abbildung 7.17, welche die Temperatur nahe an den Enden des Stacks darstellt. Es ist zu erkennen, dass sich die Temperatur nahe am linken Ende des Stacks ( $X = 0.0022$  m) im Vergleich zu der Anfangstemperatur erhöht, während sie sich nahe am rechten verringert. Allerdings ist der Anstieg links höher als die Abnahme rechts. Das wiederum ist auf den nichtlinearen Quellterm zurückzuführen, der nach Abbildung 7.1 für niedrigere Temperaturen höhere Werte annimmt und somit im linken Teil mehr Wärme freigesetzt wird als im rechten. Die in Abbildung 7.17a oben und in Abbildung 7.17b unten zu sehenden Oszillationen werden durch das grobe Makro-Gitter verursacht.

Damit wurden an verschiedenen Anwendungsfällen die Möglichkeiten und das vorhandene Potential der entwickelten Methode an der 2D-Geometrie gezeigt. Als Abschluss der Arbeit wird noch der 3D-Fall für ausgewählte Anwendungen untersucht.

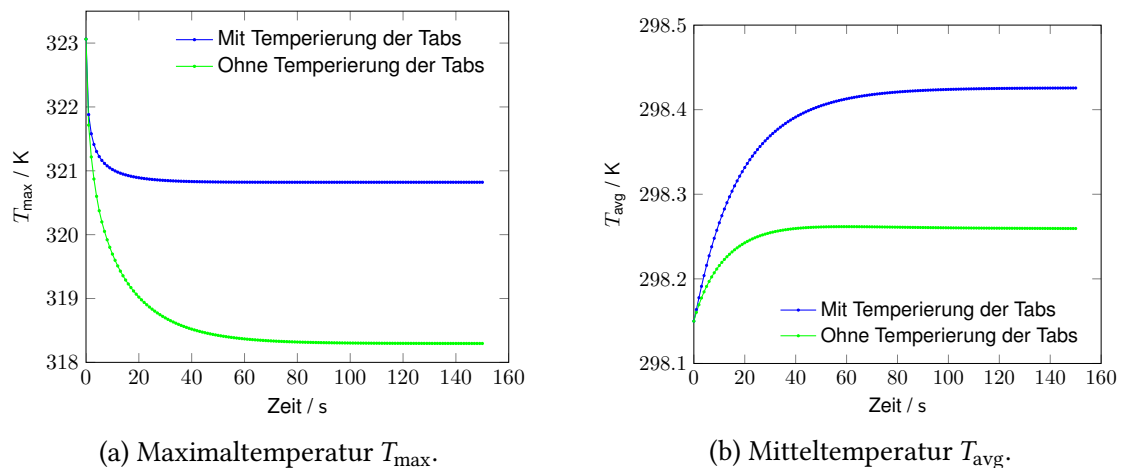


Abbildung 7.16.: Vergleich des Verlaufs der Maximal-,  $T_{\max}$ , und der Mitteltemperatur,  $T_{\text{avg}}$ , des Stacks über die Zeit bei Dirichlet-Randbedingungen mit einem linearen Gradienten, vergliche Gleichung (7.24), am Stack mit, vergliche Gleichung (7.25), und ohne Aufprägung, vergliche Gleichung (7.26), der Randbedingung an den Tabs.

## 7.4. Ergebnisse – 3D

In diesem Kapitel wird das Batterieproblem (7.1) auf der in Abbildung 3.2 zu sehende und analog zu Abbildung 3.4 in *deal.II* umgesetzte kompletten 3D-Geometrie simuliert. Diese

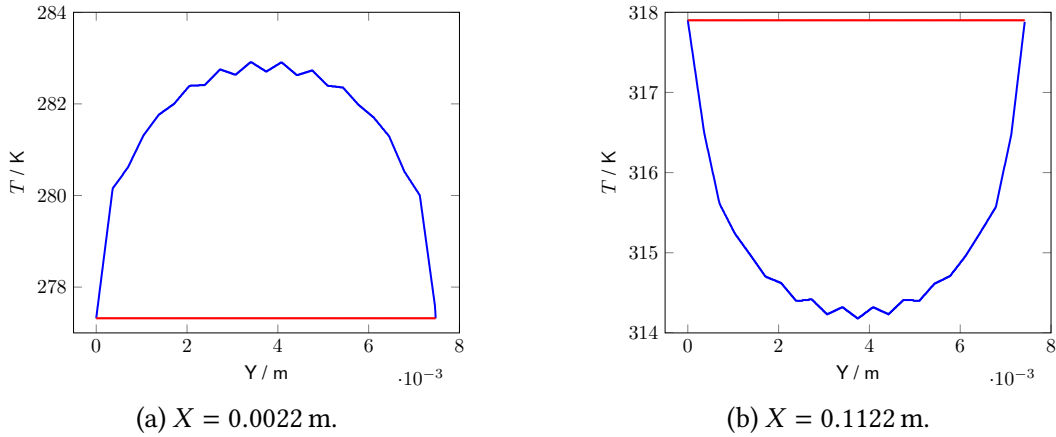


Abbildung 7.17.: Verlauf der Temperatur bei nichtlinearem Quellterm mit Gradienten, vergleiche Gleichung (7.24), an den Seiten des Stacks (links: Abbildung 7.17a und rechts: Abbildung 7.17b) im Vergleich zu der Anfangstemperatur (rote Linie).

wird in Gleichung (A.3) definiert. Es werden wieder die Maximal- und die Mitteltemperatur bei der Boden- und der Tabkühlung untersucht. Analog zum 2D-Fall gelten somit

$$\begin{aligned} \partial\Omega_{D,\text{Boden},3D} &:= [0.0013938, 0.1133938] \times \{0\} \times [0.0013938, 0.0386558], \\ \partial\Omega_{N,\text{Boden},3D} &:= \partial\Omega \setminus \partial\Omega_{D,\text{Boden},2D} \end{aligned} \quad (7.27)$$

sowie

$$\begin{aligned} \partial\Omega_{D,\text{Tab},3D} &:= [-0.0271062, 0] \times \{0.00382575\} \times [0.00382575, 0.00402575] \cup \\ &\quad [0.1147876, 0.1418938] \times \{0.00382575\} \times [0.00382575, 0.00402575], \\ \partial\Omega_{N,\text{Tab},3D} &:= \partial\Omega \setminus \partial\Omega_{D,\text{Tab},3D}. \end{aligned} \quad (7.28)$$

Weiter wird die konstante, 298 K betragende Anfangsbedingung analog zu Gleichung (7.16) so modifiziert, dass sie die Randbedingungen  $T_{BC}(t, x) = 293.15 \text{ K}$  und  $\dot{Q}_{BC}(t, x) = 0$  erfüllt. Es werden wieder  $t_{\text{end}} = 5$  Minuten mit dem normierten Zeitschritt  $\widetilde{\Delta t} = 10^{-4}$  simuliert.

Der Unterschied im Vergleich zum 2D-Fall in der Geometrie ist, dass sich die Ableitertabs an den Seiten in Z-Richtung nicht über die ganzen Seitenflächen erstrecken. Das zeigt Abbildung 3.2. Die Schichten der Batterie sind neben der X-Richtung auch zu der Z-Richtung parallel. Deshalb ist die Komponente der Wärmeleitfähigkeit in der dritten Raumrichtung identisch zu der in der ersten, wie es auch Gleichung (3.3) zeigt. Deshalb wäre zu erwarten, dass sich die Maximal- und die Mitteltemperatur ähnlich zu dem 2D-Fall verhalten.

Diese Erwartung wird auch bestätigt, wie es Abbildung 7.18 zeigt. Diese stellt den Verlauf der Maximaltemperatur  $T_{\text{max}}$  und der Mittel  $T_{\text{avg}}$  des Stacks über die Zeit bei Boden- und Tabkühlung für die 2D- und 3D-Geometrie dar, vergleiche Gleichung (7.20), Gleichung (7.21) sowie



Gleichung (7.27) und Gleichung (7.28). Einerseits wird festgestellt, dass die Bodenkühlung auch im 3D-Fall zu niedrigeren Temperaturen als die Tabkühlung führt. Dies kann analog zum 2D-Fall begründet werden. Andererseits ist zu erkennen, dass bei beiden Kühlmöglichkeiten der 2D- und 3D-Fall zu ähnlichen Verläufen führen. Das bestätigt die wegen der Struktur der Batterie und der Wärmeleitfähigkeit formulierte Erwartungen. Allerdings kann sowohl bei der Tab- als auch bei der Bodenkühlung ein Unterschied zwischen dem 2D- und 3D Fall festgestellt werden. Im Letzteren sind die Temperaturen etwas niedriger. Da der Unterschied maximal 0.3 K beträgt, ist er für beide Kühlmöglichkeiten in den Anwendungen vernachlässigbar. Somit ist es für die in dieser Arbeit betrachteten Anwendungsfällen ausreichend die Batterie in 2D zu simulieren. Die komplette 3D-Simulation wird erst benötigt falls entweder die Wärmeleitfähigkeit in allen drei Raumrichtungen verschiedene Komponenten hat oder sich die Rand- und Anfangsbedingungen nicht in 2D abbilden lassen. Letzteres wäre z.B. der Fall, falls bei der Bodenkühlung die Kühlplatte nicht unter der kompletten Batterie läge.

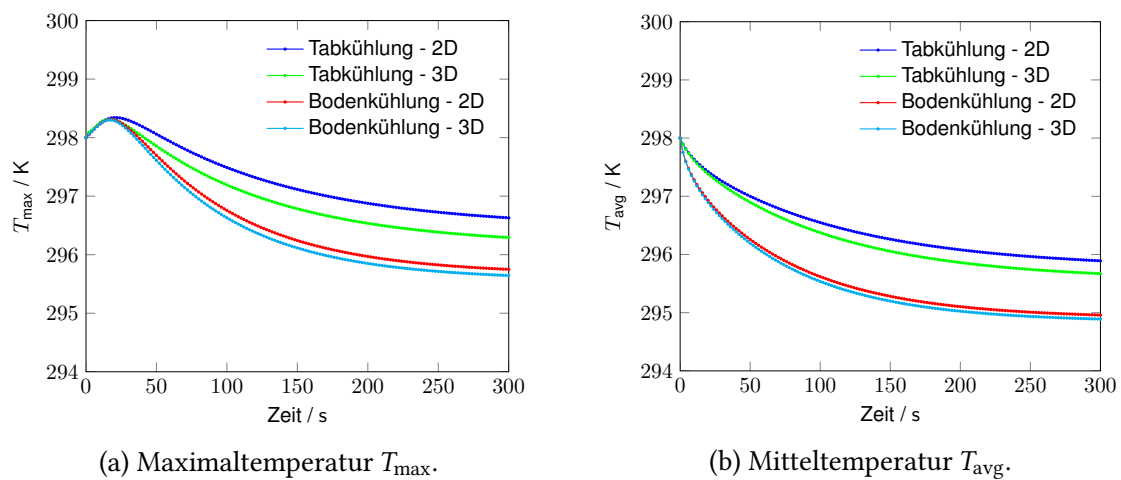


Abbildung 7.18.: Vergleich des Verlaufs der Maximaltemperatur  $T_{\max}$ , Abbildung 7.18a, und der Mitteltemperatur  $T_{\text{avg}}$ , Abbildung 7.18b, des Stacks über die Zeit bei Boden- und Tabkühlung für die 2D-, vergleiche Gleichung (A.2), und 3D-Geometrie, vergleiche (A.3), unter denselben Anfangs- und Randbedingungen.

Damit wurde die in Kapitel 5 und 6 entwickelte Methode auf das Batterieproblem (7.1) für verschiedene Anwendungsfälle für die 2D- und 3D-Geometrie angewendet. Es wurde unter anderem festgestellt, dass sich die Anwendung in einem über die praktische Anwendungen definierten Sinne lohnt. Somit wurde auch der dritte Punkt in der Einleitung formulierten Ziele der Arbeit, also die Anwendung der entwickelten Methode auf thermische Simulationen in LIB, bearbeitet.

## 8. Zusammenfassung

In dieser Arbeit wurde eine numerische Homogenisierungsmethode, die FE-HMM, in der Finite-Elemente-Bibliothek *deal.II* implementiert und auf eine nichtlineare PDGI angewendet, die thermische Prozesse in großformatigen Lithium-Ionen-Batterien zu beschreibt. Damit konnte die homogenisierte Lösung dieser nichtlinearen PDGI effizient numerisch berechnet und das makroskopische Verhalten der Temperaturverteilung in der Batterie untersucht werden.

Die Notwendigkeit der Anwendung numerischer Homogenisierung folgt aus der inneren Struktur und aus den Materialeigenschaften der betrachteten Batterie. Wegen der hohen Anzahl der sich abwechselnden Ableiter- und Aktivmaterialschichten muss die Mikrostruktur mit dem Gitter aufgelöst werden, was eine Simulation der nicht homogenisierten Gleichung mit Standardmethoden, wie z.B. der FEM, zeit- und speicheraufwendig macht. Somit werden Multiskalen-Methoden benötigt. Die Nichtlinearität der Wärmeleitfähigkeit im Aktivmaterial lässt eine explizite Berechnung des homogenisierten Koeffizienten nicht zu und schließt somit die vollständige analytische Homogenisierung des Problems aus.

Um die Herausforderungen bei der Anwendung der Methode zu identifizieren, wurden Ergebnisse sowohl aus der numerischen als auch aus der analytischen Homogenisierung wiederholt. Damit konnten die Stellen, für die die existierende FE-HMM weiterentwickelt werden musste, identifiziert werden. Bisher wurde die FE-HMM noch auf keine quasilineare parabolische Probleme angewendet, bei denen die Zeitableitung im Zusammenhang mit nichtlinearen, im Ort unstetigen Multiskalen-Koeffizienten verbunden ist und der Quellterm der Gleichung ebenfalls nichtlinear und unstetig Ort ist. Da das Batterieproblem genau ein solches Problem ist, wurde die Methode für solche erweitert. Dazu wurde die Methode in mehreren Schritten ausgehend von der analytischen Homogenisierung einer einfachen quasilinearen parabolischen Gleichung auf entsprechende Probleme erweitert. Während der homogenisierte Koeffizient der Zeitableitung analytisch berechnet wurde, wurde für den Diffusionsterm der Gleichung die FE-HMM verwendet. Das bedeutet, dass für die Anwendung der Methode die analytische und numerische Homogenisierung kombiniert wurden. Da diese Methode zunächst nur für Probleme mit global beschränkten Koeffizienten gültig war, wurde sie unter gewissen Annahmen für unbeschränkte erweitert. Dafür wurde die Beschränktheit der Lösung angenommen, die im Falle des Batterieproblems mit Hilfe eines Vergleichsprinzips verifiziert wurde. Unter zusätzlichen Annahmen an die homogenisierten Koeffizienten und die Lösung konnten für die erweiterte Methode dieselben Fehlerabschätzungen wie bei der

FE-HMM gezeigt werden. Diese wurden an geeigneten Testproblemen mit Hilfe der MMS verifiziert.

Das FE-HMM-Framework wurde in der Finite-Elemente-Bibliothek *deal.II* implementiert. Dabei wurde erst die übliche Bilinearform verwendet. Es wurde festgestellt, dass diese Wahl wegen einer unglücklichen Wahl der Datenstruktur in *deal.II* zu vollen Besetzungsstrukturen und damit zu langen Rechenzeiten führt. Deshalb wurde sowohl die Bilinearform als auch der Mikro-FE-Raum umformuliert. Damit konnte bei einem identischen Konvergenzverhalten die Rechenzeit deutlich reduziert werden. Um die Methode auch im Ort adaptiv verwenden zu können, wurde ein Fehlerschätzer implementiert. Dieser wurde bis jetzt nur für Triangulierungen in Dreieckselemente umgesetzt, was in *deal.II* nicht möglich ist. Die dafür benötigten Mehrskalennäherungen wurden ausgehend von der DG-HMM als bilineare Interpolation auf den Viereckselementen definiert. Für die Verifizierung der adaptiven Methode wurde wieder die MMS verwendet.

Die so verbesserte Methode wurde schließlich auf das Batterieproblem angewendet. Es wurde gezeigt, dass im Sinne von über die Anwendungen definierten Fehlerschranken, die Anwendung dieser im Vergleich zum Standard-FEM und zu der in OpenFOAM entwickelten LBF lohnt. An verschiedenen Anwendungsbeispielen, die verschiedene Kühlmöglichkeiten der Batterie unter unterschiedlichen Randbedingungen modellieren, wurde das Potential der Methode an dem zwei- und dreidimensionalen Batteriemodell gezeigt. Dabei wurden wichtige Kenngrößen, wie die Maximal- und Mitteltemperatur betrachtet.

Ein wichtiger Aspekt dieser Arbeit ist, dass die entwickelte Methode zwar über das Batterieproblem motiviert und auf dieses angewendet wurde, sie ist aber allgemein formuliert und implementiert. Das bedeutet, dass sie auf Multiskalenprobleme, die eine ähnliche Struktur besitzen und deren Koeffizienten die entsprechenden Forderungen erfüllen, ebenfalls anwendbar ist. Wird das zugrunde liegende Modell genauer betrachtet, werden auch die potentiellen Entwicklungsmöglichkeiten der Methode hinsichtlich des Batterieproblems klar. Um weitere wichtige Prozesse in LIB abzubilden, sollte ein elektrochemisches Modell an das thermische gekoppelt und somit ein System von PDGln gelöst werden. Dadurch wird auch der Ladezustand der Batterie mit der Zeitvariablen verknüpft. Das führt zu der Betrachtung von Lade-Entladenzyklen. Um die Betrachtung von Alterungsprozessen zu ermöglichen, also eine hohe Anzahl von solchen Zyklen zu simulieren, könnte die Methode um eine weitere Multiskalarität in der Zeit erweitert werden. Dabei wäre eine Zeitperiode ein Lade-Entladezyklus der Batterie und die Koeffizienten würden neben dem Ort auch von dem Ladezustand und der Anzahl an Zyklen abhängen, also von unterschiedlichen Zeitskalen.

# A. Modellparameter

In diesem Anhang werden erst die Maße der dieser Arbeit zu Grunde liegenden SLPB 8043140H5 Zelle von Kokam Co., Ltd. bzw. ihrer Komponenten und dann ihre Materialeigenschaften angegeben.

## A.1. Modellparameter

Tabelle A.1 stellt die Maße der Komponenten der Zelle dar. Es ist wichtig zu erwähnen, dass sowohl der äußere Separator als auch die Aluminiumverbundfolie die Zelle, abgesehen von den Ableitertabs, umhüllen. Außerdem laufen die jeweiligen Ableiterschichten in einer 0.0002 m breiten Ableiterschicht an der Seite der Zelle zusammen. Die Höhe des Stacks ergibt sich als Summe der Gesamthöhe der Atktivmaterialsichten,  $h_{AM,ges} := 0.005\,870\,7$  m, der Anoden-,  $h_{ACC,ges} := 0.000\,831\,6$  m, und Kathodenableiterschichten,  $h_{CCC,ges} := 0.000\,761\,6$  m. Um die Dicke einer einzelnen Schicht zu bekommen, werden diese Werte durch die Anzahl der jeweiligen Schichten geteilt. Aus den Werten der Tabelle A.1 ergibt sich die Gesamtlänge, 0.169 387 6 m, die Gesamthöhe, 0.007 851 5 m, und die Gesamttiefe, 0.039 887 6 m, der Zelle.

Tabelle A.1.: Dimensionen der Komponenten Zelle.

Komponente	Länge / m	Tiefe / m	Höhe / m
Stack	0.112	0.0395	0.0074639
Ableitertab	0.0273	0.02	0.0002
Zwischenraum am Kathodentab	0.001	0.0395	0.0002031
Zwischenraum am Anodentab	0.001	0.0395	0.0002003
äußerer Separator	0.000038	0.000038	0.000038
Aluminiumverbundfolie	0.0001558	0.0001558	0.0001558

Aus den Werten von Tabelle A.1 kann das Gebiet  $\Omega$  für Gleichung (7.1) definiert werden. Wird nur der Stack in 2D, wie es in Kapitel 7.2 der Fall ist, betrachtet, gilt

$$\Omega_{\text{Stack}} := (0, 0.112) \times (0, 0.0074639). \quad (\text{A.1})$$

Falls wie in Kapitel 7.3 die komplette 2D-Geometrie betrachtet wird, ergibt sich nach der Beschreibung in Kapitel 3.2  $\Omega_{\text{Stack}}$  als die Vereinigung des mit dem äußeren Separator und

der Aluminiumverbundfolie umhüllten Stacks und der zwei Ableitertabs. Somit gilt

$$\begin{aligned} \Omega_{2D} := & (0, 0.1147876) \times (0, 0.0078515) \cup \\ & (-0.0271062, 0] \times (0.00382575, 0.00402575) \cup \\ & [0.1147876, 0.1418938) \times (0.00382575, 0.00402575). \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

Analog zu  $\Omega_{2D}$  kann auch  $\Omega_{3D}$  als

$$\begin{aligned} \Omega_{3D} := & (0, 0.1147876) \times (0, 0.0078515) \times (0, 0.0388876) \cup \\ & (-0.0271062, 0] \times (0.00382575, 0.00402575) \times (0.0094438, 0.0294438) \cup \\ & [0.1147876, 0.1418938) \times (0.00382575, 0.00402575) \times (0.0094438, 0.0294438). \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

definiert werden.

## A.2. Materialeigenschaften

Die Materialeigenschaften der einzelnen Komponenten der Batterie werden in Tabelle A.2 gezeigt. Dabei steht die Abkürzung *AM* für Aktivmaterial, *ACC* für Anodenableiter, *CCC* für Kathodenableiter, *Al* für Aluminiumverbundfolie und *Sep* für äußeren Separator. Die nichtlineare Wärmeleitfähigkeit und spezifische Wärmekapazität im Aktivmaterial wurden in Kapitel 3.3 in Gleichung (3.4) angegeben.

Tabelle A.2.: Konstante Materialeigenschaften.

Komponente	$\rho / \text{kg/m}^3$	$c_p / \text{J kg}^{-1} \text{K}^{-1}$	$\lambda / \text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$
AM	2094.302	$c_p(T)$	$\lambda(T)$
ACC	8710.2	384.65	398.71
CCC	2706.77	897.8	236.30
Argon	1.784	524	0.01772
Al	1452.5	1300.2	0.3442
Sep	1138.729	1699.897	0.2515

Tabelle A.3 stellt die Parameter des nichtlinearen Wärmequellterms (3.5) dar, die von den Randbedingungen und der Stromstärke abhängen, unter denen sie gemessen wurden. Für die anderen, in Gleichung (3.5) vorkommenden Parameter, gilt

$$\begin{aligned} R_{\text{col}} &= 5.301 \times 10^{-5} \Omega, \\ k &= 9.80 \times 10^{-11} \Omega, \\ E_A &= 0.5 \text{ eV}, \\ R &= 8.617 \times 10^{-5} \text{ kg m}^2 / (\text{s}^2 \text{ mol K}), \\ \frac{\partial U_{\text{OCV}}}{\partial T} &= 0.000173. \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

Tabelle A.3.: Parameter für den Wärmequellterm.

Randbedingung	a	b	c
hom.: 25 °C	1.106	4.786	261.7
inhom.: 0 °C–50 °C	1.150	5.781	259.5

Da das Problem keine speziellen Größen enthält, werden für die Entdimensionalisierung alle Referenzgrößen als eins gewählt. Das resultiert in dimensionslosen Parametern, die dieselben Werte haben wie in den Tabellen A.1 und A.2 haben. Deshalb werden sie auch identisch bezeichnet.

## B. Numerische Methoden – FEM und DG

In diesem Anhang wird die Herleitung der Finite-Elemente-Methode und Symmetric-Interior-Penalty-Discontinuous-Galerkin-FEM für ein elliptisches Problem gegeben. Da in diesem Anhang keine anderen Methoden vorkommen, werden für sie die Abkürzungen FEM und DG benutzt. Bei der Herleitung soll es hauptsächlich um die Ideen und um die Definition der in den anderen Kapiteln verwendeten Linear- und Bilinearformen gehen. Auf diesen basieren z.B. die in Kapitel 4.3 vorgestellten numerische Multiskalen-Methoden. Außerdem wird mit der FEM unter anderem die Referenzlösung in Kapitel (7.2) berechnet und mit der FE-HMM-Lösung verglichen.

Es wird das folgende lineare elliptische Problem mit Dirichlet-Randbedingungen behandelt: Finde  $u \in \mathcal{H}^1(\Omega)$  so, dass

$$\begin{aligned} -\nabla \cdot (a(x)\nabla u(x)) &= f(x) && \text{für alle } x \in \Omega, \\ u(x) &= 0 && \text{für alle } x \in \partial\Omega \end{aligned} \tag{B.1}$$

erfüllt ist. Dabei ist  $\Omega \subset \mathbb{R}^d$  ein beschränktes Lipschitz-Gebiet. Nach dem Satz von Lax–Milgram, Satz 2.4, hat dieses Problem eine eindeutige Lösung  $u \in \mathcal{H}_0^1(\Omega)$ , falls  $f \in \mathcal{H}^{-1}(\Omega)$  und  $a$  die Voraussetzungen von Definition 2.3 erfüllt.

### B.1. Kurze Herleitung der FEM

Die Diskussion der FEM basiert auf [43, Kap. 3]. Um mit der FEM Gleichung (B.1) zu lösen, wird zunächst die schwache Formulierung der Gleichung betrachtet. Dazu wird sie mit einer Testfunktion  $z \in \mathcal{H}_0^1(\Omega)$  multipliziert und abschließend wird partiell integriert. Es folgt

$$B_{\text{FE}}(u, z) = F(z) \quad \forall z \in \mathcal{H}_0^1(\Omega),$$

wobei die Bilinearform als

$$B_{\text{FE}}(u, z) := \int_{\Omega} a \nabla u \cdot \nabla z \, dx$$

und die Linearform als

$$F(z) := \int_{\Omega} f z \, dx$$

definiert sind. Der nächste Schritt ist die Definition eines endlich dimensionalen Unterraumes von  $\mathcal{H}_0^1(\Omega)$ . Der FE-Raum wird als

$$\mathcal{V}_{\text{FE}}^p(\Omega, \mathcal{T}_H) := \{v^H \in \mathcal{H}_0^1(\Omega) \mid v^H|_K \in \mathcal{R}^p(K) \text{ für alle } K \in \mathcal{T}_H\} \subset \mathcal{H}_0^1(\Omega)$$

definiert. Dabei ist  $\mathcal{T}_H$  eine im Sinne von [43, Kap. 2.5] zulässige Triangulierung von  $\Omega$  in Vierecke in 2D, bzw. Quader in 3D und  $\mathcal{R}^p(K)$  der Raum aller Polynome über  $K \in \mathcal{T}_H$ , die in jeder Komponente einen Maximalgrad von  $p$  haben. Damit wird die Lösung  $u^H \in \mathcal{V}_{\text{FE}}^p(\Omega, \mathcal{T}_H)$  von

$$B_{\text{FE}}(u^H, z^H) = F(z^H) \quad \forall z^H \in \mathcal{V}_{\text{FE}}^p(\Omega, \mathcal{T}_H) \quad (\text{B.2})$$

gesucht. Nun wird  $u^H$  in der Basis  $\{\varphi_1, \dots, \varphi_N\} \subset \mathcal{V}_{\text{FE}}^p(\Omega, \mathcal{T}_H)$  mit  $N \in \mathbb{N}$  als

$$u^H = \sum_{j=1}^N u_j \varphi_j$$

entwickelt. Diese Entwicklung wird in Gleichung (B.2) eingesetzt und für die Testfunktion  $z^H$  die Basisfunktion  $\varphi_i$  mit  $i \in \{1, \dots, N\}$  gewählt. Es folgt

$$B_{\text{FE}}\left(\sum_{j=1}^N u_j \varphi_j, \varphi_i\right) = F(\varphi_i).$$

Wird diese Gleichung für alle  $i \in \{1, \dots, N\}$  aufgestellt, folgt für den diskreten Vektor  $\bar{u} := (u_1, \dots, u_N)$  das LGS

$$B\bar{u} = F.$$

Dabei wird die System-Matrix  $B \in \mathbb{R}^{N \times N}$  als

$$B_{i,j} := B_{\text{FE}}(\varphi_j, \varphi_i)$$

und die rechte Seite  $F \in \mathbb{R}^N$  als

$$F_i := F(\varphi_i) \quad (\text{B.3})$$

definiert.

Das LGS wird in dieser Arbeit entweder mit dem in Kapitel 5.1 kurz diskutierten direkten *deal.II*-internen Löser `SparseDirectUMFPACK` [61] oder mit dem CG-Verfahren [130] gelöst. Letzteres hat den Vorteil, dass durch die geeignete Wahl des Startvektors die Anzahl der CG-Iterationen reduziert werden kann. Die für das CG-Verfahren verwendete Vorkonditionierer werden an der Stelle der Verwendung kurz diskutiert.



## B.2. Kurze Herleitung der DG

Die Diskussion der DG basiert auf [62]. Anders als bei der FEM im Anhang B.1 wird hier das elliptische Problem (B.1) statt mit homogenen mit inhomogenen Dirichlet-Randbedingungen betrachtet. Somit gilt für  $u^D \in \mathcal{H}^1(\Omega)$  auf  $\partial\Omega$

$$u(x) = u^D(x).$$

Hier wird der endlich dimensionale Raum als

$$\mathcal{V}_{\text{DG}}^p(\Omega, \mathcal{T}_H) := \{v^H \in \mathcal{L}^2(\Omega) \mid v^H|_K \in \mathcal{R}^p(K), \text{ für alle } K \in \mathcal{T}_H\}$$

gewählt. Dabei sind  $\mathcal{T}_H$  und  $\mathcal{R}^p(K)$  wie im Anhang B.1 definiert. Im Gegensatz zu der FEM gilt hier  $\mathcal{V}_{\text{DG}}^p(\Omega, \mathcal{T}_H) \not\subset \mathcal{H}^1(\Omega)$ . Analog zum Anhang B.1 wird die schwache Formulierung der Gleichung hergeleitet. Allerdings kommen in der Bilinearform wegen der Unstetigkeit der Lösung und der Testfunktionen an den Kanten der Triangulierung auch Kantenterme vor. Wie es in der Einleitung 1 erwähnt wurde, wird in dieser Arbeit die *Symmetric-Interior-Penalty-Discontinuous-Galerkin-FEM* verwendet. Dabei werden zu der Bilinearform Terme hinzugefügt, die ihre Symmetrie und die Stabilität des Verfahrens garantieren sollen. Somit wird die verwendete Bilinearform als

$$\begin{aligned} B_{\text{DG}}(u^H, z^H) &:= \int_{\Omega} a \nabla u^H \cdot \nabla z^H \, dx \\ &\quad - \sum_{e \in \mathcal{E} \setminus \partial\Omega_{\text{N}}} \int_e \left( \{a \nabla u^H\}_\gamma^e \llbracket z^H \rrbracket_e + \{a \nabla z^H\}_\gamma^e \llbracket u^H \rrbracket_e \right) d\tilde{a} \\ &\quad + \sum_{e \in \mathcal{E} \setminus \partial\Omega_{\text{N}}} \int_e \mu_e \llbracket u^H \rrbracket_e \llbracket z^H \rrbracket_e d\tilde{a} \quad \text{für alle } z \in \mathcal{V}_{\text{DG}}^p(\Omega, \mathcal{T}_H) \end{aligned}$$

und die Linearform als

$$F_{\text{DG},H}(z^H) := \sum_{K \in \mathcal{T}_H} \int_K f z^H \, dx + \sum_{e \in \mathcal{E} \setminus \partial\Omega_{\text{N}}} \int_e u^D (\mu_e z^H - a \nabla z^H \cdot \mathbf{n}) d\tilde{a}$$

definiert. Dabei bezeichnet  $\partial\Omega_{\text{N}}$  den Neumann-Rand, der bei Gleichung (B.1) die leere Menge ist. Die Gewichtsfunktion  $\gamma_e$ , die Straf-Funktion  $\mu_e$  und der Straf-Parameter  $\kappa$  werden in Kapitel 5.3 diskutiert. Der Sprung  $\llbracket \cdot \rrbracket_e$  und der Mittelwert  $\{\cdot\}$  über eine Kante  $e \in \mathcal{E}$  wurde in Kapitel 2.1 in den Gleichungen (2.8) und (2.9) definiert. Die Lösung von Gleichung (B.1) mit der DG wird damit als  $u^H \in \mathcal{V}_{\text{DG}}^p(\Omega, \mathcal{T}_H)$  mit

$$B_{\text{DG}}(u^H, z^H) = F_{\text{DG},H}(z^H)$$

gesucht. Das Aufstellen der System-Matrix und des Vektor der rechten Seite und das Lösen des LGS erfolgt analog zum Anhang B.1.

### B.3. Quadraturformeln

Nachdem im Anhang B.1 und B.2 beschrieben wurde wie das zur FEM und der DG gehörende LGS aufgestellt wird, wird hier die Berechnung der Elemente der System-Matrix und der rechten Seite diskutiert. Dazu wird numerische Quadratur verwendet. Die folgende Diskussion darüber basiert auf [19, 5, 55]. Um eine Quadraturformel definieren zu können, wird das Referenzelement  $\hat{K}$  der Triangulierung  $\mathcal{T}_K$  betrachtet. Da in dieser Arbeit wegen der Implementierung in *deal.II* nur Triangulierungen in Vierecke bzw. in Hexaeder berücksichtigt werden, ist  $\hat{K}$  das Einheitsquadrat bzw. der Einheitswürfel. Eine Quadraturformel  $\{\hat{x}_j, \hat{\omega}_j\}_{j=1}^J$  auf  $\hat{K}$  ist durch die Quadraturpunkte  $\hat{x}_j \in \hat{K}$  und die Quadraturgewichte  $\hat{\omega}_j > 0$  gegeben. Diese sollen für  $\hat{\lambda} > 0$  folgende Bedingungen erfüllen:

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^J \hat{\omega}_j |\nabla \hat{p}(\hat{x}_j)|^2 &\geq \hat{\lambda} \|\nabla \hat{p}\|_{\mathcal{L}^2(\hat{\Omega})}^2 & \forall \hat{p}(\hat{x}) \in \mathcal{R}^p(\hat{K}), \\ \int_{\hat{K}} \hat{p}(\hat{x}) d\hat{x} &= \sum_{j=1}^J \hat{\omega}_j \hat{p}(\hat{x}_j) & \forall \hat{p}(\hat{x}) \in \mathcal{R}^\sigma(\hat{K}), \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

wobei  $\sigma = \max(2p - 1, p + 1)$ .

Um eine Quadraturformel für jedes Element  $K \in \mathcal{T}_H$  zu erhalten, wird für jedes  $K \in \mathcal{T}_H$  ein  $C^1$ -Diffeomorphismus  $F_K$ , also eine bijektive stetig differenzierbare Abbildung mit stetig differenzierbarer Umkehrabbildung, mit  $K = F_K(\hat{K})$  betrachtet. Mit dieser Abbildung wird die auf  $\hat{K}$  gegebene Quadraturformel  $\{\hat{x}_j, \hat{\omega}_j\}_{j=1}^J$  auf  $K \in \mathcal{T}_H$  abgebildet. Somit gelten  $x_{K,j} = F_K(\hat{x}_j) \in K$  und  $\omega_{K,j} = \hat{\omega}_j |\det(\partial F_K)|$ .

Die erste Bedingung von Gleichung (B.4) wird auch Elliptizitätsbedingung genannt, da daraus die Elliptizität der über diese Quadraturformel definierten Bilinearform

$$B_H(v^H, z^H) := \sum_{K \in \mathcal{T}_H} \sum_{j=1}^J \omega_{K,j} a(x_{K,j}) \nabla v^H(x_{K,j}) \cdot \nabla z^H(x_{K,j}) \quad (\text{B.5})$$

gezeigt werden kann. Die zweite Eigenschaft in Gleichung (B.4) wird als Approximationseigenschaft bezeichnet, da daraus unter anderem nach [54, Kap. 29] die Fehlerabschätzung für  $f \in \mathcal{H}^1(\Omega)$

$$|F_H(z^H) - F(z^H)| \leq CH \|z^H\|_{\mathcal{H}^1(\Omega)} \quad \text{für alle } z^H \in \mathcal{V}_{\text{FE}}^p(\Omega, \mathcal{T}_H), p \geq 1 \quad (\text{B.6})$$

folgt. Dabei wurde die Linearform  $F$  in Gleichung (B.3) und  $F_H$  mit Hilfe der Quadraturformel, die die Eigenschaften in Gleichung (B.4) erfüllt, als

$$F_H(z^H) := \sum_{K \in \mathcal{T}_H} \sum_{j=1}^J \omega_{K,j} f(x_{K,j}) z^H(x_{K,j})$$

definiert.

Ein Beispiel für eine Quadraturformel in 2D, welche die Bedingung (B.4) erfüllt und die auch in dieser Arbeit verwendet wird, ist die Gauß-Quadratur mit je zwei Quadraturpunkten pro Raumrichtung. Diese ist für  $\hat{K} = [0, 1]^2$  durch  $\{\hat{x}_j, \hat{\omega}_j\}_{j=1}^4$  mit  $\hat{x}_{K,j} = (1/2 \pm \sqrt{3}/6, 1/2 \pm \sqrt{3}/6)$  und  $\hat{\omega}_{K,j} = 1/4$  gegeben.

## C. Vergleichsprinzip für quasilineare parabolische PDGln

In diesem Anhang wird das Vergleichsprinzip aus [28] für das Batterieproblem (7.1) angewendet und mit ihm für die Lösung von Gleichung (7.1) eine untere und obere Schranke in der  $\mathcal{L}^\infty$ -Norm bestimmt. Das Ziel ist es zu zeigen, dass die Lösung sich in dem Temperaturbereich befindet, wo nach [104, Kap. 13] LIB benutzt werden sollen. Dafür wird zunächst das Vergleichsprinzip aus [28] zitiert und dann für Probleme, die die Form des Batterieproblems haben, bewiesen. Anschließend werden mit Hilfe einer Sub- und Superlösung die gesuchte Schranken bestimmt.

In [28] werden Probleme über ein beschränktes Lipschitz-Gebiet  $\Omega$  mit einem messbaren Teil des Randes  $\Gamma \subset \partial\Omega$  der Form

$$\begin{aligned} \partial_t b(u) - \nabla \cdot a(b(u), \nabla u) &= f(b(u)) && \text{in } \Omega_{t_{\text{end}}}, \\ b(u) &= b(u^0) && \text{auf } \{0\} \times \Omega, \\ u &= u^D && \text{auf } ]0, t_{\text{end}}[ \times \Gamma, \\ a(b(u), \nabla u) \cdot \mathbf{n} &= 0 && \text{auf } ]0, t_{\text{end}}[ \times (\partial\Omega \setminus \Gamma) \end{aligned} \quad (\text{C.1})$$

betrachtet. Dabei wird die Lösung  $u$  in dem Raum  $u^D + \tilde{\mathcal{E}}$  gesucht. Die Räume  $\mathcal{E}$  und  $\tilde{\mathcal{E}}$  werden als

$$\begin{aligned} \mathcal{E} &:= \{v \in \mathcal{W}^{1,r}(\Omega) \mid v = 0 \text{ auf } \partial\Omega\}, \\ \tilde{\mathcal{E}} &:= \mathcal{L}^r(0, t_{\text{end}}; \mathcal{E}) \end{aligned} \quad (\text{C.2})$$

definiert. Sie entsprechen für den Fall  $r = 2$  den in Kapitel 4.2.3, Gleichung (4.14) definierten Räumen  $E$  und  $\tilde{E}$ . Die Voraussetzung an die Koeffizienten sind ähnlich zu denen in Kapitel 4.2.3 und sind folgende:

- $a(\bar{s}, \xi)$  ist stetig in beiden Variablen. Außerdem existieren Konstanten  $\beta > 0$  und  $1 < r < \infty$  so, dass für alle  $\bar{s} \in \mathbb{R}$  und  $\xi_1, \xi_2 \in \mathbb{R}^d$

$$(a(\bar{s}, \xi_1) - a(\bar{s}, \xi_2)) \cdot (\xi_1 - \xi_2) \geq \beta |\xi_1 - \xi_2|^r \quad (\text{C.3})$$

erfüllt ist.

- Die Funktion  $b$  ist monoton wachsend mit  $b(0) = 0$  und es existiert eine konvexe  $C^1$  Funktion  $\Phi : \mathbb{R} \mapsto \mathbb{R}$  mit  $b = \nabla\Phi$ . Für  $s \in \mathbb{R}$  wird

$$\mathcal{B}(s) := \int_0^s (b(s) - b(\hat{s})) \, d\hat{s} > 0 \quad (\text{C.4})$$

definiert.

- Die Wachstumsbedingung

$$|a(b(s), \xi)| + |f(b(s))| \leq C(1 + \mathcal{B}(s)^{\frac{r-1}{r}} + |\xi|^{r-1}) \quad (\text{C.5})$$

soll für alle  $s \in \mathbb{R}$  und  $\xi \in \mathbb{R}^d$  mit  $r$  aus Gleichung (C.3) erfüllt sein.

- Für die Anfangs- und Randwerte gelten

$$\begin{aligned} u^D &\in \mathcal{L}^2(0, t_{\text{end}}; \mathcal{W}^{1,2}(\Omega)) \cap \mathcal{L}^\infty(\Omega_{t_{\text{end}}}), \\ \mathcal{B}(b(u^0)) &\in \mathcal{L}^1(\Omega). \end{aligned} \quad (\text{C.6})$$

Falls ein  $u \in u^D + \tilde{\mathcal{E}}$  mit  $b(u) \in \mathcal{L}^\infty(0, t_{\text{end}}; \mathcal{L}^1(\Omega))$  und  $\partial_t b(u) \in \mathcal{L}^{r^*}(0, t_{\text{end}}; \mathcal{E}^*)$  die Bedingungen

$$\int_0^{t_{\text{end}}} \int_\Omega \partial_t b(u) z \, dt + \int_0^{t_{\text{end}}} \int_\Omega (b(u) - b(u^0)) \partial_t z \, dx \, dt = 0 \quad (\text{C.7})$$

für alle  $z \in \tilde{\mathcal{E}} \cap \mathcal{W}^{1,1}(0, t_{\text{end}}; \mathcal{L}^\infty(\Omega))$  mit  $z(t_{\text{end}}) = 0$  und

$$\int_0^{t_{\text{end}}} \int_\Omega \partial_t b(u) z \, dt + \int_0^{t_{\text{end}}} \int_\Omega a(b(u), \nabla u) \cdot \nabla z \, dx \, dt = \int_0^{t_{\text{end}}} \int_\Omega f(b(u)) z \, dx \, dt \quad (\text{C.8})$$

für alle  $z \in \tilde{\mathcal{E}}$  erfüllt, heißt  $u$  eine schwache Lösung von Gleichung (C.1).

Wird die Gleichung (C.7) in der Zeit partiell integriert, folgt mit  $z(t_{\text{end}}) = 0$

$$\int_\Omega (b(u(0, \cdot)) - b(u^0)) z(0, \cdot) \, dx \, dt = 0. \quad (\text{C.9})$$

Nach [28, Def. 2.1] heißt  $u \in \mathcal{L}^r(0, t_{\text{end}}; \mathcal{W}^{1,r}(\Omega))$  eine *Sub-* bzw. *Superlösung* von Gleichung (C.1) falls  $u \leq u^D$  bzw.  $u \geq u^D$  auf  $]0, t_{\text{end}}[ \times \Gamma$  und die Gleichung (C.9) für  $z(0) \leq 0$  mit  $\geq$  bzw. mit  $\leq$  und die Gleichung (C.8) für  $z \geq 0$  mit  $\leq$  bzw. mit  $\geq$  statt = gilt.

Nach dem Vergleichsprinzip, [28, Satz 2.2], gilt für eine Sublösung  $u_-$  und eine Superlösung  $u_+$  falls  $a$  Hölder-stetig mit Exponent  $1/2$ ,  $f$  Lipschitz-stetig und  $\partial_t(b(u_- - u_+))$  integrierbar ist

$$u_- \leq u_+.$$

Um mit diesem Prinzip eine untere und obere Schranke für die Lösung von Gleichung (7.1) finden zu können, müssten erst Entsprechungen für die Koeffizienten gefunden werden. Beim parabolischen Teil entspricht  $b(u)$  dem Produkt  $\rho c_p(u)u$ . Allerdings hängen weder der elliptische Teil noch die rechte Seite des Batterieproblems (7.1) von  $\rho c_p(u)u$  ab. Somit kann das Vergleichsprinzip aus [28] nicht direkt auf das Batterieproblem (7.1) angewendet werden.

Im Folgenden wird bewiesen, dass das Vergleichsprinzip auch für Probleme, die die Form des Batterieproblems haben, gültig ist. Somit wird Problem (C.1) mit  $a(u)\nabla u$  statt  $a(b(u), \nabla u)$  und mit  $f(u)$  statt  $f(b(u))$  betrachtet, also Probleme der Form

$$\begin{aligned} \partial_t b(u) - \nabla \cdot (a(u)\nabla u) &= f(u) && \text{in } \Omega_{t_{\text{end}}}, \\ b(u) &= b(u^0) && \text{auf } \{0\} \times \Omega, \\ u &= u^D && \text{auf } ]0, t_{\text{end}}[ \times \Gamma, \\ (a(u)\nabla u) \cdot \mathbf{n} &= 0 && \text{auf } ]0, t_{\text{end}}[ \times (\partial\Omega \setminus \Gamma). \end{aligned} \tag{C.10}$$

**Satz C.1 (Variante des Vergleichsprinzips)** Für das Gebiet  $\Omega$  gelten dieselben Voraussetzungen wie bei Gleichung (C.1). Für die Koeffizienten werden folgenden Bedingungen vorausgesetzt:

- Für die Funktion  $b$  gelte die Bedingung (C.4) wie in [28].
- Der Koeffizient  $a$  sei zulässig und Lipschitz-stetig. Außerdem gelte für  $s_1 > s_2$  die Abschätzung

$$a(s_1) - a(s_2) \leq C(b(s_1) - b(s_2)). \tag{C.11}$$

- Die rechte Seite  $f$  sei stetig und eine zu Ungleichung (C.11) analoge Abschätzung gelte. Für  $s_1 > s_2$  gelte also

$$f(s_1) - f(s_2) \leq C(b(s_1) - b(s_2)). \tag{C.12}$$

- Für die Anfangs- und Randwerte gelte Bedingung (C.6).

Analog zu [28] wird  $u \in u^D + \tilde{\mathcal{E}}$  mit  $b(u) \in \mathcal{L}^\infty(0, t_{\text{end}}; \mathcal{L}^1(\Omega))$  und  $\partial_t b(u) \in \mathcal{L}^{r^*}(0, t_{\text{end}}; \mathcal{E}^*)$  mit  $r = 2$  schwache Lösung von Gleichung (C.10) genannt, falls Gleichung (C.7) und Gleichung (C.8) erfüllt sind. Weiter wird auch in der Definition der Sub- und Superlösung  $r = 2$  gesetzt. Dann gilt für eine Sublösung  $u_-$  und eine Superlösung  $u_+$  von Gleichung (C.10) falls  $\partial_t(b(u_- - u_+))$  integrierbar ist

$$u_- \leq u_+.$$

**Beweis:** Bei dem Beweis des Vergleichsprinzips für das Batterieproblem wird dem Beweis von [28, Satz 2.2] gefolgt. Sei nun  $u_-$  eine Sub- und  $u_+$  eine Superlösung von Gleichung (C.10). Für ein kleines  $\delta > 0$  wird

$$\Psi_\delta(s) := \min\{1, \max\{s/\delta, 0\}\} \geq 0$$

definiert. Für die Ableitung von  $\Psi_\delta$  gilt

$$\nabla \Psi_\delta(s) = \chi_{\{0 < s < \delta\}} \frac{1}{\delta}. \quad (\text{C.13})$$

Es wird  $z := \Psi_\delta(u_- - u_+)$  als Testfunktion für die Sub- und Superlösung in Gleichung (C.8) verwendet. Damit gilt

$$\begin{aligned} & \int_0^t \int_\Omega \partial_t (b(u_-) - b(u_+)) z \, dx \, ds \\ & \stackrel{(1)}{\leq} \int_0^t \int_\Omega \partial_t (b(u_-) - b(u_+)) z \, dx \, ds + \frac{1}{C\delta} \int_0^t \int_\Omega \chi_{\{0 < u_- - u_+ < \delta\}} |\nabla(u_- - u_+)|^2 \, dx \, ds \\ & \stackrel{(2)}{\leq} \int_0^t \int_\Omega \partial_t (b(u_-) - b(u_+)) z \, dx \, ds \\ & \quad + \frac{1}{\delta} \int_0^t \int_\Omega \chi_{\{0 < u_- - u_+ < \delta\}} a(u_-) \nabla(u_- - u_+) \cdot \nabla(u_- - u_+) \, dx \, ds \\ & \stackrel{(3)}{\leq} \int_0^t \int_\Omega \partial_t (b(u_-) - b(u_+)) z \, dx \, ds \\ & \quad + \frac{1}{\delta} \int_0^t \int_\Omega \chi_{\{0 < u_- - u_+ < \delta\}} [a(u_-) \nabla u_- - a(u_+) \nabla u_+ + a(u_+) \nabla u_+ - a(u_-) \nabla u_+] \cdot \nabla(u_- - u_+) \, dx \, ds \\ & \stackrel{(4)}{\leq} \int_0^t \int_\Omega \partial_t (b(u_-) - b(u_+)) z \, dx \, ds + \int_0^t \int_\Omega (a(u_-) \nabla u_- - a(u_+) \nabla u_+) \nabla z \, dx \, ds \\ & \quad + \frac{C}{\delta} \int_0^t \left[ \int_\Omega \chi_{\{0 < u_- - u_+ < \delta\}} |a(u_+) \nabla u_+ - a(u_-) \nabla u_+|^2 \right]^{\frac{1}{2}} \, dx \, ds \\ & \stackrel{(5)}{\leq} \int_0^t \int_\Omega (f(u_-) - f(u_+)) z \, dx \, ds + \frac{C}{\delta} \int_0^t \left[ \int_\Omega \chi_{\{0 < u_- - u_+ < \delta\}} |u_+ - u_-|^2 |\nabla u_+|^2 \right]^{\frac{1}{2}} \, dx \, ds \\ & \stackrel{(6)}{\leq} C \int_0^t \int_\Omega (b(u_-) - b(u_+)) z \, dx \, ds + C \int_0^t \left[ \int_\Omega \chi_{\{0 < u_- - u_+ < \delta\}} |\nabla u_+|^2 \right]^{\frac{1}{2}} \, dx \, ds \\ & \stackrel{(7)}{\leq} C \int_0^t \int_\Omega \max\{0, b(u_-) - b(u_+)\} \, dx \, ds + C \int_0^t \left[ \int_\Omega \chi_{\{0 < u_- - u_+ < \delta\}} |\nabla u_+|^2 \right]^{\frac{1}{2}} \, dx \, ds. \end{aligned}$$

Dabei wurde bei Ungleichung (1) ein positiver Term addiert und bei Ungleichung (2) die Zulässigkeit von  $a$  verwendet. Bei Ungleichung (3) wurden Terme, die in Summe Null ergeben hinzugefügt. Wegen  $u_-, u_+ \in \mathcal{L}^r(0, t_{\text{end}}; \mathcal{W}^{1,r}(\Omega))$  mit  $r = 2$  konnte bei Ungleichung (4) die Hölder-Ungleichung und Gleichung (C.13) benutzt werden. Ungleichung (5) folgt aus der Definition der Sub- und Superlösung sowie aus der Lipschitz-Stetigkeit von  $a$ . Bei Ungleichung (6) wurde Bedingung (C.12) und  $\chi_{\{0 < u_- - u_+ < \delta\}} |u_- - u_+| \leq \delta$  verwendet. Zum Schluss gilt Ungleichung (7) wegen der Monotonie von  $b$  und der Definition von  $z$  bzw.  $\Psi$ .

Der zweite Term bei der letzten Ungleichung konvergiert für  $\delta \rightarrow 0$  gegen 0. Außerdem gilt  $\Psi_\delta(s) \rightarrow \chi_{\{s > 0\}}$  für  $\delta \rightarrow 0$ . Somit konvergiert die linke Seite der Ungleichungskette für

$\delta \rightarrow 0$  wegen der Monotonie von  $b$  gegen

$$\int_0^t \int_{\Omega} \chi_{\{u_- > u_+\}} \partial_t (b(u_-) - b(u_+)) \, dx = \int_0^t \int_{\Omega} \partial_t \max\{0, b(u_-) - b(u_+)\}.$$

Aus dem Gronwall-Lemma [30, Kap. 6] folgt  $b(u_-) \leq b(u_+)$  für  $u_- > u_+$ . Daraus folgt  $b(u_-) = b(u_+)$  für  $u_- > u_+$ . Wird dieser Zusammenhang in Ungleichung (1) sowie in Ungleichung (5) mit Ausnutzung von Bedingung (C.11) eingesetzt, folgt für  $0 < u_- - u_+ < \delta$

$$\nabla(u_- - u_+) = 0.$$

Das bedeutet, dass

$$\max\{0, \min\{u_- - u_+, \delta\}\} = C$$

mit einer Konstante  $C$  gilt. Da aber  $u_- \leq u_+$  auf  $]0, t_{\text{end}}[ \times \Gamma$  und  $u_-(0, \cdot) \leq u_+(0, \cdot)$  wegen Bedingung (C.9) gelten, folgt  $C = 0$  und damit  $u_- \leq u_+$ .  $\square$

Nun kann mit diesem Prinzip eine untere und obere Schranke für die Lösung von Gleichung (7.1) gefunden werden. Dafür müssen erst die Bedingungen (C.4), (C.11) und (C.12) überprüft werden. Mit dem Vergleich der Koeffizienten folgen die Entsprechungen:  $b(u) = \rho c_p(u)u$ ,  $a(u) = \lambda(u)$  und  $f(u) = \dot{Q}_{\text{src}}(u)$ . Für die Ableitung von  $\rho c_p$  nach  $u$  gilt nach Gleichung (3.4)

$$\frac{\partial}{\partial u} (\rho c_p(u)) = \rho(1.0257 \cdot 10^{-4}u + 2.5216).$$

Da  $\rho > 0$  gilt, ist dieser Ausdruck für den Bereich, wo nach Kapitel 3.3  $c_p$  nicht konstant ist, also von 233.15 K bis 333.15 K, positiv. Somit ist das Produkt  $\rho c_p$  dort streng monoton wachsend. Daraus folgt mit der polynomiellen Form und der Stetigkeit von  $c_p$  in  $u$  die Bedingung (C.4). Da  $\lambda$  monoton fallend ist, gilt

$$(\lambda(u_1)\nabla u_1 - \lambda(u_2)\nabla u_2) \cdot (\nabla u_1 - \nabla u_2) \geq \min\{\lambda_{\text{AM},\parallel}(333.15), \lambda_{\text{AM},\perp}(333.15)\} |\nabla u_1 - \nabla u_2|^2$$

und

$$|\lambda_{\text{AM},\parallel}(u_1) - \lambda_{\text{AM},\parallel}(u_2)| = |-0.0015(u_1 - u_2)| \leq 0.0015|u_1 - u_2|. \quad (\text{C.14})$$

Für  $\lambda_{\text{AM},\perp}$  gilt eine zu der Ungleichung (C.14) analoge Aussage. Aus diesen Ungleichungen folgt, dass  $\lambda$  zulässig und Lipschitz-stetig ist.

Die Aussagen über die Differenzen, Bedingung (C.11) und (C.12) werden über Widerspruchsbeweise gezeigt. Hier wird nur der für  $\dot{Q}_{\text{src}}$  durchgeführt, der für  $\lambda$  erfolgt analog. Falls die Bedingung (C.12) nicht gilt, existieren  $s_1$  und  $s_2$  mit  $s_1 > s_2$  so, dass für eine beliebige Konstante  $C$

$$\dot{Q}_{\text{src}}(s_1) - \dot{Q}_{\text{src}}(s_2) \geq C(b(s_1) - b(s_2)) \quad (\text{C.15})$$



gilt. Da  $\dot{Q}_{\text{src}}$  und  $b(u) = \rho c_p(u)u$  beschränkt und stetig sind und  $b$  streng monoton wachsend ist, ist die Ungleichung (C.15) nur für  $\dot{Q}_{\text{src}}(s_1) - \dot{Q}_{\text{src}}(s_2) \rightarrow 0$  und  $b(s_1) - b(s_2) \rightarrow 0$  möglich. Da  $b$  streng monoton wachsend ist, ist das genau dann der Fall, falls  $s_1 \rightarrow s_2$  gilt. Werden beide Seiten von Ungleichung (C.15) durch  $s_1 - s_2 > 0$  geteilt, folgt

$$\frac{\dot{Q}_{\text{src}}(s_1) - \dot{Q}_{\text{src}}(s_2)}{s_1 - s_2} \geq C \frac{b(s_1) - b(s_2)}{s_1 - s_2}. \quad (\text{C.16})$$

Für  $s_1 \rightarrow s_2$  ist Ungleichung (C.16) erfüllt, falls ein  $s$  mit

$$\frac{\partial}{\partial s} \dot{Q}_{\text{src}}(s) \geq C \frac{\partial}{\partial s} b(s) \quad (\text{C.17})$$

existiert. Da  $\frac{\partial}{\partial s} \dot{Q}_{\text{src}}$  von oben beschränkt und  $\frac{\partial}{\partial s} b$  strikt positiv ist, kann kein solches  $s$  existieren. Somit ist Ungleichung (C.12) erfüllt und das Vergleichsprinzip kann angewendet werden.

Das Ziel ist es zu der Lösung  $u$  von Gleichung (C.10) eine Sublösung  $u_-$  und eine Superlösung  $u_+$  zu finden. Nach dem Vergleichsprinzips würde dann

$$u_- \leq u \leq u_+$$

gelten.

Als erstes wird eine Sublösung  $u_-$  für das Problem gesucht. Der Kandidat dafür wird als  $u_- := c + \tilde{\varepsilon}$  definiert. Dabei ist  $c$  der Parameter in  $\dot{Q}_{\text{src}}$  aus Gleichung (3.5) und wird in Tabelle A.3 für die verschiedenen in dieser Arbeit betrachteten Fälle angegeben.  $\tilde{\varepsilon} > 0$  wird so gewählt, dass  $u_-$  auf dem Dirichlet-Rand kleiner als die betrachteten Rand- und Anfangswerte ist. Da dies für  $c$  der Fall ist, ist eine solche Wahl möglich. Somit ist  $u_-$  auf dem Dirichlet-Rand kleiner als die Randwerte und auch kleiner als die Anfangswerte. Daraus folgt mit  $\rho c_p > 0$  und  $z(0) \leq 0$  die Ungleichung „ $\geq$ “ in Gleichung (C.9). Da  $\partial_t b(u_-) = 0$  und  $\nabla u_- = 0$  gelten, ist die linke Seite von Gleichung (C.8) gleich 0. Aus der Positivität von  $\dot{Q}_{\text{src}}$  und  $z$  folgt die Ungleichung „ $\leq$ “ in Gleichung (C.8). Somit ist  $u_- := c + \tilde{\varepsilon}$  eine Sublösung der Gleichung (7.1).

Der Kandidat für die Superlösung  $u_+$  wird als  $u_+(t) := \max_{x \in \Omega} \{u_0(x), u^D(x)\} + \tilde{C}t$  mit einer noch zu bestimmenden Konstante  $\tilde{C}$ , dem Anfangswert  $u_0$  und dem Randwert  $u^D$  definiert. Damit gilt direkt in Gleichung (C.9) die Ungleichung „ $\leq$ “. Da  $u_+$  im Raum konstant ist, ist der elliptische Teil von Gleichung (C.8) gleich Null. Weiter gilt im Aktivmaterial (AM), also dort wo  $\dot{Q}_{\text{src}}$  ungleich Null und  $c_p$  nicht konstant ist, mit Hilfe der Monotonie von  $c_p$  und deren der Ableitung nach  $u$  an der Stelle  $u_+$ ,  $c'_p(u_+)$ ,

$$\begin{aligned} \partial_t b(u_+) &= \rho_{\text{AM}}(c_p(u_+) \tilde{C} + c'_p(u_+) \tilde{C} u_+) \\ &= \tilde{C} \rho_{\text{AM}}(c_p(u_+) + c'_p(u_+) u_+) \\ &\geq \tilde{C} \rho_{\text{AM}}(c_p(233.15) + c'_p(233.15) \max_{x \in \text{AM}} \{u_0(x)\}). \end{aligned}$$

Jetzt wird

$$\tilde{C} := \frac{\max_{x \in \mathbb{R}} \{\dot{Q}_{\text{src}}(x)\}}{\rho_{\text{AM}}(c_p(233.15) + c_p'(233.15) \max_{x \in \text{AM}} \{u_0(x)\})}$$

definiert. Damit gilt

$$\partial_t b(u_+) \geq \dot{Q}_{\text{src}}(u_+).$$

Da außerdem  $\nabla u_+ = 0$  gilt, gilt Gleichung (C.8) mit „ $\geq$ “ und  $u_+(t) = \max_{x \in \Omega} \{u_0(x), u^{\text{D}}(x)\} + \tilde{C}t$  ist eine Superlösung.

Mit dieser Sub- und Superlösung gilt nach dem Vergleichsprinzip für die Lösung  $u$  von Gleichung (C.1)

$$u_- \leq u \leq u_+.$$

Aus dieser Sub- und Superlösung kann nun eine untere und obere Schranke für die Lösung von Gleichung (7.1) bestimmt werden. Da die Sublösung konstant ist, gilt

$$\min_{x \in \Omega} |u(x)| > c,$$

wobei  $c$  der in Tabelle A.3 dargestellte Parameter ist. Weiter gilt

$$\max_{x \in \Omega} |u(x)| \leq \max_{x \in \Omega} \{u_0(x), u^{\text{D}}(x)\} + \tilde{C}t_{\text{end}}.$$

# Literatur

- [1] A. Abdulle. „A priori and a posteriori error analysis for numerical homogenization: A unified framework“. In: *Series in Contemporary Applied Mathematics, Multiscale Problems* 16 (2011), S. 280–305. DOI: 10.1142/9789814366892\_0009.
- [2] A. Abdulle. „Analysis of a heterogeneous multiscale FEM for problems in elasticity“. In: *Mathematical Models and Methods in Applied Sciences* 16.4 (2006), S. 615–635. DOI: 10.1142/S0218202506001285.
- [3] A. Abdulle. „Discontinuous Galerkin finite element heterogeneous multiscale method for elliptic problems with multiple scales“. In: *Mathematics of Computation* 81.278 (2012), S. 687–713. DOI: 10.2307/23267969.
- [4] A. Abdulle. „On a priori error analysis of fully discrete heterogeneous multiscale FEM“. In: *Multiscale Modeling and Simulation* 4.2 (2005), S. 447–459. DOI: 10.1137/040607137.
- [5] A. Abdulle. „The finite element heterogeneous multiscale method: A computational strategy for multiscale PDEs“. In: *GAKUTO International Series, Mathematical Sciences and Applications* 31 (2009), S. 133–181.
- [6] A. Abdulle und S. Attinger. „Numerical methods for transport problems in micro-devices“. In: *Large-Scale Scientific Computing*. Hrsg. von I. Lirkov, S. Margenov und J. Waśniewski. Bd. 3743. Springer, 2006. DOI: 10.1007/11666806\_6.
- [7] A. Abdulle und Y. Bai. „Reduced basis finite element heterogeneous multiscale method for high-order discretizations of elliptic homogenization problems“. In: *Journal of Computational Physics* 231 (2012), S. 7014–7036. DOI: 10.1016/j.jcp.2012.02.019.
- [8] A. Abdulle, Y. Bai und G. Vilmart. „An offline-online homogenization strategy to solve quasilinear two-scale problems at the cost of one-scale problems“. In: *Numerical Methods in Engineering* 99.7 (2014), S. 469–486. DOI: 10.1002/nme.4682.
- [9] A. Abdulle und W. E. „Finite difference heterogeneous multi-scale method for homogenization problems“. In: *Journal of Computational Physics* 191.1 (2003), S. 18–39. DOI: 10.1016/S0021-9991(03)00303-6.
- [10] A. Abdulle und B. Engquist. „Finite element heterogeneous multiscale methods with near optimal computational complexity“. In: *Multiscale Modeling and Simulation* 6.4 (2007), S. 1059–1084. DOI: 10.1137/060676118.

- [11] A. Abdulle, M. J. Grote und C. Stohrer. „Finite element heterogeneous multiscale method for the wave equation: long-time effects“. In: *Multiscale Modeling and Simulation* 12.3 (2014), S. 1230–1257. DOI: 10.1137/13094195X.
- [12] A. Abdulle und M. E. Huber. „Discontinuous Galerkin finite element heterogeneous multiscale method for advection–diffusion problems with multiple scales“. In: *Numerische Mathematik* 126.4 (2014), S. 589–633. DOI: 10.1007/s00211-013-0578-9.
- [13] A. Abdulle und M.E. Huber. „Finite element heterogeneous multiscale method for nonlinear monotone parabolic homogenization problems“. In: *ESAIM: Mathematical Modelling and Numerical Analysis (ESAIM: M2AN)* 50.6 (2016), S. 1659–1697. DOI: 10.1051/m2an/2016003.
- [14] A. Abdulle, M.E. Huber und G. Vilmart. „Linearized numerical homogenization method for nonlinear monotone parabolic multiscale problems“. In: *Multiscale Modeling and Simulation* 13 (2015), S. 916–952. DOI: 10.1137/140975504.
- [15] A. Abdulle und A. Nonnenmacher. „A short and versatile finite element multiscale code for homogenization problems“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 198.37 (2009), S. 2839–2859. DOI: 10.1016/j.cma.2009.03.019.
- [16] A. Abdulle und A. Nonnenmacher. „Adaptive finite element heterogeneous multiscale method for homogenization problems“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 200.37 (2011), S. 2710–2726. DOI: 10.1016/j.cma.2010.06.012.
- [17] A. Abdulle und C. Schwab. „Heterogeneous multiscale FEM for diffusion problems on rough surfaces“. In: *Multiscale Modeling and Simulation* 3.1 (2005), S. 195–220. DOI: 10.1137/030600771.
- [18] A. Abdulle und G. Vilmart. „A priori error estimates for finite element methods with numerical quadrature for nonmonotone nonlinear elliptic problems“. In: *Numerische Mathematik* 121.3 (2012), S. 397–431. DOI: 10.1007/s00211-011-0438-4.
- [19] A. Abdulle und G. Vilmart. „Analysis of the finite element heterogeneous multiscale method for quasilinear elliptic homogenization problems“. In: *Mathematics of Computation* 83.286 (2014), S. 513–536. DOI: 10.1090/S0025-5718-2013-02758-5.
- [20] A. Abdulle und G. Vilmart. „Coupling heterogeneous multiscale FEM with Runge–Kutta eethods for parabolic homogenization problems: A fully discrete space-time analysis“. In: *Mathematical Models and Methods in Applied Sciences* 22.6 (2012), S. 1250002–1–1250002–40. DOI: 10.1142/S0218202512500029.
- [21] A. Abdulle und G. Vilmart. „The effect of numerical integration in the finite element method for nonmonotone nonlinear elliptic problems with application to numerical homogenization methods“. In: *Comptes Rendus Mathematique* 349.19 (2011). preprint, S. 1041–1046. DOI: 10.1016/j.crma.2011.09.005.

- [22] G. Abts. *Kunststoff-Wissen für Einsteiger: Grundlagen, Eigenschaften und Recycling polymerer Werkstoffe*. 4. München: Carl Hanser Verlag, 2020. ISBN: 978-3-446-46291-5. DOI: 10.3139/9783446465251.
- [23] R. A. Adams und J. J. F. Fournier. *Sobolev Spaces*. Hrsg. von P. A. Smith und S. Eilenberg. Academic Press, 2003. ISBN: 9780120441433.
- [24] M. Alipour u. a. „A review on temperature-dependent electrochemical properties, aging, and performance of lithium-ion cells“. In: *Batteries* 6.3 (2020). DOI: 10.3390/batteries6030035.
- [25] G. Allaire und R. Brizzi. „A multiscale finite element method for numerical homogenization“. In: *Multiscale Modeling and Simulation* 4.3 (2005), S. 790–812. DOI: 10.1137/040611239.
- [26] G. Allaire und A. Piatnitski. „Homogenization of nonlinear reaction-diffusion equation with a large reaction term“. In: *Annali Dell’Universita’ di Ferrara* 56.1 (2010), S. 141–161. DOI: 10.1007/s11565-010-0095-z.
- [27] S. Allu u. a. „A new open computational framework for highly-resolved coupled three-dimensional multiphysics simulations of Li-ion cells“. In: *Journal of Power Sources* 246 (2014), S. 876–886. DOI: 10.1016/j.jpowsour.2013.08.040.
- [28] W. Alt und S. Luckhaus. „Quasilinear elliptic-parabolic differential equations“. In: *Mathematische Zeitschrift* 183.3 (1983), S. 311–341. DOI: 10.1007/BF01176474.
- [29] G. Alzetta u. a. „The deal.II library, version 9.0.“ In: *Journal of Numerical Mathematics* 26.4 (2018), S. 173–183. DOI: 10.1515/jnma-2018-0054.
- [30] H. Amann. *Gewöhnliche Differentialgleichungen*. De Gruyter, 2011. ISBN: 9783110889680. DOI: 10.1515/9783110889680.
- [31] A. Awarke, S. Pischinger und J. Ogrzewallab. „Pseudo 3D modeling and analysis of the SEI growth distribution in large format Li-ion polymer pouch cells“. In: *Journal of The Electrochemical Society* 160.1 (2013), A172–A181. DOI: 10.1149/2.022302jes.
- [32] A. Awarke u. a. „Quantifying the effects of strains on the conductivity and porosity of LiFePO<sub>4</sub> based Li-ion composite cathodes using a multi-scale approach“. In: *Computational Materials Science* 50.3 (2011), S. 871–879. DOI: 10.1016/j.commatsci.2010.10.024.
- [33] M. Badiale und E. Serra. *Semilinear Elliptic Equations for Beginners*. Hrsg. von S. Axler u. a. Springer, 2011. ISBN: 978-0857292261.
- [34] T. M. Bandhauer, S. Garimella und T. F. Fuller. „A critical review of thermal issues in Lithium-ion batteries“. In: *Journal of the Electrochemical Society* 158.3 (2011), R1–R25. DOI: 10.1149/1.3515880.
- [35] W. Bangerth, R. Hartmann und G. Kanschat. „deal.II — a general-purpose object-oriented finite element library“. In: *ACM Transactions on Mathematical Software* 33.4 (2007). DOI: 10.1145/1268776.1268779.

- [36] P. Bastian u. a. „Towards a Unified Framework for Scientific Computing“. In: *Proceedings of the 15th Conference on Domain Decomposition Methods*. Hrsg. von R. Kornhuber u. a. LNCSE 40. 2004, S. 167–174.
- [37] D. Bernardi, E. Pawlikowski und J. Newman. „A general energy balance for battery systems“. In: *Journal of The Electrochemical Society* 132.1 (1985). DOI: 10.1149/1.2113792.
- [38] J.O. Besenhard und G. Eichinger. „High energy density lithium cells: Part I. Electrolytes and anodes“. In: *Journal of Electroanalytical Chemistry and Interfacial Electrochemistry* 68.1 (1976), S. 1–18. DOI: 10.1016/S0022-0728(76)80298-7.
- [39] J.O. Besenhard und G. Eichinger. „High energy density lithium cells: Part II. Cathodes and complete cells“. In: *Journal of Electroanalytical Chemistry and Interfacial Electrochemistry* 72.1 (1976), S. 1–31. DOI: 10.1016/S0022-0728(76)80072-1.
- [40] W. G. Bessler, S. Gewies und M. Vogler. „A new framework for physically based modeling of solid oxide fuel cells“. In: *Electrochimica Acta* 53.4 (2007), S. 1782–1800. DOI: 10.1016/j.electacta.2007.08.030.
- [41] P. Bohn u. a. „Temperature propagation in prismatic lithium-ion-cells after short term thermal stress“. In: *Journal of Power Sources* 313 (2016), S. 30–36. DOI: 10.1016/j.jpowsour.2016.02.055.
- [42] G. G. Botte, V. R. Subramanian und R. E. White. „Mathematical modeling of secondary lithium batteries“. In: *Electrochimica Acta* 45.15–16 (2000), S. 2595–2609. DOI: 10.1016/S0013-4686(00)00340-6.
- [43] D. Braess. *Finite Elemente*. Springer, 2013. ISBN: 978-3-642-34796-2. DOI: 10.1007/978-3-642-34797-9.
- [44] S. Brahim-Otsmane, G. A. Francfort und F. Murat. „Correctors for the Homogenization of the Wave and Heat Equations“. In: *Journal de Mathématiques Pures et Appliquées* 71 (1992), S. 197–231.
- [45] S.C. Brenner und L.R. Scott. *The Mathematical Theory of Finite Element Methods*. Hrsg. von J.E. Marsden, L. Sirovich und S. S. Antman. Springer, 2008. ISBN: 978-0387759333.
- [46] *BwUniCluster 2.0*. URL: [https://wiki.bwhpc.de/e/Category:BwUniCluster\\_2.0](https://wiki.bwhpc.de/e/Category:BwUniCluster_2.0).
- [47] L. Cai und R. E. White. „An Efficient Electrochemical–Thermal Model for a Lithium-ion Cell by Using the Proper Orthogonal Decomposition Method“. In: *Journal of The Electrochemical Society* 157.11 (2010), A1188–A1195. DOI: 10.1149/1.3486082.
- [48] L. Cai und R. E. White. „Reduction of Model Order Based on Proper Orthogonal Decomposition for Lithium-ion Battery Simulations“. In: *Journal of The Electrochemical Society* 156.3 (2009), A154–A161. DOI: 10.1149/1.3049347.
- [49] F. Castelli. „Numerical Investigation of Cahn–Hilliard-type Phase-Field Models for Battery Active Particles“. Diss. KIT, 2021.

- [50] A. Chatterjee. „An introduction to the proper orthogonal decomposition“. In: *Current Science* 78.7 (2000), S. 808–817. URL: <https://www.jstor.org/stable/24103957>.
- [51] S.C. Chen, C.C. Wan und Y.Y. Wang. „Thermal analysis of lithium-ion batteries“. In: *Journal of Power Sources* 140.1 (2005), S. 111–124. DOI: 10.1016/j.jpowsour.2004.05.064.
- [52] M. Chipot. *Elliptic Equations: An Introductory Course*. Hrsg. von H. Amann u. a. Birkhäuser, 2009. ISBN: 978-3-7643-9981-8.
- [53] J. Christensen, D. Cook und P. Albertus. „An Efficient Parallelizable 3D Thermochemical Model of a Li-ion Cell“. In: *Journal of The Electrochemical Society* 160.11 (2013), A2258–A2267. DOI: 10.1149/2.086311jes.
- [54] P. G. Ciarlet. „Basic error estimates for elliptic problems“. In: *Finite Element Methods (Part 1)*. Elsevier, 1991. DOI: 10.1016/S1570-8659(05)80039-0.
- [55] P.G. Ciarlet. *The Finite Element Method for Elliptic Problems*. Hrsg. von J.L. Lions, G. Papanicolaou und R.T. Rockafellar. 1. Aufl. Bd. 4. North-Holland, 1978. ISBN: 0 444 85028 7.
- [56] D. Cioranescu und P. Donato. *An Introduction to Homogenization*. Hrsg. von J. Ball und D. Welsh. Oxford University Press, 1999. ISBN: 0198565542.
- [57] F. Ciucci und W. Lai. „Derivation of Micro/Macro Lithium Battery Models from Homogenization“. In: *Transport in Porous Media* 88 (2011), S. 249–270. DOI: 10.1007/s11242-011-9738-5.
- [58] X. Cui u. a. „Simplification strategy research on hard-cased Li-ion battery for thermal modeling“. In: *International Journal of Energy Research* 44 (2020), S. 3640–3656. DOI: 10.1002/er.5140.
- [59] T-S. Dao, C. P. Vyasarayani und J. McPhee. „Simplification and order reduction of lithium-ion battery model based on porous-electrode theory“. In: *Journal of Power Sources* 198 (2012), S. 329–337. DOI: 10.1016/j.jpowsour.2011.09.034.
- [60] S. Dargavillez und T. W. Farrell. „Predicting Active Material Utilization in LiFePO<sub>4</sub> Electrodes Using a Multiscale Mathematical Model“. In: *Journal of The Electrochemical Society* 157.7 (2010), A830–A840. DOI: 10.1149/1.3425620.
- [61] *deal.II-Dokumentation*. URL: <https://www.dealii.org/current/index.html>.
- [62] D. A. Di Pietro und A. Ern. *Mathematical Aspects of Discontinuous Galerkin Methods*. Hrsg. von G. Allaire und J. Garnier. Springer, 2011. ISBN: 978-3-642-22979-4. DOI: 10.1007/978-3-642-22980-0.
- [63] M.A. Diop u. a. „Singular Homogenization with Stationary in Time and Periodic in Space Coefficients“. In: *Journal of Functional Analysis* 231.1 (2006), S. 1–46. DOI: 10.1016/j.jfa.2005.02.007.

- [64] W. Dörfler. „A Convergent Adaptive Algorithm for Poisson’s Equation“. In: *SIAM Journal on Numerical Analysis* 33.3 (1996), S. 1106–1124. URL: <https://www.jstor.org/stable/2158497>.
- [65] M. Dorobantu und B. Engquist. „Wavelet-based Numerical Homogenization“. In: *SIAM Journal on Numerical Analysis* 35.2 (1998), S. 540–559. URL: <https://www.jstor.org/stable/2587142>.
- [66] H. Douanla und J. L. Woukeng. „Homogenization of Reaction-diffusion Equations in Fractured Porous Media“. In: *Electronic Journal of Differential Equations* 2015.253 (2015), S. 1–23. URL: <https://arxiv.org/abs/1506.08302>.
- [67] J. Douglas und T. Dupont. „Galerkin Methods for Parabolic Equations“. In: *SIAM Journal on Numerical Analysis* 7.4 (1970), S. 575–626. DOI: 10.1137/0707048.
- [68] R. Du und P. Ming. „Convergence of the Heterogeneous Multiscale Finite Element Method for Elliptic Problems with Nonsmooth Microstructures“. In: *Multiscale Modeling and Simulation* 8.5 (2010), S. 1770–1783. DOI: 10.1137/090780754.
- [69] W. E. *Principles of Multiscale Modeling*. Cambridge, 2011. ISBN: 978-0521825443.
- [70] W. E und B. Engquist. „The heterogeneous Multiscale Methods“. In: *Communications in Mathematical Sciences* 1.1 (2003), S. 87–132.
- [71] W. E u. a. „Heterogeneous Multiscale Methods: A Review“. In: *Communications in Computational Physics* 2.3 (2007), S. 367–450.
- [72] Y. Efendiev und T. Y. Hou. *Multiscale Finite Element Methods*. Hrsg. von S.S. Antman, J.E. Marsden und L. Sirovich. Springer, 2009. ISBN: 978-0-387-09495-3. DOI: 10.1007/978-0-387-09496-0.
- [73] B. Eidel und A. Fischer. „The heterogeneous multiscale finite element method for the homogenization of linear elastic solids and a comparison with the FE2 method“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 329 (2017), S. 332–368. DOI: 10.1016/j.cma.2017.10.001.
- [74] B. Engquist und O. Runborg. „Wavelet-Based Numerical Homogenization with Applications“. In: *Lecture Notes in Computational Science and Engineering*. Springer, 2002, S. 97–148.
- [75] L. Flodén u. a. „A Note on Parabolic Homogenization with a Mismatch between the Spatial Scales“. In: *Hindawi Publishing Corporation Abstract and Applied Analysis* 6 (2013). DOI: 10.1155/2013/329704.
- [76] A. A. Franco. „Multiscale modelling and numerical simulation of rechargeable lithium ion batteries: concepts, methods and challenges“. In: *RSC Advances* 3.32 (2013), S. 13027–12058. DOI: 10.1039/c3ra23502e.
- [77] N. Fusco und G. Moscarillo. „On the Homogenization of Quasilinear Divergence Structure Operators“. In: *Annali di Matematica Pura ed Applicata* 146 (1986), S. 1–13. DOI: 10.1007/BF01762357.



- [78] D. Gallistl und C. Stohrer. *Numerical Multiscale Methods*. Techn. Ber. KIT, Institute for Applied und Numerical Mathematics, 2017.
- [79] M. Gontscharow. *Discontinuous Galerkin Finite Elemente Heterogene Mehrskalen Methode für thermische Simulationen in Lithium-ionen-Batterien*. Masterarbeit. 2021.
- [80] S. Goutam u. a. „Three-dimensional electro-thermal model of li-ion pouch cell: Analysis and comparison of cell design factors and model assumptions“. In: *Applied Thermal Engineering* 126.5 (2017), S. 796–808. DOI: 10.1016/j.applthermaleng.2017.07.206..
- [81] C. Greenshields. *OpenFOAM v6 User Guide*. The OpenFOAM Foundation. 2018. URL: <https://cfd.direct/openfoam/user-guide>.
- [82] K. S. Hariharan. *Mathematical Modeling of Lithium Batteries : From Electrochemical Models to State Estimator Algorithms*. Hrsg. von P. Tagade und S. Ramachandran. Green Energy and Technology Springer eBook Collection Springer Link. Springer, 2018. ISBN: 9783319035277.
- [83] C. Hellwig, S. Sörgela und W. G. Bessler. „A Multi-Scale Electrochemical and Thermal Model of a LiFePO<sub>4</sub> Battery“. In: *ECS Transactions* (2011), S. 215–228. DOI: 10.1149/1.3655705.
- [84] M. G. Henessy und I. R. Moyles. „Asymptotic reduction and homogenization of a thermo-electrochemical model for a lithium-ion battery“. In: *Applied Mathematical Modelling* 80 (2020), S. 724–754.
- [85] P. Henning und M. Ohlberger. „A-posteriori error estimate for a heterogeneous multiscale approximation of advection-diffusion problems with large expected drift“. In: *Discrete and Continuous Dynamical Systems S* 9.5 (Okt. 2016), S. 1393–1420. DOI: 10.3934/dcdss.2016056.
- [86] P. Henning und M. Ohlberger. „The heterogeneous multiscale finite element method for advection-diffusion problems with rapidly oscillating coefficients and large expected drift“. In: *Networks and Heterogeneous Media* 5.4 (Dez. 2010), S. 711–744. DOI: 10.3934/nhm.2010.5.711.
- [87] P. Henning und M. Ohlberger. „The heterogeneous multiscale finite element method for elliptic homogenization problems in perforated domains“. In: *Numerische Mathematik* 113.4 (2009), S. 601–629. DOI: 10.1007/s00211-009-0244-4.
- [88] I. Hlavacek, M. Krizek und J. Maly. „On Galerkin Approximations of a Quasilinear Nonpotential Elliptic Problem of a Nonmonotone Type“. In: *Journal of Mathematical Analysis and Applications* 184 (1994), S. 168–189. DOI: 10.1006/jmaa.1994.1192.
- [89] <http://www.comsol.com/>. Techn. Ber. 2013. URL: <http://www.comsol.com/>.
- [90] <http://www.mathworks.com/products/matlab/>. Techn. Ber. 2010. URL: <http://www.mathworks.com/products/matlab/>.
- [91] <https://www.3ds.com/products-services/simulia/products/abaqus/>. Techn. Ber. 2010. URL: <https://www.3ds.com/products-services/simulia/products/abaqus/>.

- [92] M. J. Hunt u. a. „Derivation of an effective thermal electrochemical model for porous electrode batteries using asymptotic homogenisation“. In: *Journal of Engineering Mathematics* 122 (2020), S. 31–57. DOI: 10.1007/s10665-020-10045-8.
- [93] Verein Deutscher Ingenieure. *VDI-Wärmeatlas*. Springer, 2013. ISBN: 978-3-642-19980-6. DOI: 10.1007/978-3-642-19981-3.
- [94] H. Jian. „On the Homogenization of Degenerate Parabolic Equations“. In: *Acta Mathematicae Applicatae Sinica* 16 (2000), S. 100–110. DOI: 10.1007/BF02670970.
- [95] V.V. Jikov, S.M. Kozlov und O.A. Oleinik. *Homogenization of Differential Operators and Integral Functionals*. Springer, 1994. DOI: 10.1007/978-3-642-84659-5.
- [96] A. B. Kharazishvili. *Strange Functions in Real Analysis*. Hrsg. von E. J. Taft und Z. Nashed. Chapman und Hall/CRC, 2006. ISBN: 9780367391461.
- [97] G-H. Kim u. a. „Multi-Domain Modeling of Lithium-ion Batteries Encompassing Multi-Physics in Varied Length Scales“. In: *Journal of The Electrochemical Society* 158.8 (2011), S. 955–969. DOI: 10.1149/1.3597614.
- [98] G.-H. Kim, A. Pesaran und R. Spotnitz. „A three-dimensional thermal abuse model for lithium-ion cells“. In: *Journal of Power Sources* 170.2 (2007), S. 476–489. DOI: 10.1016/j.jpowsour.2007.04.018.
- [99] D. D. Kosambi. „Statistics in function space“. In: *Journal of the Indian Mathematical Society* 7 (1943), S. 76–88. ISSN: 0019-5839.
- [100] A. Latz und J. Zausch. „Multiscale modeling of lithium ion batteries: thermal aspects“. In: *Beilstein Journal of Nanotechnology* 6 (2015), S. 987–1007. DOI: 10.3762/bjnano.6.102.
- [101] A. Latz, J. Zausch und O. Iliev. „Modeling of Species and Charge Transport in Li-Ion Batteries Based on Non-equilibrium Thermodynamics“. In: *Numerical Methods and Applications*. 2011, S. 329–337. DOI: 10.1007/978-3-642-18466-6\_39.
- [102] G. Leoni. *A First Course in Sobolev Spaces*. Hrsg. von D. Cox u. a. American Mathematical Society, 2009. ISBN: 978-0-8218-4768-8.
- [103] G. Liebig u. a. „The Impact of Environmental Factors on the Thermal Characteristic of a Lithium-ion Battery“. In: *Batteries* 6.1 (2020). DOI: 10.3390/batteries6010003.
- [104] *Handbuch Lithium-ionen-Batterien*. Hrsg. von E. Korthauer. Springer, 2013. DOI: 10.1007/978-3-642-30653-2.
- [105] A. Loges u. a. „Thermal characterization of Li-ion cell electrodes by photothermal deflection spectroscopy“. In: *Journal of Power Sources* 325 (2016), S. 104–115. DOI: 10.1016/j.jpowsour.2016.05.082..
- [106] M. Maier. „The Mathematical Analysis of a Micro Scale Model for Lithium-ion Batteries“. Diss. Karlsruher Institut für Technologie (KIT), 2016.

- [107] E. Marusic-Paloka und A. L. Piatnitski. „Homogenization of a Nonlinear Convection-diffusion Equation with Rapidly Oscillating Coefficients and Strong Convection“. In: *Journal of the London Mathematical Society* 72 (2005). DOI: 10.1112/S0024610705006824.
- [108] A. Matine u. a. „Transient Heat Conduction within Periodic Heterogeneous Media: A Space-time Homogenization Approach“. In: *International Journal of Thermal Sciences* 92 (2015), S. 217–229. DOI: 10.1016/j.ijthermalsci.2015.01.026.
- [109] P. Ming und P. Zhang. „Analysis of the Heterogeneous Multiscale Method for Parabolic Homogenization Problems“. In: *Mathematics of Computation* 76.257 (2007), S. 153–177. DOI: 10.1090/S0025-5718-06-01909-0.
- [110] K. Mizushima u. a. „Li<sub>x</sub>CoO<sub>2</sub> (0 < x ≤ 1): A new cathode material for batteries of high energy density“. In: *Solid State Ionics* 3–4 (1981), S. 171–174. DOI: 10.1016/0167-2738(81)90077-1.
- [111] A. K. Nandakumaran und M. Rajesh. „Homogenization of a Nonlinear Degenerate Parabolic Differential Equation“. In: *Electronic Journal of Differential Equations* 4 (2001), S. 393–432.
- [112] A. K. Nandakumaran und M. Rajesh. „Homogenization of a Parabolic Equation in Perforated Domain with Dirichlet Boundary Condition“. In: *Proc. Indian Acad. Sci.* 112 (2002), S. 425–439. DOI: 10.1007/BF02829795.
- [113] R. S. Nejad und C. Wieners. „Parallel Inelastic Heterogeneous Multi-Scale Simulations“. In: Hrsg. von S. Diebels und S. Rjasanow. Springer, 2019. Kap. 4, S. 57–96. ISBN: 978-3-662-57957-2.
- [114] J. Newman und W. Tiedemann. „Porous-Electrode Theory with Battery Applications“. In: *AIChE Journal* 21.1 (1975), S. 25–41. DOI: 10.1002/aic.690210103.
- [115] J. Nolen, G. Papanicolao und O. Pironneau. „A Framework for Adaptive Multiscale Methods for Elliptic Problems“. In: *Multiscale Modeling and Simulation* 7 (2008), S. 171–196. DOI: 10.1137/070693230.
- [116] M. Ohlberger. „A Posteriori Error Estimates for the Heterogeneous Multiscale Finite Element Method for Elliptic Homogenization Problems“. In: *Multiscale Modeling and Simulation* 4.1 (2005), S. 88–114. DOI: 10.1137/040605229.
- [117] M. Ohlberger und S. Rave. „Localized Reduced Basis Approximation of a Nonlinear Finite Volume Battery Model with Resolved Electrode Geometry“. In: Springer, 2017. Kap. 13.
- [118] S. Paarman und O. Queisser. *Mündliche Mitteilung*.
- [119] S. Paarmann. „How Non-Uniform Temperatures Influence the Performance and Ageing of Lithium-Ion Batteries“. Diss. KIT, 2021.
- [120] G. Papanicolau, A. Bensoussan und J.-L. Lions, Hrsg. *Asymptotic Analysis for Periodic Structures*. 1. Aufl. Bd. 5. North Holland, 1978. ISBN: 978-0-444-85172-7.

- [121] W. H. Press u. a. *Numerical Recipes*. Cambridge University Press, 2007. ISBN: 978-0-521-88068-8.
- [122] A. Quarteroni, A. Manzoni und F. Negri. *Reduced Basis Methods for Partial Differential Equations*. Hrsg. von L. Ambrosio u. a. Springer, 2016. ISBN: 978-3-319-15430-5. DOI: 10.1007/978-3-319-15431-2.
- [123] O. Queisser und D. Oehler. *Mündliche Mitteilung*.
- [124] O. Queisser u. a. „Impact of the level of homogenization in 3D thermal simulation on the internal temperature distribution of Li-ion battery cells“. In: *Energy Technology* 9.6 (2020). DOI: 10.1002/ente.202000915.
- [125] P. J. Roache. „Code Verification by the Method of Manufactured Solutions“. In: *Journal of Fluids Engineering* 124.1 (2002), S. 4–10. DOI: 10.1115/1.1436090.
- [126] E. Rothe. „Zweidimensionale parabolische Randwertaufgaben als Grenzfall eindimensionaler Randwertaufgaben“. In: *Mathematische Annalen* 102.1 (1930), S. 650–670. DOI: 10.1007/BF01782368.
- [127] G. Rozza, D.B.P. Huynh und A.T. Patera. „Reduced basis approximation and a posteriori error estimation for affinely parametrized elliptic coercive partial differential equations“. In: *Archives of Computational Methods in Engineering* 15 (2007). DOI: 10.1007/s11831-008-9019-9.
- [128] G. Rozza u. a. „An Introduction to Reduced Basis Method for Parametrized PDEs“. In: *Applied and Industrial Mathematics in Italy III* (2009).
- [129] Y. Saad. *Iterative Methods for Sparse Linear Systems*. Second. SIAM, 2003. ISBN: 978-0-898715-34-7.
- [130] M. Schatzmann. *Numerical Analysis*. Clarendon Press, 2002. ISBN: 0198508522.
- [131] W. E. Schiesser. *The Numerical Method of Lines: Integration of Partial Differential Equations*. Academic Press, 1991. ISBN: 9780126241303.
- [132] J. Schröder. „A numerical two-scale homogenization scheme: the FE2-method“. In: *Plasticity and Beyond: Microstructures, Crystal-Plasticity and Phase Transitions*. 2014. ISBN: 978-3-7091-1624-1. DOI: 10.1007/978-3-7091-1625-8.
- [133] N. Svanstedt und J. L. Woukeng. „Periodic Homogenization of Strongly Nonlinear Reaction–diffusion Equations with Large Reaction Terms“. In: *Applicable Analysis* 92 (2013), S. 1357–1378. DOI: 10.1080/00036811.2012.678334.
- [134] J.-M. Tarascon und M. Armand. „Issues and challenges facing rechargeable lithium batteries“. In: *Nature* 414.6861 (2011), S. 359–367. DOI: 10.1038/35104644.
- [135] *Thermoelemente – Teil 1: Thermospannungen und Grenzabweichungen*.
- [136] Z. Veszelka u. a. „Impact of Numerical Methods in Thermal Modeling of Li-ion Batteries on Temperature Distribution and Computation Time“. In: *Energy Technology* (2020). DOI: 10.1002/ente.202000906.

- 
- [137] S. Volkwein und A. Wesche. „The reduced basis method applied to transport equations of a lithium-ion battery“. In: *COMPEL: The International Journal for Computation and Mathematics in Electrical and Electronic Engineering* 32.5 (2013), S. 1760–1772. DOI: 10.1108/COMPEL-04-2013-0115.
- [138] D. Werner. *Funktionalanalysis*. Hrsg. von I. Ruhmann. Springer, 2018. ISBN: 978-3-662-55406-7. DOI: 10.1007/978-3-662-55407-4.
- [139] D. Werner u. a. „Inhomogeneous Temperature Distribution Affecting the Cyclic Aging of Li-ion Cells. Part I: Experimental Investigation“. In: *Batteries* 6.13 (2020). DOI: 10.3390/batteries6010013.
- [140] D. Werner u. a. „Inhomogeneous Temperature Distribution Affecting the Cyclic Aging of Li-ion Cells. Part II: Analysis and Correlation“. In: *Batteries* 6.1 (2020). DOI: 10.3390/batteries6010012.
- [141] S. Whitaker. *The Method of Volume Averaging*. Springer, 1999. ISBN: 978-90-481-5142-4. DOI: 10.1007/978-94-017-3389-2.
- [142] C. Wieners. „A geometric data structure for parallel finite elements and the application to multigrid methods with block smoothing“. In: *Computing and Visualization in Science* 13 (2010), S. 161–175. DOI: 10.1007/s00791-010-0135-3.