Integration externer PDE-Löser in Mathcad



Cathleen Seidel
Dipl.-Wirtschaftsmath.

inuTech GmbH Nürnberg

Überblick

1. Erweiterung bestehender Software – Warum?
2. inuTech GmbH & Diffpack
3. Wärmeleitungsgleichung mit Diffpack
4. Erstellen einer User-DLL für Mathcad
5. Wärmeleitungsgleichung für Mathcad
6. Erweiterungsmöglichkeiten

1. Erweiterung bestehender Software – Warum?

- Jede Software setzt eigenen Fokus
  - CAD-Systeme für Modellierung
  - Computeralgebra - Systeme
  - FEM-Codes für spezielle Aufgaben, z.B. ANSYS für Multiphysics
- Oft: Verwendung verschiedener Software-Lösungen
- Keine Software, die alle Aufgaben abdeckt

Lösung: Schnittstellen zwischen verschiedenen Programmen/Software nutzen!

2. inuTech GmbH & Diffpack

inuTech GmbH – Geschichte

- FSV Consulting R&D, gegründet 1995
- inuTech GmbH seit Juni 2000
  - Gesellschafter: Prof. Schittkowski, CADFEM International AG, F. Vogel
  - 20 Angestellte

inuTech GmbH - Ziele



- F&E Numerische Methoden
- Softwareentwicklung
- Verkauf und Support von Software

- Beratung

Lösen von Ingenieurproblemen und mathematischen Problemen

Schließen der Lücke zwischen Ingenieurwissenschaften und Mathematik

- Seminare und Training

Diffpack® - eine Entwicklungsbibliothek

DGLs

$$-\nabla\cdot[K(S)\nabla P]=q,$$
$$S_t+\nabla\cdot[\mathbf{v}f(S)]=\nabla\cdot(h(S)\nabla S),$$
$$\mathbf{v}=-K(S)\nabla P$$
$$K(S)=\lambda_o(S)+\lambda_w(S),$$
$$f(S)=\lambda_w(S)/K(S),$$
$$h(S)=-\lambda_o(S)f(S)P_c(S),$$
$$\lambda_w=k_w(\ldots),$$
$$\lambda_o=k_o(\ldots).$$



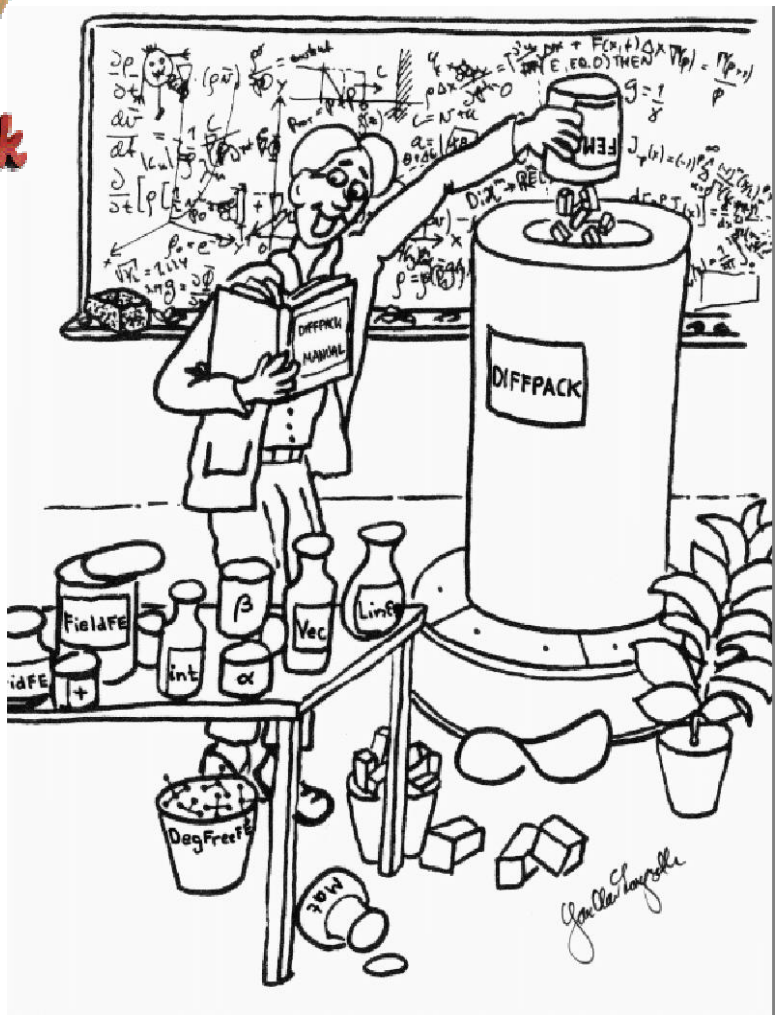
||

Objektorientiertes (C++) Werkzeug für die numerische Modellierung und Lösung von Differentialgleichungen

Zusammenfassung

- Entwicklungsbibliothek zur Simulation und Lösung von Problemen
- Numerische Bibliotheken zur Lösung von DGLs (> 600 C++ Klassen)
  - vereinfacht signifikant den Aufwand zur Implementierung von Lösern
  - ersetzt Standard-FEM-Programme

Mehr: www.diffpack.com



3. Wärmeleitungsgleichung mit Diffpack

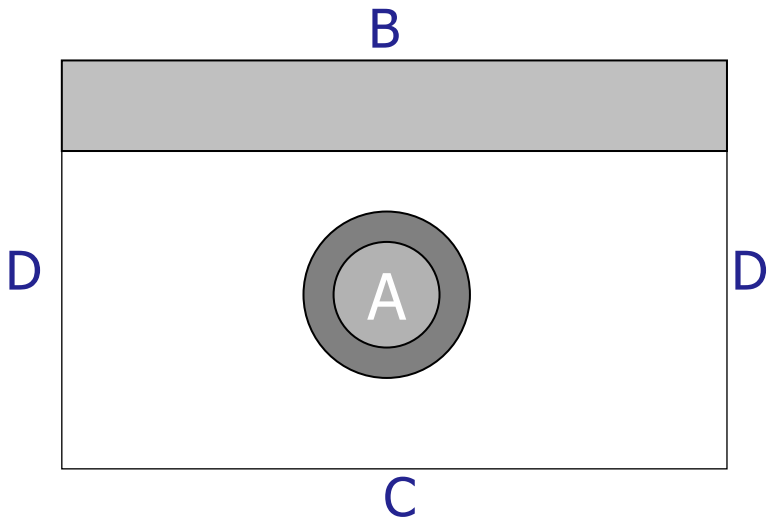
Stationäre Wärmeleitungsgleichung

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(\kappa\frac{\partial T}{\partial x}\right)+\frac{\partial}{\partial y}\left(\kappa\frac{\partial T}{\partial y}\right)=0$$

$\kappa(x,y)$	Wärmeleitungskoeffizient
T	Temperatur

Randbedingungen

$T=T_A$	auf Rand A
$-\kappa\frac{\partial T}{\partial n}=h_B(T-T_B)$	auf Rand B
$-\kappa\frac{\partial T}{\partial n}=h_C(T-T_C)$	auf Rand C
$\frac{\partial T}{\partial n}=0$	auf Rand D



Schwache Formulierung der Differentialgleichung

Galerkin

$$\hat{T}(x,y) = \sum_{j=1}^{m} T_j N_j$$

Approx. der exakten Lösung

N_j: Ansatzfunktionen

$$R(\hat{T},x,y) = \nabla \kappa \nabla \hat{T}$$

Residuum

$$\int_{\Omega} R(\hat{T},x,y) N_i d\Omega = 0, i = 1,..,m$$

Schwache Formulierung

Schwache Formulierung der Differentialgleichung

$$\int_{\Omega} \nabla \kappa \nabla \hat{T} \cdot N_i d\Omega = 0, i = 1,..m$$

Partielle Integration, Randbedingungen

$$\int_{\Omega} \kappa \nabla N_i \cdot \nabla \hat{T} d\Omega = -\int_{B} N_i h_B (T - T_B) d\Gamma - \int_{C} N_i h_c (T - T_C) d\Gamma$$

$$\sum_{j=1}^{m} \left(\int_{\Omega} \kappa \nabla N_i \cdot \nabla N_j d\Omega \right) T_j = -\int_{B} N_i h_B (T - T_B) d\Gamma - \int_{C} N_i h_c (T - T_C) d\Gamma$$

$\Rightarrow$ Gleichungssystem A*T=b für Referenzelement

4. Erstellen einer User-DLL für Mathcad

- Warum ist Mathcad so beliebt?
  - Verwendung als aktives Notizbuch für Berechnungen
  - Mathematische Notation für Formeln mit numerischer Auswertung
  - Großer Funktionsumfang

- Warum ist eine Erweiterung notwendig?
  - Gleiche Funktionsauswertungen
  - Gleiche Aufgaben aber Anpassung einiger Parameter
  - Performanceverbesserung

- Beispiel: Lösung der Wärmeleitungsgleichung auf Gebieten mit der gleichen Geometrie, wie z.B. Kreisgeometrien (Linse oder Zylinder)

Erstellen und Einbinden einer User-DLL in Mathcad

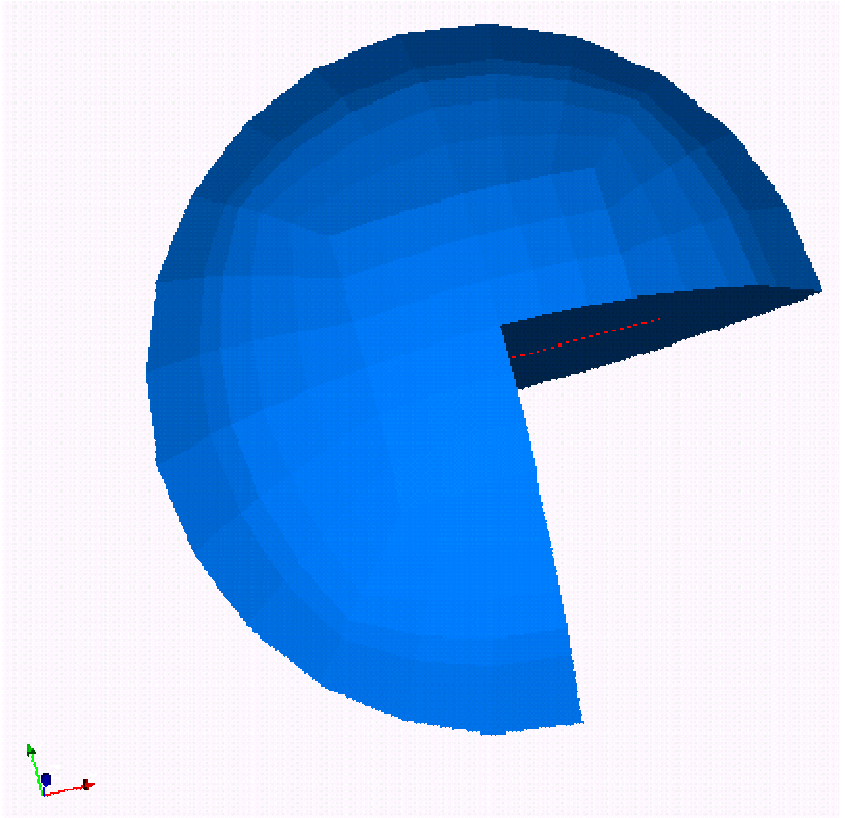
- Programmierung der gewünschten Funktion, z.B. Wärmeleitungsgleichungslöser mit Diffpack
- Verwendung der Templates in …Programme\Mathcad\Mathcad14\userefi\microsoft
- Erstellung einer .dll
- Kopieren der .dll in das Verzeichnis …Programme\Mathcad\Mathcad 14\userefi
- Neustart von Mathcad

5. Wärmeleitungsgleichung für Mathcad

Parametrisierung der Geometrie

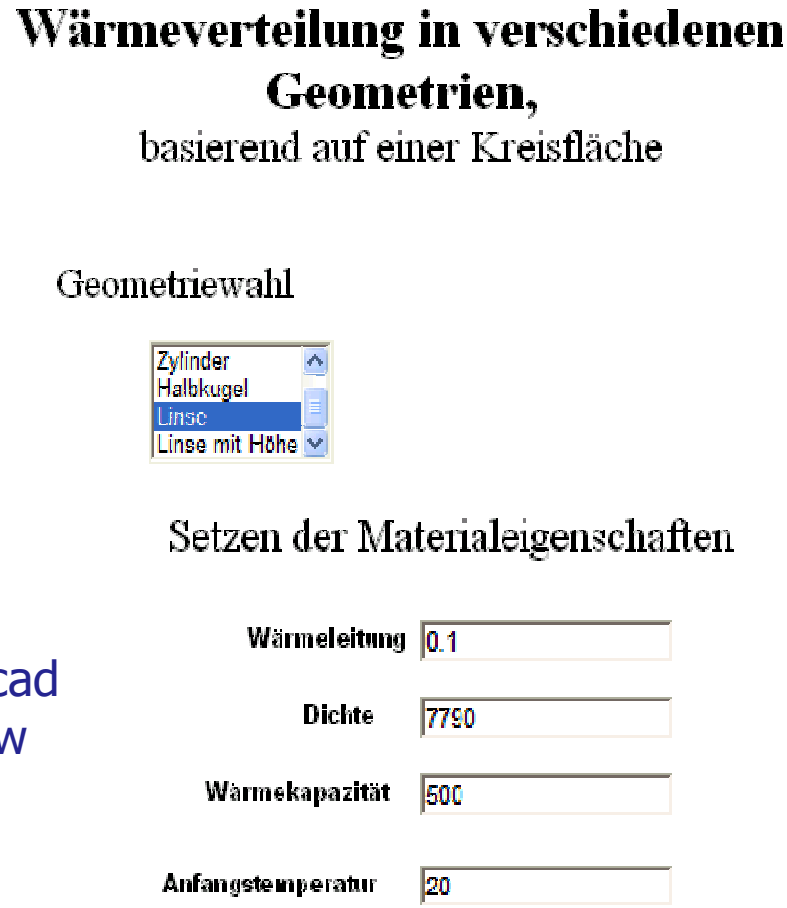
Beispiel: Linse

- Radius der Linse
- Radius der oberen und unteren Linsenoberfläche
- Anzahl der abgedeckten Quadranten
- Höhe des Zylinders
- Anzahl der Elemente für die Vernetzung



Wärmeleitungsgleichung für Mathcad

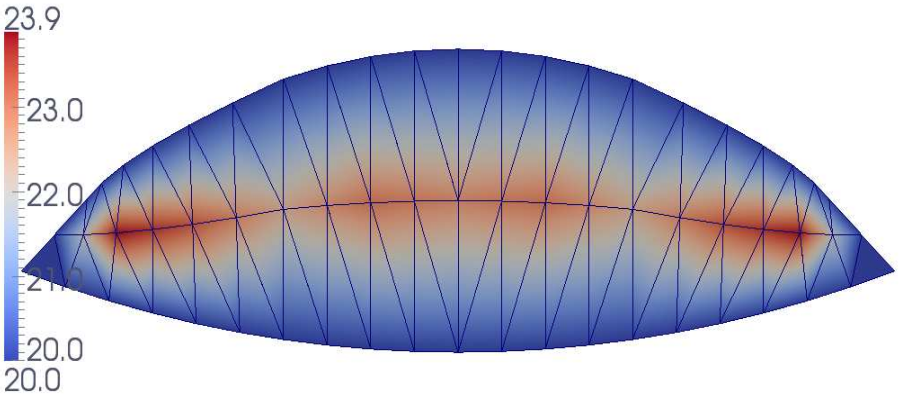
- Verwendung eines Diffpack-Wärmeleitungslösers als User-dll in Mathcad
- Neue Funktion: DpHeating
- Mathcad:
  - Definition der Geometrie, z.B. Linse
  - Setzen der Materialeigenschaften
  - Definition der Randindikatoren
  - Aufruf der Funktion DpHeating
  - Darstellung der Ergebnisse mit Mathcad oder mit externem Tool, z.B. Paraview

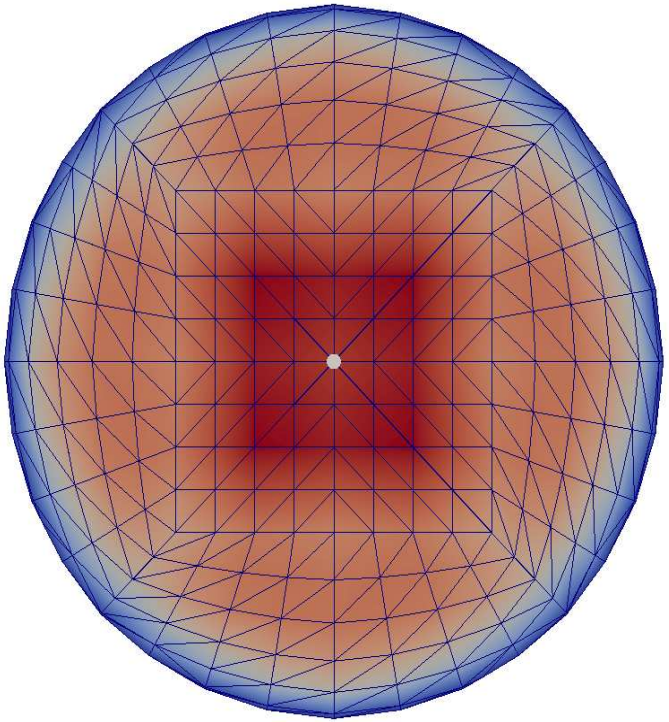


Berechnung der Wärmeverteilung einer Linse

Funktionsaufruf

Result := DpHeating(IntvlBnds, LayerThick, NumElems, MaterialCoeff, BCMatrix, solver, precond, params, geomType)





Beispiel: Berechnung von Laminaten

Box-Koordinaten

Interval x Direction: $x_L := 0$ $x_R := 0.5$

Interval y Direction: $y_L := 0$ $y_R := 1$

Interval z Direction: $z_L := 0$ $z_R := 0.5$

Materialkoeffizienten (durch Leerzeichen voneinander getrennt)

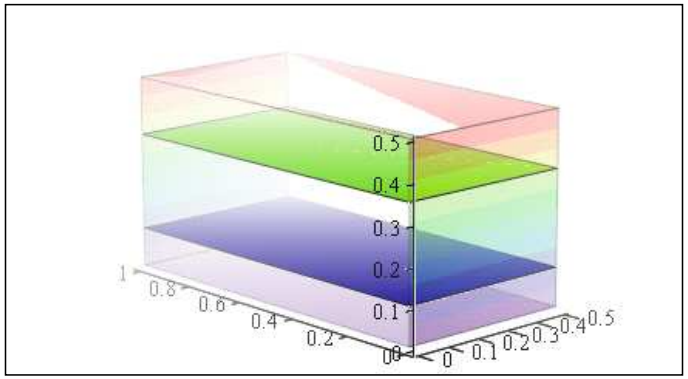
Leitzahl := 18 3.5 13

Dichte := 800 1000 400

Kapazitaet := 700 2000 300

Anfangstemp := 20 40 150

Darstellung der Box



Randbedingung oben ($z_R = 0.5$)

Dirichlet BC
Neumann BC
Robin BC

Temparatur $T_{XYTop} := 20$

Wärmeübergang $du_{XYTop} := 700$

Randbedingung unten ($z_L = 0$)

Dirichlet BC
Neumann BC
Robin BC

Temparatur $T_{XYBot} := 60$

Wärmeübergang $du_{XYBot} := 0$

Parameter für zeitabhängige Simulation

○ stationär
◉ transient

delta_t 0.1 T_f 1 theta 0.5

6. Erweiterungsmöglichkeiten

Viele weitere Probleme/Differentialgleichungen als Erweiterung möglich

Beispiel: Thermo - Elastizitätslöser

- Elastizitätsgleichung:

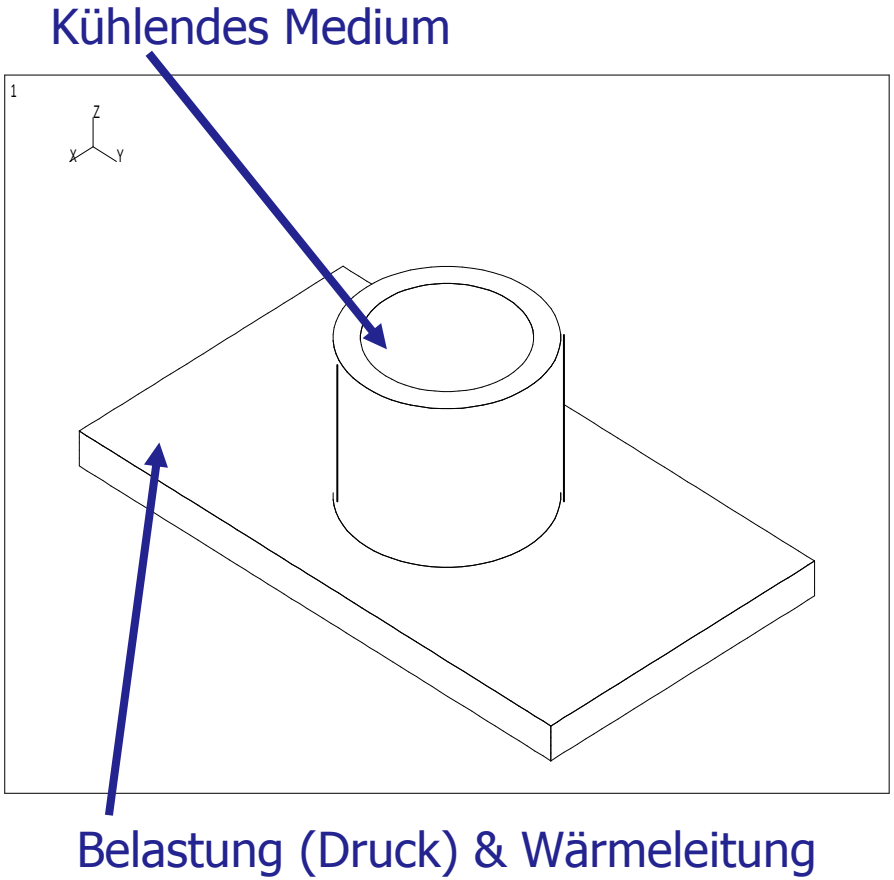
$$\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} = 0$$

$$\boldsymbol{\sigma} = -\lambda \nabla \cdot \boldsymbol{u} + \mu(\nabla \boldsymbol{u} + (\nabla \boldsymbol{u})^T)$$

- Zusätzlich: Koppelung mit Temperatur
- Löser mit Diffpack, Parametrisierung mit Mathcad

Anwendung Thermo-Elastizitätslöser:

- Standard-Simulationsaufgabe
- Leicht in andere Software integrierbar
- Kann auch von nicht – FEM Spezialisten verwendet werden



Vielen Dank
für
Ihre Aufmerksamkeit!