
Introduire une nouvelle grandeur (ou une nouvelle composante)

Résumé :

Ce document décrit ce qu'il faut faire pour introduire une nouvelle grandeur dans *Code_Aster* ou une nouvelle composante dans une grandeur existante.

En quelques mots, pour ajouter une grandeur, il faut :

- modifier le catalogue décrivant les grandeurs,
- ajouter le nom de la grandeur dans un catalogue de commandes.

Pour introduire une composante dans une grandeur existante, il suffit :

- d'enrichir le catalogue des grandeurs.

Table des Matières

1 Introduction.....	3
2 Modification du catalogue des grandeurs «physical_quantities.py».....	4
2.1 Description du catalogue.....	4
2.2 Ajout d'une grandeur.....	4
2.2.1 Choix du type.....	4
2.2.2 Nom de la grandeur.....	5
2.2.3 Noms des composantes.....	5
2.3 Ajout d'une composante dans une grandeur existante.....	6
3 Modification du catalogue «c_nom_grandeur.capy».....	6
4 Grandeurs « élémentaires ».....	7
4.1 Syntaxe.....	7
4.1.1 Grandeur « vecteur élémentaire ».....	7
4.1.2 Grandeur « matrice élémentaire ».....	7
4.2 Conventions de stockage.....	8

1 Introduction

Pour Code_Aster, une grandeur est composée d'un identifiant (son nom), d'un type et d'une liste de composantes.

Exemple de grandeur :

- `DEPL_R` : nom de la grandeur des déplacements réels aux nœuds. On associe à cette grandeur le type réel `R` et les composantes `DX`, `DY`, `DZ`, `DRX`, `DRY`, `DRZ`,

Dans Code_Aster, on distingue les grandeurs simples et les grandeurs élémentaires. Les grandeurs élémentaires sont attachées aux vecteurs ou matrices élémentaire. Elles sont construites à partir des grandeurs simples. Toutes ces grandeurs (simples et élémentaires) sont décrites dans le fichier `Commons/physical_quantities.py`. La description des grandeurs élémentaires est faite au [§4]

Nous essaierons de répondre aux questions :

- que faut-il faire pour ajouter une nouvelle grandeur ?
- que faut-il faire pour ajouter une nouvelle composante dans une grandeur existante ?
- quels catalogues faut-il modifier ?

L'introduction d'une nouvelle grandeur nécessite deux actions:

- la modification du catalogue des grandeurs : `physical_quantities.py`,
- la modification du catalogue des commandes : `c_nom_grandeur.capy`

Nous allons détailler successivement ces deux actions.

2 Modification du catalogue des grandeurs «physical_quantities.py»

On présente dans ce paragraphe la structure du catalogue `physical_quantities.py`, et on décrit comment on procède pour ajouter une grandeur ou une composante.

2.1 Description du catalogue

Le catalogue `physical_quantities.py` est présent dans le répertoire `Commons` du répertoire `catalo/cataelem`. Nous présentons ci-dessous un extrait de ce catalogue :

```
ABSC_R = PhysicalQuantity(type='R', components=('ABSC[4]', ),
    comment=""" ABSC_R Type:R Abscisse curviligne le long d'un
maillage filaire
    ABSC1 : abscisse curviligne du 1er noeud d'un SEG ou d'un POI1
    ABSC2 : abscisse curviligne du 2eme noeud d'un SEG
    ABSC3 : abscisse curviligne du 3eme noeud d'un SEG (s'il existe)
    ABSC4 : abscisse curviligne du 4eme noeud d'un SEG (s'il existe)
""")
```

Le bloc définissant une grandeur contient :

- Un argument « `type='R'` ». Il représente le type fortran des composantes de la grandeur.
- Un argument « `components=(...)` » pour définir la liste des noms des composantes de la grandeur. L'ordre des composantes est important.
Les noms des composantes sont des chaînes ayant au plus 8 caractères. Lorsqu'il existe une « série » de composantes dont les noms sont « numérotés », on peut (et on doit!) utiliser une syntaxe condensée. Par exemple : `'ABSC[4]'` remplace (`'ABSC1'`, `'ABSC2'`, `'ABSC3'`, `'ABSC4'`).
- Un argument « `comment=` » permettant de commenter la grandeur et ses composantes. Il est important de documenter TOUTES les composantes. Ce commentaire peut-être imprimé dans certains messages d'erreur pour aider l'utilisateur. Quand on écrit ces commentaires, c'est d'abord à l'utilisateur qu'il faut penser.

2.2 Ajout d'une grandeur

Le développeur désireux d'ajouter une grandeur (parfois appelée « grandeur simple » pour la distinguer d'une grandeur « élémentaire ») va devoir choisir un nom de grandeur, lui attribuer un type, et choisir les noms des composantes de cette grandeur.

2.2.1 Choix du type

Le type à associer à la grandeur est le type fortran des valeurs de ses composantes. Le développeur devra choisir un type parmi les choix ci-dessous:

- R : réel,
- I : entier,
- C : complexe,
- K8 : chaîne de 8 caractères,
- K16 : chaîne de 16 caractères,
- K24 : chaîne de 24 caractères,
- ...

2.2.2 Nom de la grandeur

La première chose à faire est de définir un nom de grandeur qui soit suffisamment explicite et non utilisé dans ce catalogue.

Comment définir un nom de grandeur ?

Les noms sont représentés par un chaîne d'au plus 8 caractères. Dans l'exemple précédent, les deux grandeurs définies ont pour nom : `ABSC_R` et `STAOUDYN`.

Remarque :

*Il est conseillé d'introduire le type de la grandeur dans son nom (par exemple `ABSC_R`), car il est plus simple pour le développeur de manipuler une grandeur dont le type lui est implicitement connu. Usuellement, on le fait précéder du caractère «`_`» (*underscore*) afin de le dissocier du nom symbolique de la grandeur.*

2.2.3 Noms des composantes

La seconde chose à faire est définir la liste des composantes. On doit se poser les questions suivantes :

- ai-je besoin de nommer explicitement chaque composante ?
- connaît-on par avance le nombre de composantes ?

Premier cas (le plus simple) : on connaît exactement le nombre de composantes et on souhaite nommer chacune d'elles avec un nom significatif. Pour cela, on définit pour chaque composante un nom d'au plus 8 caractères. C'est le cas de l'exemple suivant :

```
XCONTACT = PhysicalQuantity(type='R',  
    components=( 'RHON', 'MU', 'RHOTK', 'INTEG', 'COECH', ...
```

Second cas : on souhaite définir une grandeur dont le nombre de composantes est conséquent et dont le nom de chacune d'elles importe peu. Pour ce faire, il existe dans Code_Aster des grandeurs « neutres ». Les grandeurs `NEUT_X` (où X représente le type de la grandeur).

Exemple:

```
NEUT_R = PhysicalQuantity(type='R', components=( 'X[30]', ),  
    comment=""" NEUT_R Type:R Grandeur 'neutre' de type reel  
    La signification des composantes varie d'une option a l'autre. Cette  
    grandeur 'passe-partout' ne sert qu'a eviter l'introduction de  
    nombreuses grandeurs sans grand interet.  
    X(1) : composante 1  
    ...  
    X(30) : composante 30  
""")
```

Cet exemple décrit une grandeur «neutre» de type R pouvant recueillir au plus 30 composantes.

Quand le nombre de composantes dépasse 30, il est également possible d'utiliser les grandeurs « neutres » `N120_R`, `N120_I` et `N480_I`. Celles-ci peuvent contenir respectivement 120 composantes de type R, 120 composantes de type I et 480 composantes de type I.

Remarques :

On renseigne dans `physical_quantities.py` le nombre maximal de composantes qu'une grandeur puisse disposer. Le nombre de composantes d'une grandeur nécessaire au calcul élémentaire est défini dans chaque catalogue d'élément.
L'utilisation des grandeurs «NEUT_X» permet d'éviter la multiplication des grandeurs.

Un troisième cas peut se présenter : il existe dans Code_Aster une grandeur «spéciale» pouvant avoir un nombre indéterminé de composantes. Il s'agit de la grandeur `VARI_R` :

```
VARI_R = PhysicalQuantity(type='R',  
components=( 'VARI', ),  
comment=""" VARI_R Type:R ... """)
```

Cette grandeur n'a apparemment qu'une seule composante ('VARI'), mais en réalité, ce nombre est variable (d'un élément à l'autre par exemple). Quand on imprime cette grandeur, les composantes sont alors nommées : 'V1', 'V2', 'V3', ...

Remarques :

La grandeur `VARI_R` est souvent utilisée pour représenter les variables internes des lois de comportement non linéaire. Mais elle peut avoir d'autres usages.
Il existe aussi la grandeur `VAR2_R` similaire à `VARI_R`. Le développeur est invité à consulter le catalogue `physical_quantities.py` pour plus d'informations sur cette grandeur .

2.3 Ajout d'une composante dans une grandeur existante.

Il suffit d'enrichir la liste des composantes de la grandeur avec un nouveau nom. Vous n'oublierez pas de commenter cette nouvelle composante.

Remarque : il est plus prudent d'ajouter la nouvelle composante à la fin de la liste.

3 Modification du catalogue «`c_nom_grandeur.capy`»

Une deuxième étape à ne pas oublier lors de l'introduction d'une nouvelle grandeur (simple) dans Code_Aster, est la modification du catalogue `c_nom_grandeur.capy`.

Ce catalogue est présent dans le répertoire `commun` du répertoire `catapy`.

Il recense toutes les grandeurs simples présentes dans Code_Aster.

Extrait:

```
def C_NOM_GRANDEUR() : return (  
    "ABSC_R",  
    "ADRSJEVE",  
    "ADRSJEVN",  
    "CAARPO",  
    "CACABL",  
    "CACOQU",  
    "CADISA",  
    "CADISK",  
    ...  
)
```

A quoi sert-il ?

Il est utilisé par le superviseur python pour vérifier la saisie des utilisateurs dans les fichiers de commandes. Par exemple, lors de la création d'un champ (opérateur `CREA_CHAMP`), il faut fournir au

mot-clé `TYPE_CHAM` une chaîne de caractères décrivant le type de champ à construire (localisation et grandeur). Si `TYPE_CHAM = 'ELNO_SIEF_R'` (champ de contraintes réel aux nœuds par élément), Code_Aster exploite le catalogue `c_nom_grandeur.capy` afin de vérifier si la chaîne de caractères 'SIEF_R' saisie par l'utilisateur correspond à une grandeur.

4 Grandeurs « élémentaires »

Jusqu'à présent, nous n'avons parlé que des grandeurs « simples ». Une grandeur « simple » est une liste de composantes nommées.

Les champs aux nœuds (`cham_no_xxx`), les cartes (`carte_xxx`) et les champs par éléments (`cham_elem_xxx`) sont tous associés à une grandeur « simple ». Par exemple, un champ aux nœuds de déplacement est associé à la grandeur `DEPL_R`. Sur chacun des nœuds du maillage, ce champ peut « porter » une (ou plusieurs) composantes de la grandeur `DEPL_R`.

Les grandeurs « élémentaires » sont celles qui sont associées aux structures de données `resuelem` (vecteurs élémentaires ou matrices élémentaires).

Un `resuelem` est un « champ » contenant 1 vecteur élémentaire (ou 1 matrice élémentaire) par maille. La grandeur associée à ce champ est une grandeur élémentaire.

4.1 Syntaxe

La description des grandeurs élémentaires dans le fichier `physical_quantities.py` est faite à la fin du catalogue (car on y utilise les grandeurs simples définies au début du fichier).

Exemples :

```
MDEP_C = ArrayOfQuantities(elem='MS', phys= DEPL_C)
MDNS_R = ArrayOfQuantities(elem='MR', phys= DEPL_R)
MPRE_C = ArrayOfQuantities(elem='MS', phys= PRES_C)
VDEP_C = ArrayOfQuantities(elem='V', phys= DEPL_C)
VDEP_R = ArrayOfQuantities(elem='V', phys= DEPL_R)
```

Une grandeur élémentaire de type « vecteur » utilise `elem='V'`.

Une grandeur élémentaire de type « matrice » utilise `elem='MS'` (si elle est symétrique) ou 'MR' (si elle est non symétrique).

4.1.1 Grandeur « vecteur élémentaire »

Une grandeur de type « vecteur élémentaire » (par exemple `VDEP_R` ci-dessus) est simplement décrite par `elem='V'` et la grandeur simple associée à la grandeur élémentaire (ici `DEPL_R`).

4.1.2 Grandeur « matrice élémentaire »

Une grandeur de type « matrice élémentaire » (par exemple `MDNS_R` ci-dessus) est décrite par `elem='MR'` (matrice non symétrique) et la grandeur simple associée à la grandeur élémentaire (ici `DEPL_R`).

4.2 Conventions de stockage

Les scalaires (en général des réels) qui permettent de représenter une grandeur élémentaire sont nombreux : par exemple, la matrice de rigidité (symétrique) d'un élément mécanique MECA_HEX20 contient (60*61/2) réels.

Il n'est pas question de nommer tous ces réels (comme les composantes d'une grandeur simple).

Des conventions sont nécessaires concernant le stockage de ces scalaires.

Pour un vecteur élémentaire (destiné à être assemblé pour donner un second membre), on cherche à stocker quelque chose qui ressemble à un champ « aux nœuds » pour chaque élément. La convention de stockage est naturelle. Par exemple :

N1			N2			N3			...
DX	DY	DZ	DX	DY	DZ	DX	DY	DZ	...
1	2	3	4	5	6	7	8	9	...

Pour une matrice élémentaire, deux conventions sont nécessaires :

Pour une matrice symétrique, on stocke dans l'ordre suivant :

1				
2	3			
4	5	6		
7	8	9	10	
11	12	13	14	15

Pour une matrice non-symétrique, on stocke dans l'ordre suivant :

1	2	3	4
5	6	7	8
9	10	11	12
13	14	15	16

Sachant que l'ordre des lignes et des colonnes est le même que celui d'un vecteur élémentaire.