

Mise en œuvre de STAT_NON_LINE et de DYNA_NON_LINE

Résumé :

On décrit ici la mise en œuvre informatique de l'algorithme de résolution des problèmes quasi-statiques non linéaires et dynamiques non-linéaires. Les documents décrivant en détail ces algorithmes sont supposés connus ([R5.03.01] et [R5.05.05]), on n'en rappellera que les principales étapes. On trouvera dans ce document un rappel des notations, l'organigramme simplifié de la routine `op0070`, permettant de discerner les principales articulations logiques des opérateurs `STAT_NON_LINE` et `DYNA_NON_LINE` de *Code_Aster*, l'arbre d'appel, une description des objets informatiques et des principales routines, et quelques pièges à éviter lors du développement dans cet opérateur.

Table des matières

1.Introduction.....	5
2.Structures de données.....	6
2.1.Les types de SD.....	6
2.1.1.SD de type concept.....	6
2.1.2.SD de niveau moyen.....	6
2.1.3.SD de haut-niveau.....	7
2.2.Création des SD.....	8
2.3.Lecture des données utilisateurs.....	9
2.4.Description des SD.....	10
2.4.1.SD de niveau moyen.....	10
2.4.1.1.Fonctionnalités activées – list_func_acti.....	10
2.4.1.2.Variable-chapeau – Matrices élémentaires MEELEM.....	11
2.4.1.3.Variable-chapeau – Matrices assemblées MEASSE.....	11
2.4.1.4.Variable-chapeau – Vecteurs élémentaires VEELEM.....	11
2.4.1.5.Variable-chapeau – Vecteurs assemblés VEASSE.....	12
2.4.1.6.Variable-chapeau – Vecteurs des solutions SOLALG.....	13
2.4.1.7.Variable-chapeau – Solutions incrémentales VALINC.....	13
2.4.1.8.Accès aux variables-chapeaux.....	14
2.4.2.SD de haut-niveau.....	15
2.4.2.1.Gestion des impressions – NL_DS_Print.....	15
2.4.2.2.Gestion des tableaux – NL_DS_Table.....	16
2.4.2.3.Gestion des mesures de temps et statistiques – NL_DS_Measure.....	18
2.4.2.5.Gestion du calcul des énergies – NL_DS_Energy.....	19
2.4.2.6.Gestion des erreurs de l'algorithme – SDERRO.....	19
2.4.2.7.Gestion des entrées/sorties – NL_DS_InOut.....	20
2.4.2.8.Gestion du contact – NL_DS_Contact.....	23
2.4.2.9.Gestion de la convergence – NL_DS_Conv.....	25
2.4.2.10.Gestion des paramètres de l'algorithme – NL_DS_AlgoPara.....	27
2.4.2.11.Gestion de l'extraction de champs – SDEXTR.....	27
2.4.2.12.Gestion du SUIVI_DDL – SDSUIV.....	28
2.4.2.13.Gestion de l'OBSERVATION – SDOBSE.....	28
2.4.2.14.Gestion des critères de qualité – SDCRIQ.....	29
2.4.2.15.Gestion du pilotage – SDPILO.....	29
2.4.2.16.Gestion des numérotations – SDNUME.....	29
2.4.2.17.Gestion de la dynamique – SDDYNA.....	29
2.4.2.18.Gestion de la discrétisation temporelle – SDDISC.....	31
2.4.2.19.Gestion de la sélection d'un instant – SDSELI.....	33
2.4.2.20.Gestion des critères de convergence – SDCRIT.....	33

2.4.2.21. Gestion de la liste de sélection – NL_DS_SelectList.....	34
2.4.2.22. Gestion du calcul modale en cours de calcul non-linéaire – NL_DS_PostTimeStep, NL_DS_Spectral, NL_DS_Stability et NL_DS_SpectralResults.....	34
2.4.2.23. Gestion des tables container – NL_DS_TableIO.....	35
2.4.2.24. Gestion du comportement CARCRI et COMPOR.....	36
3. Gestion de l'algorithme.....	38
3.1. Les différentes boucles.....	38
3.2. État des boucles.....	38
3.3. Les événements.....	38
3.3.1. Types des événements.....	38
3.3.1.1. Événements de type erreur <ERR*_*>.....	39
3.3.1.2. Événements de type convergence <CONV_*>.....	39
3.3.1.3. Événements de type divergence <DIVE_*>.....	39
3.3.1.4. Événements de type informatif <EVEN>.....	39
3.3.1.5. Le cas des code-retour.....	39
3.4. Gestion des événements.....	40
3.4.1. Modification, ajout ou suppression d'un événement.....	40
3.4.2. Émissions des événements.....	40
3.4.3. Traitement des événements.....	41
3.4.3.1. Événements de type convergence et divergence.....	41
3.4.3.2. Événements de type erreurs.....	41
4. Algorithme général.....	42
4.1. Lectures et initialisations globales.....	42
4.2. Réalisation d'un pas de temps.....	43
4.2.1. Initialisations du pas.....	44
4.2.2. Prédiction d'Euler.....	44
4.2.3. Mise à jour des champs.....	45
4.2.4. Forces de correction.....	45
4.2.5. Estimation de la convergence.....	45
4.2.6. Correction de Newton.....	45
4.2.7. Boucle sur les points fixes.....	45
5. Construction et résolution des systèmes.....	47
5.1. Systèmes à résoudre.....	47
5.2. La routine merimo.....	47
5.3. Calcul des matrices.....	47
5.4. Calcul de la matrice résultante MATASS.....	48
5.5. Calcul du second membre.....	48
5.5.1. Calcul des chargements.....	49
5.5.2. Calcul des quantités liées aux efforts intérieurs.....	49

5.5.3. Calcul des quantités liées aux conditions limites dualisées.....	50
5.5.4. Calcul des quantités liées aux variables de commande.....	50
5.5.5. Calcul des quantités constantes pendant le calcul.....	50
5.5.6. Calcul des quantités liées à la dynamique – Forces d’inertie et d’amortissement.....	50
5.5.7. Seconds membres résultants.....	51
5.6. Résolution du système.....	51

1 Introduction

L'opérateur `op0070` est constitué de plusieurs parties :

1. Lecture des données ;
2. Initialisation des données ;
3. Construction et résolution d'un système linéaire ;
4. Mise-à-jour des champs ;
5. Archivage des résultats, post-traitements.

Le tout étant encapsulé dans trois niveaux de boucle : pas de temps, boucles de point fixe (pour le contact) et itérations de Newton avec une gestion de type événementielle.

Ce document propose la description de ces différentes zones de l'opérateur, en insistant particulièrement sur le côté structurant des SD (§2), des événements (§ 3.3) et sur l'algorithme général, boucle par boucle (§ 4).

À noter que pour aider au débogage, il est possible de sauvegarder les champs de déplacements dans un fichier MED, à chaque itération de Newton. Pour cela, il faut surcharger la routine `dbgcha` en changeant le booléen `dbg=.false.` en `dbg=.true.` Les champs de déplacements seront alors sauvegardés dans un fichier au format MED, sur l'unité logique 80 (ne pas oublier d'ajouter un fichier sur cette unité en sortie dans `astk`).

2 Structures de données

Une SD passe par plusieurs phases :

- Création de la SD ;
- Lecture des informations de l'utilisateur et stockage dans la SD ;
- Initialisations de la SD ;
- Destruction de la SD.

Les SD ne passent pas nécessairement par toutes ces phases.

2.1 Les types de SD

On introduit trois niveaux de SD :

1. Les concepts provenant d'autres commandes ou produits par la commande elle-même ;
2. Les SD « moyen-niveau » sont des variables Fortran (des tableaux de type simple) disposant de routines d'accès. Dans cette catégorie, on trouvera le vecteur des fonctionnalités activées `list_func_acti` et les variables-chapeaux qui sont des tableaux de chaînes de caractères contenant des objets plus complexes (matrices, vecteurs, etc) ;
3. Les SD « haut-niveau » sont
 1. Soit des objets JEVEUX spécifiques à l'opérateur (avec routines d'accès)
 2. Soit des SD standards (maillage, modèle, ...) de Code_Aster qui resteront internes à l'opérateur
 3. Soit des SD décrites à l'aide des types dérivés Fortran ;

2.1.1 SD de type concept

Les concepts proviennent d'un autre opérateur ou sont construits par l'opérateur pour être utilisés dans d'autres commandes. Elles sont construites exclusivement sur des SD standards dans Code_Aster (champs, numérotations, etc.). Leur contenu est décrit dans les documentations de type D4. Voici la liste exhaustive de ces SD dans `op0070.F90` :

Description	Type	Nom généralement utilisé
Maillage	<code>sd_mailla</code>	MAILLA
Modèle	<code>sd_modele</code>	MODELE
Résultat	<code>sd_resultat</code>	RESULT
Caractéristiques élémentaires	<code>sd_cara_elem</code>	CARELE
Chargements	<code>sd_l_charges</code>	LISCHA
Champ de matériaux et variables de commande	<code>sd_cham_mater</code>	MATE
Définition des contacts	<code>sd_contact</code>	DEFICO
Définition des liaisons unilatérales	<code>sd_contact</code>	DEFICU

2.1.2 SD de niveau moyen

Les SD de niveau moyen sont intermédiaires entre les SD « bas-niveau » et les SD « haut-niveau ». En effet, ces variables sont des objets Fortran simples mais disposent de routines d'accès. Elles sont donc « bas-niveau » du point de vue du stockage, mais leur accès se fait par des routines spécifiques, tout comme les SD de « haut-niveau ».

Description	Type	Nom
Fonctionnalités activées	INTEGER(100)	list_func_acti
Variable-chapeau – Matrices élémentaires	CHAR*19 (ZMEELM)	MEELEM
Variable-chapeau – Matrices assemblées	CHAR*19 (ZMEASS)	MEASSE
Variable-chapeau – Vecteurs élémentaires	CHAR*19 (ZVEELM)	VEELEM
Variable-chapeau – Vecteurs assemblés	CHAR*19 (ZVEASS)	VEASSE
Variable-chapeau – Champs solutions	CHAR*19 (ZSOLAL)	SOLALG
Variable-chapeau – Champs solutions incrémentales	CHAR*19 (ZVALIN)	VALINC

2.1.3 SD de haut-niveau

Toutes ces SD sont construites sur des objets JEVEUX ou des types dérivés et leur accès se fait par l'intermédiaire de routines dédiées (encapsulation des données) quand les SD sont spécifiques. On ne revient pas sur toutes, car ce sont des concepts contenus dans les mot-clefs de l'opérateur ou produits par l'opérateur (§ 2.1.1).

Description	Type	Nom
Carte de comportement	sd_carte	COMPOR
Solveur	sd_solveur	SOLVEU
Matrice de préconditionnement	sd_matr_asse	MAPREC
Matrice de résolution assemblée	sd_matr_asse	MATASS
Carte des critères de convergence pour le comportement	sd_carte	CARCRI
Carte des variables de commande de référence	sd_carte	COMREF
Carte des codes-retours erreur du comportement	sd_carte	CODERE
Numérotation	sd_num_ddd	NUMDDL
Numérotation fixe (utilisée pour le contact méthode continue)	sd_num_ddd	NUMFIX
Gestion des impressions	spécifique à op0070	ds_print
Gestion des mesures de temps et des statistiques	spécifique à op0070	ds_measure
Gestion des erreurs de l'algorithme	spécifique à op0070	SDERRO
Gestion de l'archivage et de l'état initial (IN et OUT)	spécifique à op0070	ds_inout
Gestion de la convergence	spécifique à op0070	ds_conv
Gestion du SUIVI_DDL	spécifique à op0070	SDSUIV
Gestion des critères de qualité	spécifique à op0070	SDCRIQ
Gestion du pilotage	spécifique à op0070	SDPILO
Gestion des numérotations	spécifique à op0070	SDNUME
Gestion de la dynamique	spécifique à op0070	SDDYNA
Gestion de la discrétisation temporelle	spécifique à op0070	SDDISC
Gestion des critères de convergence	spécifique à op0070	SDCRIT
Gestion de l' OBSERVATION	spécifique à op0070	SDOBSE
Gestion du post-traitement (MODE_VIBR et CRIT_STAB)	spécifique à op0070	SDPOST
Gestion de l'énergie	spécifique à op0070	SDENER
Paramètres de l'algorithme	spécifique à op0070	ds_algopara

Le reste du document va décrire essentiellement le contenu, l'utilisation et l'accès aux SD spécifiques à op0070.

Certaines SD sont construites à l'aide de type dérivés Fortran. Elles obéissent à des règles communes :

- Le module décrivant ces types est `NonLin_Datastructure_Type.F90` ;
- Les types sont préfixés par la chaîne `NL_DS_`. Par exemple `type(NL_DS_Print)` pour la gestion des impressions ;
- En général, il n'y a qu'une variable de ce type dans l'opérateur, cette variable est passée en argument dans les sous-routines qui en ont besoin (ce ne sont pas des variables globales) ;
- La gestion de ces SD est standardisée :
 - La création de ces SD est faite dans la routine `nmini0.F90` par des routines de la forme `CreateTypeDS.F90` avec **Type** le nom du type dérivé ;
 - La lecture des données utilisateurs à partir du fichier de commande est faite dans `nmdata.F90`, en général dans des routines de la forme `ReadType.F90` avec **Type** le nom du type dérivé ;
 - L'initialisation des données est faite dans `nminit.F90` en général, sauf pour certains types qui ont besoin d'une initialisation plus spécifique (à chaque pas de temps par exemple). Les routines réalisant ces initialisations sont en général de la forme `InitType.F90` avec **Type** le nom du type dérivé.

À terme, l'ensemble des structures de données de l'opérateur sera de cette forme.

2.2 Création des SD

Le tableau suivant résume l'origine de la création des SD.

Description	Type	Création
Maillage	<code>sd_mailla</code>	vient du <code>.comm</code>
Modèle	<code>sd_modele</code>	vient du <code>.comm</code>
Résultat	<code>sd_resultat</code>	<code>nmnoli</code>
Caractéristiques élémentaires	<code>sd_cara_elem</code>	vient du <code>.comm</code>
Carte de comportement	<code>sd_carte</code>	<code>nmdocc</code>
Chargements	<code>sd_l_charges</code>	<code>nmdoch</code>
Matériau codé	<code>sd_cham_mater</code>	vient du <code>.comm</code>
Définition des contacts	<code>sd_contact</code>	vient du <code>.comm</code>
Définition des liaisons unilatérales	<code>sd_contact</code>	vient du <code>.comm</code>
Fonctionnalités activées	<code>INTEGER(100)</code>	<code>op0070</code>
Variable-chapeau – Matrices élémentaires	<code>CHAR*19 (ZMEELM)</code>	<code>op0070</code>
Variable-chapeau – Matrices assemblées	<code>CHAR*19 (ZMEASS)</code>	<code>op0070</code>
Variable-chapeau – Vecteurs élémentaires	<code>CHAR*19 (ZVEELM)</code>	<code>op0070</code>
Variable-chapeau – Vecteurs assemblés	<code>CHAR*19 (ZVEASS)</code>	<code>op0070</code>
Variable-chapeau – Champs solutions	<code>CHAR*19 (ZSOLAL)</code>	<code>op0070</code>
Variable-chapeau – Champs solutions incrémentales	<code>CHAR*19 (ZVALIN)</code>	<code>op0070</code>
Solveur	<code>sd_solveur</code>	<code>nmlect</code>
Matrice de préconditionnement	<code>sd_matr_asse</code>	pendant l'algo
Matrice de résolution assemblée	<code>sd_matr_asse</code>	pendant l'algo
Carte des critères de convergence pour le comportement	<code>sd_carte</code>	<code>nmdocr</code>

Carte des variables de commande de référence	sd_carte	nmvcre
Carte des codes-retours erreur du comportement	sd_carte	pendant l'algo
Numérotation	sd_numme_ddl	nmprof
Numérotation fixe (utilisée pour le contact méthode continue)	sd_numme_ddl	nmpro2
Gestion des impressions	Type dérivé	CreatePrintDS
Gestion des mesures de temps	Type dérivé	nmcrti
Gestion des erreurs de l'algorithme	spécifique	nmcrga
Gestion de l'archivage et de l'état initial (IN et OUT)	Type dérivé	nmetcr ntetcr
Gestion des statistiques	Type dérivé	nmcrst
Gestion de la convergence	Type dérivé	CreateConvDS
Gestion du SUIVI_DDL	spécifique	nmcrdd
Gestion des critères de qualité	spécifique	nmcrer
Gestion du pilotage	spécifique	nmdopi
Gestion des numérotations	spécifique	nmnume
Gestion de la dynamique	spécifique	ndcrdy
Gestion de la discrétisation temporelle	spécifique	nmcrli
Gestion de l' OBSERVATION	spécifique	nmcrob
Gestion du post-traitement (MODE_VIBR et CRIT_STAB)	spécifique	nmdopo
Gestion de l'énergie	Type dérivé	eninit
Résolution du CONTACT	Type dérivé	cfmxsd
Résolution de LIAISON_UNIL	Type dérivé	cfmxsd
Paramètres de l'algorithme	Type dérivé	CreateAlgoParaDS

2.3 Lecture des données utilisateurs

La lecture des données utilisateurs se fait majoritairement sous la routine `nmdata`, cette routine lit les données utilisateurs et crée éventuellement les SD nécessaires. La routine `nmdome` lit les caractéristiques données par les mots-clefs `MODELE`, `CHAM_MATER`, `CARA_ELEM` et `EXCIT` en traitant également le cas des reprises de calcul (`reuse`) qui utilise les informations stockées dans la SD résultat. Le tableau ci-dessous rassemble toutes les SD qui vont lire directement des informations dans le fichier de commande (et donc utilisant les routines `getxxx` de la communication entre le Fortran et le superviseur Python).

Description	Mots-clefs	Routine de lecture
Modèle	MODELE	nmdome
Résultat	<i>concept créé</i>	nmnoli
Caractéristiques élémentaires	CARA_ELEM	nmdome
Carte de comportement	COMPORTEMENT	nmdocc
Chargements	EXCIT	nmdome
Matériau codé	CHAM_MATER	nmdome
Définition des contacts	CONTACT	cfmxsd
Définition des liaisons unilatérales	CONTACT	cfmxsd

Gestion de la convergence	CONVERGENCE	ReadConv
Solveur	SOLVEUR	cresol
Carte des critères de convergence pour le comportement	COMPORTEMENT	nmdocr
Gestion des impressions	IMPRESSION	ReadPrint
Gestion de l'archivage et de l'état initial (IN et OUT)	ARCHIVAGE ETAT_INIT	nmetcr nmcrar nmdoet
Gestion du SUIVI_DDL	SUIVI_DDL	nmcrdd
Gestion des critères de qualité	CRIT_QUALITE	nmcrer
Gestion du pilotage	PILOTAGE	nmdopi
Gestion de la dynamique	SCHEMA_TEMPS MASS_DIAG PROJ_MODAL MODE_STAT AMOR_MODAL	ndlect
Gestion de la discrétisation temporelle	DISCRETISATION	nmcrsu
Gestion de l' OBSERVATION	OBSERVATION	nmcrob
Gestion du post-traitement (MODE_VIBR et CRIT_STAB)	CRIT_STAB MODE_VIBR	nmdopo
Gestion de l'énergie	ENERGIE	eninit
Résolution du CONTACT	CONTACT	cfmxsd
Résolution de LIAISON_UNIL	CONTACT	cfmxsd
Paramètres de l'algorithme	METHODE RECH_LINEAIRE	nmdomt nmdomt_ls

2.4 Description des SD

2.4.1 SD de niveau moyen

2.4.1.1 Fonctionnalités activées – list_func_acti

Cette SD permet de savoir quelles fonctionnalités sont actives dans l'algorithme à n'importe quel moment. L'idée principale de cette SD est un `dismo` très rustique permettant de répondre à une question simple sur les fonctionnalités actives dans `op0070`. Par exemple :

- Il y a du contact : `isfonc(list_func_acti, 'CONTACT')` est vrai ;
- La recherche linéaire est activée : `isfonc(list_func_acti, 'RECH_LINEAIRE')` est vrai ;

On ne fera pas la liste des fonctionnalités interrogeables par ce mécanisme dans le présent document car ce vecteur est souvent modifié, il suffit de lire la routine `isfonc`. Même si cet objet est bas-niveau (simple tableaux d'`INTEGER`), on doit y accéder par l'intermédiaire de trois routines uniquement :

Opération sur le vecteur des fonctionnalités activées – list_func_acti	Routine
Préparation des fonctionnalités activées	nmfonc
Interrogation d'une fonctionnalité activée	isfonc
Règles d'exclusion de certaines fonctionnalités	exfonc

Il est **impératif** de modifier le vecteur `list_func_acti` uniquement dans la routine `nmfonc` (appelée dans `nminit`) et de toujours prévoir la question correspondant à cette fonctionnalité dans `isfonc`. De même, c'est

ce vecteur qu'on utilisera de manière prioritaire pour tester les compatibilités entre certaines fonctionnalités (routine `exfonc`, appelée par `nmfonc`).

2.4.1.2 Variable-chapeau – Matrices élémentaires MEELEM

Cette variable-chapeau contient le nom de toutes les matrices élémentaires utilisables dans `op0070`. Il s'agit donc d'une liste de SD de type `sd_matr_elem` (`sd_resu_elem`). Le code de repérage dans les variables chapeaux MEELEM/MEASSE est le même s'il s'agit des mêmes objets.

Variable-chapeau – Matrices élémentaires MEELEM	Code de repérage
Matrices élémentaires de rigidité	MERIGI
Matrices élémentaires des conditions limites de Dirichlet dualisées	MEDIRI
Matrices élémentaires de masse	MEMASS
Matrices élémentaires d'amortissement	MEAMOR
Matrices élémentaires des chargements suiveurs	MESUIV
Matrices élémentaires des sous-structures (macro-éléments)	MESSTR
Matrices élémentaires de rigidité géométrique	MEGEOM
Matrices élémentaires de contact (méthode CONTINUE et XFEM)	MEELTC
Matrices élémentaires de frottement (méthode CONTINUE et XFEM)	MEELTF

2.4.1.3 Variable-chapeau – Matrices assemblées MEASSE

Cette variable-chapeau contient le nom de toutes les matrices assemblées utilisables dans `op0070`. Il s'agit donc d'une liste de SD de type `sd_matr_asse`. Le code de repérage dans les variables chapeaux MEELEM/MEASSE est le même s'il s'agit des mêmes objets.

Variable-chapeau – Matrices assemblées MEASSE	Code de repérage
Matrice assemblée de rigidité	MERIGI
Matrice assemblée de masse	MEMASS
Matrice assemblée d'amortissement	MEAMOR
Matrice assemblée des sous-structures (macro-éléments)	MESSTR

2.4.1.4 Variable-chapeau – Vecteurs élémentaires VEELEM

Cette variable-chapeau contient le nom de tout les vecteurs élémentaires utilisables dans `op0070`. Il s'agit donc d'une liste de SD de type `sd_vect_elem` (`sd_resu_elem`). Le code de repérage dans les variables chapeaux VEELEM/VEASSE est le même s'il s'agit des mêmes objets.

Variable-chapeau – Vecteurs élémentaires VEELEM	Code de repérage
Vecteur élémentaire des forces internes	CNFINT
Vecteur élémentaire des réactions d'appui pour les conditions limites de Dirichlet dualisées	CNDIRI
Vecteur élémentaire des conditions limites de Dirichlet dualisées	CNBUDI
Vecteur élémentaire des forces nodales	CNFNOD
Vecteur élémentaire des conditions limites de Dirichlet données	CNDIDO
Vecteur élémentaire des conditions limites de Dirichlet pilotées	CNDIPI

Vecteur élémentaire des conditions limites de Neumann données	CNFEDO
Vecteur élémentaire des conditions limites de Neumann pilotées	CNFEPI
Vecteur élémentaire des conditions limites de type Laplace	CNLAPL
Vecteur élémentaire des conditions limites de type onde plane	CNONDP
Vecteur élémentaire des conditions limites de Neumann suiveuses et données	CNFSDO
Vecteur élémentaire des conditions limites de type impédance (en prédiction)	CNIMPP
Vecteur élémentaire des conditions limites de Dirichlet différentielles	CNDIDI
Vecteur élémentaire des forces sur les sous-structures	CNSSTF
Vecteur élémentaire des forces de contact (méthode CONTINUE et XFEM)	CNELTC
Vecteur élémentaire des forces de frottement (méthode CONTINUE et XFEM)	CNELTF
Vecteur élémentaire des forces de référence (RESI_REFE_REL)	CNREFE
Vecteur élémentaire des variables de commande pour l'état initial	CNVCF1
Vecteur élémentaire des variables de commande pour la convergence	CNVCF0
Vecteur élémentaire des conditions limites de type impédance (en correction)	CNIMPC

2.4.1.5 Variable-chapeau – Vecteurs assemblés VEASSE

Cette variable-chapeau contient le nom de tous les vecteurs assemblés utilisables dans op0070. Il s'agit donc d'une liste de SD de type sd_cham_no. Ces vecteurs sont essentiellement utilisés dans la construction des seconds membres et dans l'évaluation de la convergence. Le code de repérage dans les variables chapeaux VEELEM/VEASSE est le même s'il s'agit des mêmes objets.

Variable-chapeau – Vecteurs assemblés VEASSE	Code de repérage
Vecteur assemblé des forces internes	CNFINT
Vecteur assemblé des réactions d'appui pour les conditions limites de Dirichlet dualisées	CNDIRI
Vecteur assemblé des conditions limites de Dirichlet dualisées	CNBUDI
Vecteur assemblé des forces nodales	CNFNOD
Vecteur assemblé des conditions limites de Dirichlet données	CNDIDO
Vecteur assemblé des conditions limites de Dirichlet pilotées	CNDIPI
Vecteur assemblé des conditions limites de Neumann données	CNFEDO
Vecteur assemblé des conditions limites de Neumann pilotées	CNFEPI
Vecteur assemblé des conditions limites de type Laplace	CNLAPL
Vecteur assemblé des conditions limites de type onde plane	CNONDP
Vecteur assemblé des conditions limites de Neumann suiveuses et données	CNFSDO
Vecteur assemblé des conditions limites de type impédance (en prédiction)	CNIMPP
Vecteur assemblé des conditions limites de Dirichlet différentielles	CNDIDI
Vecteur assemblé des forces sur les sous-structures	CNSSTF
Vecteur assemblé des forces de contact (méthode CONTINUE et XFEM)	CNELTC
Vecteur assemblé des forces de frottement (méthode CONTINUE et XFEM)	CNELTF
Vecteur assemblé des forces de référence (RESI_REFE_REL)	CNREFE
Vecteur assemblé des variables de commande pour l'état initial	CNVCF1

Vecteur assemblé des variables de commande pour la convergence	CNVCF0
Vecteur assemblé des conditions limites de type impédance (en correction)	CNIMPC
Vecteur assemblé des conditions limites de Dirichlet éliminées	CNCINE
Vecteur assemblé des sous-structures	CNSSTR
Vecteur assemblé des forces de frottement (méthode DISCRETE)	CNCTDF
Vecteur assemblé des variables de commande pour le calcul	CNVCPR
Vecteur assemblé des forces dynamiques	CNDYNA
Vecteur assemblé de l'amortissement modal (en prédiction)	CNMODP
Vecteur assemblé de l'amortissement modal (en correction)	CNMODC
Vecteur assemblé des forces de contact (méthode DISCRETE)	CNCTDC
Vecteur assemblé des forces unilatérales (méthode LIAISON_UNIL)	CNUNIL
Vecteur assemblé des forces extérieures	CNFEXT
Vecteur assemblé des conditions limites de type VECT_ISS	CNVISS

2.4.1.6 Variable-chapeau – Vecteurs des solutions SOLALG

Cette variable-chapeau contient le nom des champs aux nœuds qui servent dans l'algorithme pour calculer la solution.

Variable-chapeau – Vecteurs des solutions SOLALG	Code de repérage
Solution en déplacement de l'itération de Newton courante	DDEPLA
Déplacement cumulé depuis le début du pas de temps	DEPDEL
Incrément de déplacement du pas de temps précédent	DEPOLD
Solution en déplacement de la prédiction	DEPPR1
Solution en déplacement de la prédiction (partie pilotée)	DEPPR2
Solution en vitesse de l'itération de Newton courante	DVITLA
Vitesse cumulée depuis le début du pas de temps	VITDEL
Incrément de vitesse du pas de temps précédent	VITOLD
Solution en vitesse de la prédiction	VITPR1
Solution en vitesse de la prédiction (partie pilotée)	VITPR2
Solution en accélération de l'itération de Newton courante	DACCLA
Accélération cumulée depuis le début du pas de temps	ACCDEL
Incrément d'accélération du pas de temps précédent	ACCOLD
Solution en accélération de la prédiction	ACCPR1
Solution en accélération de la prédiction (partie pilotée)	ACCPR2
Solution du système	DEPSO1
Solution du système (partie pilotée)	DEPSO2

2.4.1.7 Variable-chapeau – Solutions incrémentales VALINC

Cette variable-chapeau contient le nom des champs aux nœuds ou des champs de type ELGA qui seront les solutions du problème non-linéaire.

Variable-chapeau – Solutions incrémentales VALINC	Code de repérage
Déplacements au début du pas de temps	DEPMOI
Contraintes au début du pas de temps	SIGMOI
Variables internes au début du pas de temps	VARMOI
Vitesses au début du pas de temps	VITMOI
Accélérations au début du pas de temps	ACCMOI
Variables de commande au début du pas de temps	COMMOI
Variables pour les éléments multifibres au début du pas de temps	STRMOI
Forces extérieures au début du pas de temps (pour le calcul des énergies)	FEXMOI
Forces d'amortissement au début du pas de temps (pour le calcul des énergies)	FAMMOI
Forces de liaison au début du pas de temps (pour le calcul des énergies)	FLIMOI
Forces nodales au début du pas de temps (pour le calcul des énergies)	FNOMOI
Déplacements à la fin du pas de temps	DEPPLU
Contraintes à la fin du pas de temps	SIGPLU
Variables internes à la fin du pas de temps	VARPLU
Vitesses à la fin du pas de temps	VITPLU
Accélérations à la fin du pas de temps	ACCPPLU
Variables de commande à la fin du pas de temps	COMPLU
Variables pour les éléments multifibres à la fin du pas de temps	STRPLU
Forces extérieures à la fin du pas de temps (pour le calcul des énergies)	FEXPLU
Forces d'amortissement à la fin du pas de temps (pour le calcul des énergies)	FAMPLU
Forces de liaison à la fin du pas de temps (pour le calcul des énergies)	FLIPLU
Forces nodales à la fin du pas de temps (pour le calcul des énergies)	FNOPLU
Contraintes extrapolées (méthode IMPLEX)	SIGEXT
Déplacements à l'itération de Newton courante (gestion des grandes rotations)	DEPKM1
Vitesses à l'itération de Newton courante (gestion des grandes rotations)	VITKM1
Accélérations à l'itération de Newton courante (gestion des grandes rotations)	ACCKM1
Rotations à l'itération de Newton précédente (gestion des grandes rotations)	ROMK
Rotations à l'itération de Newton courante (gestion des grandes rotations)	ROMKM1

2.4.1.8 Accès aux variables-chapeaux

L'accès aux variables-chapeaux se fait par l'intermédiaire de cinq routines.

Opération sur la variable-chapeau	Routine
Création d'une variable-chapeau	nmcha0
Récupération de l'index où est stocké le nom de la variable dans la variable-chapeau	nmchai
Recopie d'une variable-chapeau	nmchcp
Récupération du nom de la variable dans la variable-chapeau	nmchex
Recopie une variable-chapeau en changeant éventuellement un nom de variable	nmchso
Création des CHAM_NO pour VALINC , SOLAG et VEASSE	nmcrch

La taille de ces SD est indiquée de la même manière que les SD bas-niveau. Néanmoins, il convient de répercuter un changement de taille sur la routine principale `nmchai`. Si on veut modifier le contenu d'une variable-chapeau (ajouter, supprimer ou modifier le contenu d'une variable-chapeau), il faut :

- Impacter éventuellement la longueur dans `op0070`, `nmini0` (ASSERT de protection) et `nmchai` ;
- Modifier dans `nmchai` ;
- Créer la variable-chapeau (voir § 2.2) ;
- Initialiser éventuellement le contenu de la variable-chapeau ;

Ces routines se contentent de gérer les variables-chapeaux en tant que liste de noms, le contenu proprement dit de ces variables-chapeaux ne dépend pas d'elles. Par exemple, la variable-chapeau `VEASSE` contient des vecteurs assemblés. Aucune des routines du tableau précédent ne s'occupent de gérer la SD `CHAM_NO` des objets contenus dans la variable-chapeau, juste leur nom. Pour les trois variables-chapeaux définissant des `CHAM_NO`, les champs sont créés dans la routine `nmcrch`, en utilisant les informations sur les fonctionnalités actives `list_func_acti`.

2.4.2 SD de haut-niveau

2.4.2.1 Gestion des impressions – `NL_DS_Print`

L'impression comporte trois types d'objets :

- Les impressions « standards » à base d'`utmess` ;
- L'impression du tableau de convergence (dans le fichier `.mess` et éventuellement en export dans un fichier de type `csv`) ;
- Les lignes de séparation dans le fichier message.

La principale difficulté dans la gestion de cette structure de données vient du fait que le tableau de convergence est dynamique car l'affichage des colonnes dépend à la fois des fonctionnalités activées (recherche linéaire, type de résidu, contact, etc.) définies via l'objet `list_func_acti` (voir §2.4.1.1), mais aussi d'options définies par l'utilisateur (`INFO_RESIDU` et `INFO_TEMPS` dans le mot-clef facteur `AFFICHAGE` mais aussi `monitoring` de degrés de liberté dans le mot-clef facteur `SUIVI_DDL`).

Une seule variable `ds_print` de type `NL_DS_Print` gère l'ensemble des impressions (sauf les `utmess` standards). Elle contient différentes informations :

- les informations récupérées dans le mot-clef `AFFICHAGE` ;
- un drapeau indiquant si on doit faire de l'affichage dans le fichier message (évalué à partir du paramètre `PAS`) ;
- un tableau de convergence ;
- une chaîne de caractères (de la largeur du tableau de convergence) contenant la ligne de séparation (avec des "-") ;

Actuellement, `op0070` n'a qu'un tableau de convergence, mais la définition de ce qu'est un tableau sous forme générique (voir §2.4.2.2) permettra à terme d'ajouter d'autres tableaux (comme l'énergie par exemple).

Le type `NL_DS_Print` a la structure suivante :

Type	Nom	Description
<code>aster_logical</code>	<code>l_print</code>	drapeau pour savoir si on affiche ou pas
<code>type(NL_DS_Table)</code>	<code>table_cvg</code>	tableau de convergence
<code>aster_logical</code>	<code>l_info_resi</code>	paramètre <code>INFO_RESIDU</code> dans <code>AFFICHAGE</code>
<code>aster_logical</code>	<code>l_info_time</code>	paramètre <code>INFO_TEMPS</code> dans <code>AFFICHAGE</code>
<code>aster_logical</code>	<code>l_tcvg_csv</code>	drapeau pour savoir si on sort le tableau de convergence dans un fichier CSV
<code>integer</code>	<code>tcvg_unit</code>	paramètre <code>UNITE</code> dans <code>AFFICHAGE</code> (tableau de convergence dans un fichier CSV)
<code>integer</code>	<code>reac_print</code>	paramètre <code>PAS</code> dans <code>AFFICHAGE</code>

character(len=255)	sep_line	ligne de séparation (---), de la largeur du tableau de convergence
--------------------	----------	--

La gestion de la SD se fait en trois temps :

1. Création de la SD dans la routine `CreatePrintDS` dans `nmini0`. Cette création comprend en particulier la création de toutes les colonnes possibles dans le tableau de convergence. Leur affichage effectif dépendra de l'état du drapeau de leur activation.
2. Lecture des informations données par l'utilisateur (mot-clef `AFFICHAGE`). Routine `ReadPrint` dans `nmdata`. Les informations ont stockées dans `ds_print`.
3. Initialisation de la SD. Se fait en deux temps :
 1. Ajout des colonnes pour le `SUIVI_DDL` dans la routine `InitPrint` dans `nminit`. En effet, ces colonnes (dont leur titre) va dépendre de ce qu'a demandé l'utilisateur dans le mot-clef facteur `SUIVI_DDL` ;
 2. Activation des colonnes suivant les fonctionnalités à chaque pas de temps dans `nmimin` (routine `nmnpas`).

Ensuite, au niveau de l'utilisation dans l'algorithmie, elle se fait en deux temps. Le développeur affecte les valeurs des colonnes au bon moment grâce à la routine `SetCol`. L'algorithmie général concatène les informations, crée le tableau de convergence et l'affiche de manière régulière à chaque itération de Newton. Ces routines utilitaires de manipulation de la SD ont en général un identificateur commençant par `nmimpX`. On n'en fait pas la liste exhaustive.

2.4.2.2 Gestion des tableaux – NL_DS_Table

La structure de données `NL_DS_Table` est un objet qui a une double-fonction :

- il gère une `table` (au sens `Code_Aster`) qui est attachée à la structure de données résultat comme l'est la table d'observation (voir §2.4.2.13) ou des statistiques (voir §2.4.2.3) ;
- il gère un tableau qui sera affichable dans le fichier `mess` ou exportable au format `csv` (tableau de convergence ou des énergies par exemple)

Ce tableau est défini par :

- ses colonnes : nombre, identifiant et type (entier, réel, chaîne ou complexe) ;
- ses lignes : pour chaque ligne, la valeur affectée et un indicateur d'affectation ;
- son entête : titre (trois lignes au maximum) ;
- ses éléments graphiques : ligne de séparation (par exemple lors de passage des boucles de points fixes en contact) ;
- ses dimensions : sa largeur totale (qui est une fonction du nombre de colonnes et de la largeur de chaque colonne).

Une des difficultés pour gérer ce tableau est de définir dynamiquement les colonnes (selon les fonctionnalités par exemple.) Pour cela, on gère une double liste :

- la liste exhaustive des colonnes possibles ;
- un indicateur de l'activation d'une colonne.

Le type tableau générique est défini par `NL_DS_Table` qui a la structure suivante :

Type	Nom	Description
integer	<code>nb_cols</code>	Nombre de colonnes
integer	<code>nb_cols_maxi</code>	Nombre maximum de colonnes d'un tableau
type(NL_DS_Column)	<code>cols(max)</code>	Liste des colonnes
aster_logical	<code>l_cols_acti(max)</code>	Drapeau indiquant que la colonne est active ou pas
integer	<code>width</code>	Largeur totale du tableau
integer	<code>title_height</code>	Hauteur du titre (3 par le tableau de convergence)
character(len=255)	<code>sep_line</code>	Ligne de séparation dans le tableau
aster_logical	<code>l_csv</code>	Drapeau pour dire que ce tableau est aussi imprimé dans un

		fichier externe csv
integer	unit_csv	Unité logique pour l'export au format csv
type (NL_DS_TableIO)	table_io	Structure de données table_container
integer	indx_vale (max)	Table d'indirection entre les colonnes et l'objet s'y rattachant

Les objets `table_name`, `nb_para`, `list_para` et `type_para` permettent d'utiliser directement les utilitaires de gestion de table. Par exemple :

- `call tbajpa(tble%table_name, tble%nb_para, tble%list_para, tble%type_para)`
- `call tbajli(tble%table_name, tble%nb_para, tble%list_para, ...)`

Sans avoir besoin de reconstruire les listes de paramètres à chaque fois.

Pour des raisons d'efficacité, le nombre maximum de colonnes n'est pas évalué dynamiquement mais donné par la variable `nb_cols_maxi`. On l'utilise pour les variables `cols(*)` et `l_cols_acti(*)`.

Les utilitaires disponibles pour la SD sont les suivants :

- `CreateTable.F90` : crée une table dans la SD résultat
- `CreateVoidTable.F90` : crée une table vide (initialisation de tous les objets)
- `ComputeTableHead.F90` : crée les chaînes permettant d'écrire le titre de la table
- `ComputeTableWidth.F90` : calcule la largeur totale de la table (selon les colonnes actives)
- `PrepareTableLine.F90` : crée la chaîne correspondant à une ligne (vide) de la table
- `PrintTableLine.F90` : crée la chaîne (avec les valeurs et les marques) et l'imprime dans une unité logique
- `SetTableColumn.F90` : affecte une colonne dans une table
- `SetTablePara.F90` : prépare les objets `list_para` et `type_para`

Une colonne est définie par :

- un identifiant sous forme de chaîne ;
- trois chaînes définissant le titre de la colonne (on peut en utiliser 1, 2 ou 3 selon la définition du tableau) ;
- un drapeau pour dire si une valeur est affectée ou pas (permet de ne rien afficher si la valeur n'est pas définie) ;
- quatre drapeaux pour donner le type de valeur contenue dans la colonne: entier, chaîne, complexe ou réel ;
- quatre variables (entier, chaîne, complexe, réel) contenant la valeur à afficher ;
 - la possibilité d'afficher une « marque » à côté d'une valeur dans une colonne. Cette marque sert par exemple à dire sur quel résidu on converge (un « X ») ou si l'on a atteint une borne dans le cas du pilotage. Remarque: la marque n'est autorisée qu'avec des colonnes de type entier ou réel, pas avec des chaînes de caractères.

Une colonne est définie par le type `NL_DS_Column` qui a la structure suivante :

Type	Nom	Description
aster_logical	<code>l_vale_affe</code>	drapeau pour dire qu'on a affecté une valeur dans la colonne
aster_logical	<code>l_vale_inte</code>	drapeau pour dire que la colonne contient un entier
aster_logical	<code>l_vale_real</code>	drapeau pour dire que la colonne contient un réel
aster_logical	<code>l_vale_cplx</code>	drapeau pour dire que la colonne contient un complexe
aster_logical	<code>l_vale_strg</code>	drapeau pour dire que la colonne contient une chaîne
integer	<code>vale_inte</code>	valeur de la colonne si c'est un entier
real(kind=8)	<code>vale_real</code>	valeur de la colonne si c'est un réel
complex(kind=8)	<code>vale_cplx</code>	valeur de la colonne si c'est un complexe
character(len=24)	<code>vale_strg</code>	valeur de la colonne si c'est une chaîne
character(len=9)	<code>name</code>	nom de la colonne (identificateur unique)

character(len=16)	title(3)	titre de la colonne (jusqu'à trois lignes de titre)
character(len=1)	mark	éventuelle marque à côté de la valeur dans la colonne (X, B, etc.)

2.4.2.3 Gestion des mesures de temps et statistiques – NL_DS_Measure

La structure de données permet de gérer les mesures diverses réalisées lors d'un calcul. Elle stocke les temps mais aussi diverses informations comme le nombre d'itérations de Newton ou le nombre de nœuds en contact.

On se base pour cela sur trois structures de données :

- la SD `NL_DS_Measure` est représentée par une seule variable de nom `ds_measure`. C'est un agrégateur des différentes mesures ;
- la SD `NL_DS_Timer` gère les différents timers ;
- la SD `NL_DS_Device` est l'objet qui réalise les mesures.

1.

La structure de données `NL_DS_Timer` est un objet assez simple qui permet de gérer les appel aux utilitaires de type `uttcpu.F90`. Elle a la structure suivante :

Type	Nom	Description
character(len=9)	type	nom du timer (identificateur unique)
character(len=24)	cpu_name	nom pour les utilitaires <code>uttcpu</code>
real(kind=8)	time_init	temps initial sauvegardé

La routine `nmtime.F90` gère ces timers (démarrage, arrêt, mesure et ré-initialisation).

Pour lancer un chronomètre :

```
call nmtime(ds_measure, 'Launch', 'Time_Step')
```

Pour l'arrêter (et mesurer) :

```
call nmtime(ds_measure, 'Stop', 'Time_Step')
```

Ensuite, la structure de données `NL_DS_Device` gère les mesures. Chaque *device* permet de mesurer une opération pendant le calcul. La SD a la structure suivante :

2.4.2.4

Type	Nom	Description
character(len=9)	type	Nom du device (identificateur unique)
character(len=9)	timer_name	Nom du timer attaché au device
real(kind=8)	time_iter	Temps mesuré pour une itération de Newton
real(kind=8)	time_step	Temps mesuré pour un pas de calcul
real(kind=8)	time_comp	Temps mesuré pour tout le calcul
integer	time_indi_step	Index dans le catalogue des messages <code>measure.py</code> pour afficher le temps pour ce device à chaque pas de temps (géré dans <code>nmimpr_mess.F90</code>)
integer	time_indi_comp	Index dans le catalogue des messages <code>measure.py</code> pour afficher le temps pour ce device à la fin du calcul (géré dans <code>nmimpr_mess.F90</code>)
aster_logical	l_count_add	Drapeau pour cumuler le nombre d'occurrences à chaque étape
integer	count_iter	Compteur d'occurrences pour une itération de Newton
integer	count_step	Compteur d'occurrences pour un pas de calcul
integer	count_comp	Compteur d'occurrences pour tout le calcul
integer	count_indi_step	Index dans le catalogue des messages <code>measure.py</code> pour afficher le compteur pour ce device à chaque pas de temps

		(géré dans nmimpr_mess.F90)
integer	count_indi_comp	Index dans le catalogue des messages <code>measure.py</code> pour afficher le compteur pour ce device à la fin du calcul (géré dans nmimpr_mess.F90)

La routine `nmrvai.F90` permet de gérer les compteurs.

Pour incrémenter un compteur (nombre de pas de temps par exemple) :

```
call nmrinc(ds_measure, 'Time_Step')
```

Pour donner la valeur d'un compteur :

```
call nmrvai(ds_measure, 'Contact_NumbCont', input_count = nbliac)
```

En fait `nmrinc.F90` c'est `nmrvai.F90` avec `input_count = 1`.

Enfin, la structure de données `NL_DS_Measure` gère l'ensemble des SD permettant les mesures (temps et statistiques diverses). Elle a la structure suivante :

Type	Nom	Description
aster_logical	<code>l_table</code>	.true. quand l'utilisateur a écrit <code>TABLE='OUI'</code> dans le mot-clef <code>MESURE</code>
type(NL_DS_Table)	<code>table</code>	Table en sortie pour les statistiques
integer	<code>nb_device</code>	Nombre de device utilisés
integer	<code>nb_device_maxi</code>	Nombre de device maximum
type(NL_DS_Device)	<code>device(max_device)</code>	Liste des device
aster_logical	<code>l_device_acti(max_device)</code>	Liste des device actifs
integer	<code>indx_cols(2*max_device)</code>	Référence des colonnes de la table vers les device
integer	<code>nb_timer</code>	Nombre de timer utilisés
integer	<code>nb_timer_maxi</code>	Nombre de timer maximum
type(NL_DS_Timer)	<code>timer(2*max_timer)</code>	Liste des timer
real(kind=8)	<code>store_mean_time</code>	Temps moyen pour l'archivage
real(kind=8)	<code>iter_mean_time</code>	Temps moyen par itération de Newton
real(kind=8)	<code>step_mean_time</code>	Temps moyen par pas de temps
real(kind=8)	<code>iter_remain_time</code>	Temps restant pour l'itération
real(kind=8)	<code>step_remain_time</code>	Temps restant pour le pas de temps

L'ensemble des données de cette structure est créé dans la routine principale `nmcrti.F90`. Cette routine utilise la routine `ActivateDevice.F90` qui permet d'activer un device selon la disponibilité de certaines fonctionnalités.

2.4.2.5 Gestion du calcul des énergies – NL_DS_Energy

Pour mesurer les énergies, on utilise une structure de données de type `NL_DS_Energy` qui a la structure suivante :

Type	Nom	Description
aster_logical	<code>l_comp</code>	.true. quand on veut mesurer les énergies
type(NL_DS_Table)	<code>table</code>	table en sortie pour les énergies (voir §16)
character(len=16)	<code>command</code>	Commande appelante

2.4.2.6 Gestion des erreurs de l'algorithme – SDERRO

Cette SD s'occupe de gérer les erreurs de l'algorithme. Elle contient sept objets de même taille, celui du nombre d'événements (variable ZEVEN) traitables par l'algorithme (modifiable dans nmcrga, cf § 3.4.1)

SDERRO – Objets	
Nom	Description
SDERRO (1:19) // ' .ENOM '	Nom de l'événement
SDERRO (1:19) // ' .ECOV '	Valeur du code-retour lié à l'événement
SDERRO (1:19) // ' .ECON '	Nom du code-retour lié à l'événement
SDERRO (1:19) // ' .ENIV '	Type et niveau de déclenchement de l'événement
SDERRO (1:19) // ' .EFCT '	Fonctionnalité activant un événement de type convergence ou divergence
SDERRO (1:19) // ' .EACT '	État de l'événement (activé ou non)
SDERRO (1:19) // ' .EMSG '	Code du message à afficher quand l'événement se déclenche

Les deux autres objets permettent de gérer l'état de la boucle et de stocker le dernier événement déclenché (servira aux affichages).

SDERRO – Objets	
Nom	Description
SDERRO (1:19) // ' .CONV '	État de la boucle
SDERRO (1:19) // ' .EEVT '	Information sur le dernier événement déclenché

La SD ERRO s'utilise en utilisant certaines informations contenues dans la SDDISC (§2.4.2.18), provenant des définitions des événements de la commande DEFI_LIST_INST.

Opération sur la gestion des erreurs de l'algorithme – SDERRO	Routine
Création de la SDERRO	nmcrga
Enregistrement d'un événement	nmcrel
Enregistrement d'un événement à partir d'un code-retour	nmcret
Changement de l'état d'une boucle	nmeceb
Lecture de l'état d'une boucle	nmleeb
Remise à zéro des événements	nmeraz
Retourne l'état d'un événement (actif ou non) suivant son nom	nmerge
Émission du message d'information sur l'événement	nmevim
Évaluation de l'état de convergence d'une boucle	nmevcv
Retourne l'état d'un événement (actif ou non) suivant son type	nmltev

L'utilisation de ces routines dans le cadre de la gestion des événements est détaillée dans le § 3.4 .

2.4.2.7 Gestion des entrées/sorties – NL_DS_InOut

On appelle entrées/sorties des opérateurs non-linéaires l'ensemble des opérations liées aux fonctionnalités suivantes :

- Lecture d'un état initial (mot-clef facteur ETAT_INIT) ;
- Extraction des résultats dans une table pendant le calcul (mot-clef facteur OBSERVATION) et monitoring en temps réel dans le tableau de convergence (mot-clef facteur SUIVI_DDL) ;
- Archivage des résultats dans la SD résultat (mot-clef facteur ARCHIVAGE) .

Il y a deux types dérivés pour cette fonctionnalité : NL_DS_Inout et NL_DS_Field.

Une seule variable `ds_inout` de type `NL_DS_Inout` gère l'ensemble des entrées-sorties. L'objet principal `ds_inout` contient des paramètres issus de l'utilisateur (mot-clefs `ETAT_INIT` et `ARCHIVAGE`) ainsi qu'une liste de champs et leur comportement en entrée/sortie.

Cette SD ne gère pas encore le cas des `_paramètres_` des SD résultats (sauf la liste des charges), mais seulement la liste des champs. Elle ne gère pas non plus les utilitaires liés au cadencement de l'archivage (pour l'instant dans la `SDDISC` voir §2.4.2.18) ni les informations liées à la manière de réaliser une `OBSERVATION` (pour l'instant dans la `SDOBSE` voir §2.4.2.13). Le type `NL_DS_Inout` a la structure suivante :

Type	Nom	Description
character(len=8)	result	nom de la SD résultat pour archiver
integer	nb_field	nombre de champs gérés
integer	nb_field_maxi	nombre maximum de champs gérables
type(NL_DS_Field)	field (nb_field_maxi)	Liste des champs
character(len=8)	stin_evol	nom de la SD résultat dans <code>ETAT_INIT</code>
aster_logical	l_stin_evol	drapeau pour la présence d'une SD résultat dans <code>ETAT_INIT</code>
aster_logical	l_field_acti (nb_field_maxi)	drapeaux des champs actifs (dépend des fonctionnalités)
aster_logical	l_field_read (nb_field_maxi)	drapeaux pour indiquer qu'un champ est à considérer dans l'état initial
aster_logical	l_state_init	drapeau pour indiquer la présence d'un état initial
aster_logical	l_reuse	drapeau pour indiquer qu'on est en mode <code>reuse</code>
integer	didi_num	numéro d'ordre pour les chargements <code>DIDI</code> (<code>NUME_DIDI</code> dans <code>ETAT_INIT</code>)
character(len=8)	criterion	valeur de <code>CRITERE</code> dans <code>ETAT_INIT</code> (pour sélection par un instant)
real(kind=8)	precision	valeur de <code>PRECISION</code> dans <code>ETAT_INIT</code> (pour sélection par un instant)
real(kind=8)	user_time	valeur de l'état initial donnée par un instant dans <code>ETAT_INIT</code>
aster_logical	l_user_time	drapeau pour dire que la valeur de l'état initial est donnée par un instant dans <code>ETAT_INIT</code>
integer	user_num	valeur de l'état initial donné par un numéro d'ordre dans <code>ETAT_INIT</code>
aster_logical	l_user_num	drapeau pour dire que la valeur de l'état initial est donnée par un numéro d'ordre dans <code>ETAT_INIT</code>
real(kind=8)	stin_time	valeur de l'état initial défini par <code>INST_ETAT_INIT</code> dans <code>ETAT_INIT</code>
aster_logical	l_stin_time	drapeau pour dire que la valeur de l'état initial est définie par <code>INST_ETAT_INIT</code> dans <code>ETAT_INIT</code>
real(kind=8)	init_time	valeur de l'instant initial
integer	init_num	valeur de du numéro d'ordre initial
character(len=19)	list_load_resu	nom de l'objet <code>JVEUX</code> stockant la liste des chargements dans la SD résultat
aster_logical	l_init_stat	drapeau pour dire que l'état initial est stationnaire (pour la thermique)
aster_logical	l_init_vale	drapeau pour dire que l'état initial est une valeur (pour la

		thermique)
real(kind=8)	temp_init	température donnée par l'état initial quand c'est une valeur (pour la thermique)
type(NL_DS_TableIO)	table_io	Structure de données pour la table_container PARA_CALC

Cet objet rassemble donc à la fois des informations issus de l'utilisateur, mais aussi la définition des champs d'entrée-sortie et de leur comportement, défini par le développeur. Un champ a plusieurs états :

- Il peut définir un état initial ;
- Il peut être observé ;
- Il peut être archivé.

Ces trois états ne sont pas forcément indépendants. Par exemple, un champ qui se lit dans l'état initial est forcément archivable mais l'inverse n'est pas vrai (il existe des champs devant être archivés mais n'étant pas dans l'état initial comme `COMPORTEMENT`, `CONT_NOEU`, `CRIT_STAB`, etc.).

Un champ est utilisable (état initial, observation et archivage) seulement si certaines fonctionnalités sont actives (par exemple, le champ de vitesse en dynamique ou les statuts de contact pour le contact)

Si un champ est défini dans l'état initial, il pourrait être lu dans `ETAT_INIT` (soit de manière individuelle, par champ, soit dans la SD résultat donné dans `ETAT_INIT`), ou créé (égal à zéro) par la commande (dans ce cas, il faudra définir le nom de ce champ nul et le créer).

On a donc une liste de champs (variable `field`) définis par le type dérivé `NL_DS_Field`. Cet objet a la structure suivante :

Type	Nom	Description
character(len=16)	type	identificateur unique du champ. C'est aussi le nom symbolique défini dans la SD résultat
character(len=8)	gran_name	Type de grandeur (<code>DEPL_R</code> , <code>SIEF_R</code> , etc ...)
character(len=8)	field_read	nom du champ donné par l'utilisateur dans <code>ETAT_INIT</code>
character(len=4)	disc_type	type de discrétisation (<code>NOEU</code> , <code>ELGA</code> , <code>ELNO</code> , ...) du champ donné par l'utilisateur dans <code>ETAT_INIT</code>
character(len=8)	init_keyw	mot-clef correspondant à ce champ pour <code>ETAT_INIT</code>
character(len=16)	obsv_keyw	mot-clef correspondant à ce champ pour <code>OBSERVATION</code> (et <code>SUIVI_DDL</code>)
aster_logical	l_read_init	drapeau pour dire que ce champ doit être défini en état initial
aster_logical	l_store	drapeau pour dire que ce champ doit être archivé dans la SD résultat
aster_logical	l_obsv	drapeau pour dire que ce champ est « observable » (présent dans <code>OBSERVATION</code> et <code>SUIVI_DDL</code>)
character(len=24)	algo_name	nom de l'objet JEVEUX correspondant à ce champ dans l'algorithme
character(len=24)	init_name	nom de l'objet JEVEUX correspondant au champ initial nul dans l'algorithme
character(len=4)	init_type	dit comment ce champ a été initialisé (lu dans <code>ETAT_INIT</code> , champ par champ, dans la SD résultat, etc).

La gestion de la SD se fait en trois temps :

- Création de la SD dans la routine `CreateInOutDS`. Cette création comprend en particulier la création de tous les champs possibles. C'est dans cette routine que le développeur peut ajouter et définir le comportement (état initial, archivable, observable, etc..) d'un nouveau champ ;
- Lecture des informations données par l'utilisateur (mot-clef `ETAT_INIT`). Routine `ReadInOut` dans `nmdata` ;
- Initialisation de la SD : routine `nmetcr` pour la mécanique et `ntetcr` pour la thermique. Ces routines vont activer les champs suivant les fonctionnalités présentes

Les routines utilitaires d'accès à la SD sont les suivantes :

- GetIOField => récupérer les informations d'un champ donné
- SetIOField => donner les informations d'un champ donné

Ces routines utilise le type du champ en entrée (variable `type` de la SD `NL_DS_Field`).

Contexte d'utilisation : le développeur veut ajouter un champ, le rendre utilisable dans `OBSERVATION`, `ARCHIVAGE`, `SUIVI_DDL` ou `ETAT_INIT`.

1. Il commence par éditer la routine `CreateInOutDS_M` ou `CreateInOutDS_M` selon que l'on soit en mécanique ou en thermique. Il suffit de compléter exhaustivement les informations au début de cette routine. Si l'on ajoute un nouveau champ, il conviendra de modifier le nombre total (paramètre `nb_field_maxi`);
2. S'il doit ajouter un champ dans la SD résultat, il est nécessaire par ailleurs de modifier `rscrsd` ;
3. Le champ est désormais possiblement activable. Mais on doit l'activer (par exemple sous condition d'une fonctionnalité active) dans la routine `nmetac` ;
4. Enfin, s'il est nécessaire d'avoir un état initial vierge, il convient de modifier la routine `nmetc0` pour créer ce champ.

2.4.2.8 Gestion du contact – `NL_DS_Contact`

Le contact est géré par deux types de structures de données :

- Pour la *définition* du contact et des liaisons unilatérales¹ (opérateur `DEFI_CONTACT`), il faut se référer à la documentation [D4.06.14] de la `sd_contact`. Cette SD n'est pas concernée dans ce document ;
- Pour la *résolution* du contact et des liaisons unilatérales, on introduit un type dérivé appelé `NL_DS_Contact`.

L'objet principal `ds_contact` (de type `NL_DS_Contact`) contient les paramètres utiles à la résolution du problème de contact/frottement. Un seul objet `ds_contact` de type `NL_DS_Contact` gère l'ensemble du contact/frottement. Il a la structure suivante :

Type	Nom	Description
<code>aster_logical</code>	<code>l_contact</code>	drapeau pour dire que le contact ou le suintement est activé dans l'opérateur
<code>aster_logical</code>	<code>l_meca_cont</code>	drapeau pour dire que le contact mécanique est activé dans l'opérateur
<code>aster_logical</code>	<code>l_meca_unil</code>	drapeau pour dire que le suintement est activé dans l'opérateur
<code>character(len=8)</code>	<code>sdcont</code>	nom du concept <code>DEFI_CONTACT</code> renseigné dans <code>STAT_NON_LINE/CONTACT</code>
<code>character(len=24)</code>	<code>sdcont_defi</code>	nom de l'objet JEVEUX pour la définition du contact
<code>character(len=24)</code>	<code>sdcont_solv</code>	préfixe des objets JEVEUX pour la résolution du contact
<code>character(len=24)</code>	<code>sdunil_defi</code>	nom de l'objet JEVEUX pour la définition de <code>LIAISON_UNIL</code>
<code>character(len=24)</code>	<code>sdunil_solv</code>	préfixe des objets JEVEUX pour la résolution de <code>LIAISON_UNIL</code>
<code>aster_logical</code>	<code>l_form_cont</code>	drapeau pour dire qu'on est en <code>FORMULATION='CONTINUE'</code>
<code>aster_logical</code>	<code>l_form_disc</code>	drapeau pour dire qu'on est en <code>FORMULATION='DISCRET'</code>
<code>aster_logical</code>	<code>l_form_xfem</code>	drapeau pour dire qu'on est en <code>FORMULATION='XFEM'</code>
<code>aster_logical</code>	<code>l_form_lac</code>	drapeau pour dire qu'on est en <code>FORMULATION='LAC'</code>
<code>aster_logical</code>	<code>l_elem_slav</code>	drapeau pour dire la présence d'éléments esclaves de contact (<code>CONTINUE/LAC/XFEM</code>)

1 Les conditions unilatérales (`LIAISON_UNILATER`) gèrent les conditions de succion et de suintement pour les problèmes en THM

character(len=8)	ligrel_elem_slav	nom du <LIGREL> pour les éléments esclaves (créés dans DEFI_CONTACT)
aster_logical	l_elem_cont	drapeau pour dire la présence d'éléments de contact (CONTINUE/LAC/XFEM)
character(len=19)	ligrel_elem_cont	nom du <LIGREL> pour les éléments de contact (créés dans STAT_NON_LINE)
aster_logical	l_iden_rela	drapeau pour dire la présence de relations d'identité à traiter par modification de la matrice (XFEM avec ELIM_ARETE ou méthode LAC)
character(len=24)	iden_rela	nom de la SD définissant des relations d'identité
aster_logical	l_dof_rela	drapeau pour dire la présence de relations linéaires entre DDL (QUAD8 pour les méthodes discrètes ou XFEM, créées dans DEFI_CONTACT)
character(len=8)	ligrel_dof_rela	nom de la SD définissant des relations linéaires entre DDL
character(len=19)	field_input	nom du CHAM_ELEM en entrée des TE pour les méthodes XFEM/CONTINUE/LAC
character(len=14)	nume_dof_frot	nom du NUME_DDL pour la matrice de frottement discret
character(len=19)	field_cont_node	nom du champ aux noeuds CONT_NOEU pour le post-traitement
character(len=19)	fields_cont_node	nom du champ aux noeuds simple CONT_NOEU pour le post-traitement
character(len=19)	field_cont_perc	nom du champ aux noeuds des percussions/impacts pour le post-traitement
integer	nb_loop	nombre effectif de boucles de traitement du contact à gérer
integer	nb_loop_maxi	nombre maximum de boucles de traitement du contact à gérer
NL_DS_Loop	loop (nb_loop_maxi)	pointeurs vers les boucles de traitement du contact à gérer
aster_logical	l_renumber	drapeau pour renumérotation de la matrice
real(kind=8)	geom_maxi	valeur pour contrôler la boucle sur la géométrie
aster_logical	l_getoff	Drapeau pour l'indicateur de décollement (thêta-schéma)
aster_logical	l_first_geom	Drapeau pour dire que c'est la première itération de boucle géométrique
aster_logical	l_pair	Drapeau pour dire qu'il faut apparier
aster_logical	l_wait_conv	Drapeau pour dire qu'il faut attendre le point fixe des sous-itérations de contact (frottement) discret

Pour gérer les boucles de point fixe du contact (géométrie, frottement et statuts de contact), on a créé le type dérivé NL_DS_Loop dont voici la structure :

Type	Nom	Description
character(len=4)	type	Chaîne identifiant le type de la boucle (Geom, Fric et Cont)
integer	counter	itérateur pour le compteur de boucle
aster_logical	conv	drapeau pour dire que cette boucle est convergée
aster_logical	error	drapeau pour dire qu'il y a eu une erreur lors de l'évaluation de la boucle

real(kind=8)	vale_calc	valeur de convergence de la boucle
character(len=16)	locus_calc	endroit de convergence de la boucle

La gestion de la SD se fait en trois temps :

- Création de la SD dans la routine `CreateContactDS` ;
- Lecture des informations données par l'utilisateur (mot-clef `CONTACT`). Routine `ReadContact` dans `nmdata` ;
- Initialisations de la SD :
 - Routine `InitContact` dans `nminit`. Cette phase comprend en particulier la lecture du type de contact pour les `LIGREL` à gérer (voir routine `nmdoct`) ;
 - Routine `cfmxsd` dans `nminit`. Création des objets nécessaires pour la résolution du contact (essentiellement discret). Ce sont des objets dynamiques (dépendant du nombre de noeuds en contact) et il est donc nécessaire d'en faire des objets `JEVEUX` ;
 - Routine `cucrsd` dans `nminit`. Création des objets nécessaires pour la résolution des liaisons unilatérales. Ce sont des objets dynamiques (dépendant du nombre de noeuds) et il est donc nécessaire d'en faire des objets `JEVEUX` ;
 - Routine `nmdoct` : gestion des `LIGREL` tardifs

L'utilisation de la SD est directe par appel à ses sous-objets (usage de %) ou par des routines utilitaires déjà existantes (comme les routines `cfdis*` et `mminf*`), déjà utilisées pour l'accès à la `sdcont` provenant de `DEFI_CONTACT`.

2.4.2.9 Gestion de la convergence – NL_DS_Conv

Il s'agit ici de gérer les informations et l'algorithme concernant la gestion de la convergence, ce qui comprend :

- la gestion et le calcul des résidus d'équilibre ;
- la gestion des options venant du mot-clef facteur `CONVERGENCE`.

On crée les types dérivés `NL_DS_Resi`, `NL_DS_ResiRefe` et `NL_DS_Conv`. Un seul objet `ds_conv` de type `NL_DS_Conv` gère l'ensemble de la convergence. Il contient différentes informations :

- les informations récupérées dans le mot-clef `CONVERGENCE` ;
- un emplacement pour stocker la valeur ayant déclenché la bascule `RESI_GLOB_RELA` vers `RESI_GLOB_MAXI` ;
- deux variables pour gérer la recherche linéaire.

Il a la structure suivante :

Type	Nom	Description
integer	<code>nb_resi</code>	nombre de résidus
integer	<code>nb_resi_maxi</code>	nombre de résidus au maximum
type(<code>NL_DS_Resi</code>)	<code>list_resi(max)</code>	liste des résidus
aster_logical	<code>l_resi_test(max)</code>	drapeau pour dire si on doit utiliser ce résidu pour la convergence
integer	<code>nb_refe</code>	nombre de composantes de type <code>RESI_REFE_RELA</code>
integer	<code>nb_refe_maxi</code>	nombre maximum de composantes de type <code>RESI_REFE_RELA</code>
type(<code>NL_DS_RefeResi</code>)	<code>list_refe(max2)</code>	liste des composantes
aster_logical	<code>l_refe_test(max2)</code>	drapeau pour dire si la composante est active ou pas
integer	<code>iter_glob_maxi</code>	paramètre <code>ITER_GLOB_MAXI</code>
integer	<code>iter_glob_elas</code>	paramètre <code>ITER_GLOB_ELAS</code>
aster_logical	<code>l_stop</code>	paramètre <code>ARRET="NON"</code>
aster_logical	<code>l_iter_elas</code>	drapeau pour dire que l'utilisateur a renseigné

		explicitement ITER_GLOB_ELAS
real(kind=8)	swap_trig	valeur ayant déclenché la bascule RESI_GLOB_RELA vers RESI_GLOB_MAXI
real(kind=8)	line_sear_coef	coefficient de la recherche linéaire
integer	line_sear_iter	nombre d'itérations de recherche linéaire

Cet objet contient la liste des résidus possibles (actuellement, il y a six résidus entrant dans l'évaluation de la convergence). Chaque résidu est défini lui-même par le type dérivé NL_DS_Resi qui a la structure suivante :

Type	Nom	Description
character(len=16)	type	identifiant du type de résidu
character(len=16)	col_name	identifiant de la colonne du tableau de convergence stockant la valeur du résidu
character(len=16)	col_name_locus	identifiant de la colonne du tableau de convergence stockant l'emplacement de la norme maxi du résidu (quand INFO_RESIDU='OUI')
character(len=16)	event_type	identifiant de l'événement de divergence du résidu
real(kind=8)	vale_calc	valeur de la norme maxi du résidu
character(len=16)	locus_calc	emplacement de la norme maxi du résidu
real(kind=8)	user_para	valeur du critère donnée par l'utilisateur
aster_logical	l_conv	drapeau pour indiquer que vale_calc < user_para

Enfin, l'objet ds_conv contient également la liste des objets définissant le résidu de type RESI_REFE_RELA. Actuellement, onze types de composantes existent. Un objet de type NL_DS_ResiRefe a la structure suivante :

Type	Nom	Description
character(len=16)	type	type de la composante
real(kind=8)	user_para	valeur de la composante donnée par l'utilisateur
character(len=8)	cmp_name	nom de la composante dans la grandeur pour le TE

Cette SD est principalement utilisée pour l'évaluation des résidus. La routine qui évalue leur convergence est nmcore. Désormais, elle est autonome dans le sens où l'ajout d'un nouveau type de résidu ne nécessite pas d'impact spécifique pour cette partie (par contre, il faudra réaliser le calcul effectif de ce résidu, qui est actuellement, principalement réalisé dans nmresi).

Pour faciliter la maintenance et la lisibilité, on a également extrait la partie qui s'occupe des « bascules » :

- Passage de RESI_GLOB_RELA à RESI_GLOB_MAXI quand le chargement extérieur est nul ;
- Passage de RESI_COMP_RELA à RESI_GLOB_RELA au premier instant

Remarque :

// est possible de faire une double bascule RESI_COMP_RELA => RESI_GLOB_RELA => RESI_GLOB_MAXI .

La gestion de la SD se fait en trois temps :

1. Création de la SD dans la routine CreateConvDS dans nmini0. Cette création comprend en particulier la création de tous les résidus disponibles. Leur utilisation effective dans l'évaluation de la convergence dépendra de l'état du drapeau de leur activation ;
2. Lecture des informations données par l'utilisateur (mot-clef AFFICHAGE). Routine nmdocn dans nmdata . Les informations ont stockées dans ds_conv ;

3. Initialisation de la SD dans `InitConv` . Cette routine gère en particulier les alarmes (`ARRET='NON'` ou résidu trop lâche) et active les résidus spécifiques au contact (car ils sont lus dans `nmdoct` et non dans `nmdocn`).

Pour manipuler la SD, on a les paires de routines `SetResi/GetResi` et `SetResiRefe`.

2.4.2.10 Gestion des paramètres de l'algorithme – NL_DS_AlgoPara

Cet objet stocke deux types d'informations :

- les données issues des options du mot-clef facteur `NEWTON` (`REAC_ITER`, types de matrices, options pour la recherche linéaire, etc.) ;
- les résultats intermédiaires de l'algorithme : résultats de la recherche linéaire et valeurs des résidus de convergence calculé.

On crée les types dérivés `NL_DS_LineSearch` et `NL_DS_AlgoPara` . Un objet de type `NL_DS_AlgoPara` gère les paramètres de l'algorithme, il a la structure suivante :

Type	Nom	Description
<code>character(len=16)</code>	<code>method</code>	mot-clef METHODE (Newton, Newton-Krylov, IMPLEX)
<code>character(len=16)</code>	<code>matrix_pred</code>	type de matrice en prédiction
<code>character(len=16)</code>	<code>matrix_corr</code>	type de matrice en correction
<code>integer</code>	<code>reac_incr</code>	valeur de <code>REAC_INCR</code>
<code>integer</code>	<code>reac_iter</code>	valeur de <code>REAC_ITER</code>
<code>real(kind=8)</code>	<code>pas_mini_elas</code>	valeur de <code>PAS_MINI_ELAS</code>
<code>integer</code>	<code>reac_iter_elas</code>	valeur de <code>REAC_ITER_ELAS</code>
<code>aster_logical</code>	<code>l_line_search</code>	drapeau pour dire que la recherche linéaire est activé
<code>type(NL_DS_LineSearch)</code>	<code>line_search</code>	objet pour décrire les paramètres de la recherche linéaire
<code>character(len=8)</code>	<code>result_prev_disp</code>	SD résultat pour <code>DEPL_CALCULE/EXTRAPOLE</code>
<code>aster_logical</code>	<code>l_matr_rigi_syme</code>	Drapeau pour symétriser la matrice de rigidité (<code>MATR_RIGI_SYME</code>)

L'objet `line_search` est un type dérivé de type `NL_DS_LineSearch` dont voici la structure :

Type	Nom	Description
<code>character(len=16)</code>	<code>method</code>	type de recherche linéaire
<code>real(kind=8)</code>	<code>resi_rela</code>	tolérance pour la recherche linéaire
<code>integer</code>	<code>iter_maxi</code>	nombre maxi d'itérations de recherche linéaire
<code>real(kind=8)</code>	<code>rho_mini</code>	valeur minimale du coef. de recherche linéaire
<code>real(kind=8)</code>	<code>rho_maxi</code>	valeur maximale du coef. de recherche linéaire
<code>real(kind=8)</code>	<code>rho_excl</code>	valeur à exclure pour le coef. de recherche linéaire

On définit une seule variable `ds_algo para` de type `NL_DS_AlgoPara` qui sera transmise comme argument dans les routines qui en ont besoin. La gestion de la SD se fait en trois temps :

1. Création de la SD dans la routine `CreateAlgoParaDS` dans `nmini0` ;
2. Lecture des informations données par l'utilisateur (mot-clef `NEWTON`). Routine `nmdomt` ;
3. Lecture des informations données par l'utilisateur (mot-clef `RECH_LINEAIRE`). Routine `nmdomt_ls` ;
4. Initialisation de la SD par la routine `InitParaAlgo`.

2.4.2.11 Gestion de l'extraction de champs – SDEXTR

Le SUIVI_DDL partage avec l'OBSERVATION (voir §2.4.2.13) une SD commune appelé SDEXTR, routine d'extraction des valeurs des champs. On va donc commencer par décrire cette dernière SD. Les trois premiers objets sont généraux et leur longueur est proportionnelle au nombre d'occurrences du mot-clef SUIVI_DDL ou OBSERVATION.

SDEXTR – Objets	
Nom (attention aux blancs!)	Description
SDEXTR (1:14) // ' .INFO '	Informations diverses sur les données d'extraction
SDEXTR (1:14) // ' .EXTR '	Type d'extraction <ul style="list-style-type: none">• Sur le champ (NOEU et ELGA)• Sur la maille (si ELGA)• Sur les composantes ou formule entre les composantes
SDEXTR (1:14) // ' .ACTI '	Extraction active ou pas

On ne peut avoir plus de 99 occurrences des mots-clefs car on construit le nom de certains objets à partir de ce numéro d'occurrence OCC. Ces objets sont les suivants :

SDEXTR – Objets	
Nom (attention aux blancs!)	Description
SDEXTR (1:14) //OCC// ' .NOEU '	Nœuds concernés par l'extraction
SDEXTR (1:14) //OCC// ' .MAIL '	Mailles concernées par l'extraction
SDEXTR (1:14) //OCC// ' .POIN '	Points d'intégration concernés par l'extraction
SDEXTR (1:14) //OCC// ' .SSPI '	Sous-points d'intégration concernés par l'extraction
SDEXTR (1:14) //OCC// ' .CMP '	Composantes concernées par l'extraction

2.4.2.12 Gestion du SUIVI_DDL – SDSUIV

Cette SD sert à gérer la fonctionnalité SUIVI_DDL. En plus des références à l'extraction des champs (SDEXTR, §2.4.2.11), nous avons un objet spécifique pour le SUIVI_DDL.

SDSUIV – Objets	
Nom (attention aux blancs!)	Description
SD SUIV (1:14) // ' .TITR '	Titres des colonnes

2.4.2.13 Gestion de l'OBSERVATION – SDOBSE

Cette SD sert à gérer la fonctionnalité OBSERVATION. L'OBSERVATION partage avec le SUIVI_DDL (voir §2.4.2.12) une SD commune appelé SDEXTR, déjà décrite dans (§2.4.2.11).

Ensuite, nous avons des objets spécifiques pour l'OBSERVATION. Un qui va donner le nom de la table et un qui stocke les informations relatives à la fréquence d'observation (objet utilitaire SDSELI, voir §2.4.2.19), indicé par le numéro d'occurrence OCC du mot-clef OBSERVATION.

SDOBSE – Objets	
Nom (attention aux blancs!)	Description
SDOBSE (1:14) // ' .TABL '	Nom de la table
SDOBSE (1:14) //OCC// ' .LI '	Accès à la SDSELI, liste des instants à observer

2.4.2.14 Gestion des critères de qualité – SDCRIQ

Cette SD sert à évaluer les critères de qualité (mot-clef CRIT_QUALITE). Elle est très simple et ne comporte qu'un objet.

SDCRIQ – Objets	
Nom	Description
SDSUIV (1:1 9) //' .ERRT'	Valeur des erreurs THM espace et temps, coefficient THETA

2.4.2.15 Gestion du pilotage – SDPILO

Cette SD sert au pilotage (méthode de continuation). La plupart de ces objets sont regroupés dans une logique de type (réels avec réels, chaînes avec chaînes), plutôt que dans une logique de fonctionnalité.

SDPILO – Objets	
Nom	Description
SDPILO (1:19) //' .PLTK'	Contient les paramètres du pilotage (de type chaîne) ou les noms d'objets nécessaires au pilotage
SDPILO (1:19) //' .PLIR'	Contient les paramètres du pilotage (de type réel)
SDPILO (1:14) //' .PLCR'	Liste des coefficients pour le pilotage
SDPILO (1:14) //' .PLSL'	Liste des DDL de type DX , DY et DZ pour le pilotage
SDPILO (1:14) //' .PLCI'	Liste des coefficients pour le pilotage – Cas XFEM

Il n'y a pas de routines d'accès de haut-niveau, La SD est créée dans la routine `nmdopi`. Il faut attaquer directement les SD.

2.4.2.16 Gestion des numérotations – SDNUME

Cette SD vient en complément des deux SD `NUMDDL` et `NUMFIX` pour gérer la numérotation des équations. `NUMDDL` est la numérotation des équations, qui peut être variable au cours du transitoire, quand on utilise des fonctionnalités comme le contact `CONTINUE` ou le contact `XFEM`. `NUMFIX` est la numérotation fixe, elle est utile dans le cas des macro-éléments, pour pouvoir combiner les matrices. La `SDNUME` contient trois autres objets :

SDNUME – Objets	
Nom	Description
SDNUME (1:19) //' .NDRO'	Repérage des DDL pour les grandes rotations
SDNUME (1:19) //' .NUCO'	Repérage des DDL pour les Lagrangiens de contact et frottement
SDNUME (1:19) //' .ENDO'	Repérage des DDL pour l'endommagement aux nœuds

Ces trois objets ont la même logique : ils sont dimensionnés au nombre total de degrés de liberté de la structure, avec la même numérotation que les matrices et les `CHAM_NO` utilisés dans `op0070`. Une valeur particulière (en général 1), sert à repérer a priori des DDL spécifiques : ceux correspondant aux grandes rotations, ceux correspondant aux lagrangiens de contact/frottement et ceux correspondant à l'endommagement. On les utilise alors dans certains cas (par exemple, pour la mise à jour spécifiques des champs dans le cas des grandes rotations ou pour filtrer les composantes dans l'évaluation des résidus). Il n'y a pas de routines d'accès spécifiques.

2.4.2.17 Gestion de la dynamique – SDDYNA

Cette SD contient toutes les informations nécessaires au calcul en dynamique.

SDDYNA – Objets	
Nom	Description
SDDYNA(1:15)//'.PARA_SCH'	Paramètres des schémas en temps
SDDYNA(1:15)//'.INFO_SD'	Paramètres de la dynamique
SDDYNA(1:15)//'.NOM_SD'	Nom des SD pour la dynamique (modes statiques, vecteurs, ...)
SDDYNA(1:15)//'.TYPE_FOR'	Type de formulation (déplacement, vitesse ou accélération)
SDDYNA(1:15)//'.COEF_SCH'	Coefficients à utiliser dans le calcul
SDDYNA(1:15)//'.TYPE_CHA'	Informations relatives au chargement ONDE_PLANE
SDDYNA(1:15)//'.NBRE_CHA'	Informations relatives à certains chargements spécifiques à la dynamique
SDDYNA(1:15)//'.VEEL_OLD'	Vecteurs élémentaires du pas précédent pour les schémas multi-pas
SDDYNA(1:15)//'.VEAS_OLD'	Vecteurs assemblés du pas précédent pour les schémas multi-pas
SDDYNA(1:15)//'.VECENT'	Quantités en entraînements (déplacements, vitesses et accélération)
SDDYNA(1:15)//'.VECABS'	Quantités absolues (déplacements, vitesses et accélération)

L'accès à ces informations se fait via quatre routines dédiées chacune à un type, avec une chaîne posant la question (sur le modèle de la routine `dismo1`) :

Opération sur la gestion de la dynamique – SDDYNA	Routine
Lecture information de type <booléen>	ndynlo
Lecture information de type <réel>	ndynre
Lecture information de type <entier>	ndynin
Lecture information de type <chaîne>	ndynkk

À noter que ces questions vont entraîner une erreur fatale si on n'est pas en dynamique, sauf dans le cas de la question `NDYNLO(SDDYNA, 'DYNAMIQUE')` qui répondra `.false.` si on est en statique (c'est-à-dire qui sait détecter le cas où `SDDYNA` n'existe pas). En dehors de ces quatre routines, l'accès à la `SDDYNA` se fait directement dans deux routines :

Opération sur la gestion de la dynamique – SDDYNA	Routine
Lecture informations dans le fichier de commande	ndlect
Enregistrement valeur des différents coefficients	ndnpas

On revient sur les coefficients nécessaires pour le calcul en dynamique car ils sont très nombreux. Ces coefficients sont construits à partir de trois informations :

- Le type de schéma ;
- Les paramètres du schéma (coefficients `ALPHA`, `BETA`, `KAPPA`, etc.) ;
- L'incrément de temps ;

Le fait de dépendre du pas de temps implique que les coefficients sont ré-évalués à chaque pas (dans la routine `ndnpas`).

Coefficient	Description
COEF_MATR_RIGI	Coefficient devant la matrice de rigidité
COEF_MATR_AMOR	Coefficient devant la matrice d'amortissement
COEF_MATR_MASS	Coefficient devant la matrice de masse
COEF_DEPL_DEPL	Prédicteur en déplacement : coefficient devant le déplacement du pas précédent

COEF_DEPL_VITE	Prédicteur en déplacement : coefficient devant la vitesse du pas précédent
COEF_DEPL_ACCE	Prédicteur en déplacement : coefficient devant l'accélération du pas précédent
COEF_VITE_DEPL	Prédicteur en vitesse : coefficient devant le déplacement du pas précédent
COEF_VITE_VITE	Prédicteur en vitesse : coefficient devant la vitesse du pas précédent
COEF_VITE_ACCE	Prédicteur en vitesse : coefficient devant l'accélération du pas précédent
COEF_VITE_DEPL	Prédicteur en accélération : coefficient devant le déplacement du pas précédent
COEF_VITE_VITE	Prédicteur en accélération : coefficient devant la vitesse du pas précédent
COEF_VITE_ACCE	Prédicteur en accélération : coefficient devant l'accélération du pas précédent
COEF_DEPL	Coefficient devant l'incrément de déplacement
COEF_VITE	Coefficient devant l'incrément de vitesse
COEF_ACCE	Coefficient devant l'incrément d'accélération
COEF_MPAS_FEXT_PREC	Coefficient devant les forces extérieures du pas précédent (schéma multipas)
COEF_MPAS_FINT_PREC	Coefficient devant les forces intérieures du pas précédent (schéma multipas)
COEF_MPAS_FEXT_COUR	Coefficient devant les forces extérieures du pas courant (schéma multipas)
COEF_MPAS_EQUI_COUR	Coefficient devant les autres termes du second membre (inertie, amortissement)
COEF_FDYN_MASSE	Coefficient devant les forces de rappel dynamique (inertie)
COEF_FDYN_AMORT	Coefficient devant les forces de rappel dynamique (amortissement)
COEF_FDYN_RIGID	Coefficient devant les forces de rappel ?????? (sert à Krenk ???)
COEF_FORC_INER	Coefficient devant les forces d'inertie à mettre au dénominateur dans le résidu d'équilibre
INST_PREC	Pas de temps précédent (uniquement utile pour la poursuite avec, à la fois, le schéma HHT complet et les lois de comportement qui ont besoin de ce paramètre)

2.4.2.18 Gestion de la discrétisation temporelle – SDDISC

La structure de données SDDISC contient toutes les informations provenant de l'opérateur DEFI_LIST_INST (création du concept SDLIST) et des informations relatives à la gestion de la discrétisation temporelle dans op0070. Dans un premier temps, les informations provenant de l'opérateur DEFI_LIST_INST (voir [D4.06.17]) sont recopiées localement dans la SDDISC.

SDDISC – Objets	
Nom	Description
SDDISC(1:19) //' .LINE'	Informations sur la liste d'instants (voir contenu dans [D4.06.17]) Recopie de l'objet SDLIST(1:8) //' .LIST.INFOR'
SDDISC(1:19) //' .DITR'	Liste des instants – Cette liste est dynamique (en cas de découpe ou d'accélération du pas de temps)
SDDISC(1:19) //' .DINI'	Indicateur du niveau de sous-découpage pour chaque pas de temps. Initialement, le niveau de découpe vaut 1. Il ne peut y avoir plus d'un niveau de découpe entre deux pas successifs (vérification dans la routine nmdcin) – Cette liste est dynamique (en cas de découpe ou d'accélération du pas de temps)
SDDISC(1:19) //' .ITER'	Nombre d'itérations de Newton qu'il a fallu pour chaque pas de temps – Cette liste est dynamique (en cas de découpe ou d'accélération du pas de temps)
SDDISC(1:19) //' .EPIL'	Indicateur du choix de la solution de pilotage (action AUTRE_PILOTAGE)

SDDISC(1:19) //' .LIPO '	Liste des instants de calcul obligatoires. Cet objet sert dans le cas de l'adaptation automatique du pas de temps, il indique les instants qui seront calculés quoiqu'il arrive (même en cas d'agrandissement du pas de temps). On parle aussi d'instants « jalons ». Sa longueur est celle de la liste d'instants initiale donnée par l'utilisateur dans DEFI_LIST_INST. Il s'agit donc d'une liste non-dynamique .
SDDISC(1:19) //' .REPC '	Indicateur de gestion de la réactualisation du préconditionnement (action REAC_PRECOND)
SDDISC(1:19) //' .EEVR '	Recopie de l'objet SDLIST(1:8) //' .ECHE.EVENR ' Voir contenu dans [D4.06.17]
SDDISC(1:19) //' .EEVK '	Recopie de l'objet SDLIST(1:8) //' .ECHE.EVENK ' Voir contenu dans [D4.06.17]
SDDISC(1:19) //' .ESUR '	Recopie de l'objet SDLIST(1:8) //' .ECHE.SUBDR ' Voir contenu dans [D4.06.17]
SDDISC(1:19) //' .AEVR '	Recopie de l'objet SDLIST(1:8) //' .ADAP.EVENR ' Voir contenu dans [D4.06.17]
SDDISC(1:19) //' .AEVK '	Recopie de l'objet SDLIST(1:8) //' .ADAP.EVENK ' Voir contenu dans [D4.06.17]
SDDISC(1:19) //' .ATPR '	Recopie de l'objet SDLIST(1:8) //' .ADAP.TPLUR ' Voir contenu dans [D4.06.17]
SDDISC(1:19) //' .ATPK '	Recopie de l'objet SDLIST(1:8) //' .ADAP.TPLUK ' Voir contenu dans [D4.06.17]
SDDISC(1:19) //' .AEXT '	Objet pour le prolongement de la découpe (traitement du cas de la COLLISION)
SDDISC(1:19) //' .IFCV '	Objet stockant l'état de convergence pour l'adaptation V(1) – Valeur du MAX(ITER_GLOB_MAXI, ITER_GLOB_ELAS) V(2) – Valeur du MIN(ITER_GLOB_MAXI, ITER_GLOB_ELAS) V(3) – Nombre maximum d'itérations possibles (y compris les itérations supplémentaires possibles par ITER_SUPPL) V(4) – Valeur de 'PAS_MINI_ELAS ' V(5) – Valeur de 'RESI_GLOB_RELA ' V(6) – Valeur de 'RESI_GLOB_MAXI ' V(7) – Type de résidu demandé par l'utilisateur : =1 pour RESI_GLOB_RELA =2 pour RESI_GLOB_MAXI =3 pour RESI_GLOB_RELA et RESI_GLOB_MAXI V(8) – Valeur de 'INIT_NEWTON_KRYLOV ' V(9) – Valeur de 'ITER_NEWTON_KRYLOV ' V(10) – Indique qu'on autorise des itérations en plus
SDDISC(1:19) //' .IFRE '	Objet stockant la valeur des résidus à chaque itération de Newton V(3*(ITER-1)+0) – Valeur de RESI_GLOB_RELA V(3*(ITER-1)+1) – Valeur de RESI_GLOB_MAXI V(3*(ITER-1)+2) – Valeur du chargement

Pour manipuler la SDDISC, on utilise une série d'utilitaires.

Opération sur la gestion de la discrétisation temporelle – SDDISC	Routine
Routine utilitaire générale qui permet d'accéder au contenu des objets .LINF, .EEVR, .EEVK, .ESUR, .AEVR, .AEVK, .ATPR, .ATPK, .REPC et .EPIL. L'accès peut se faire en lecture ou en écriture .	utdidt

Retourne .RUE. si on sort de la liste d'instant (fin du transitoire)	didern
Valeur de l'instant selon numéro de l'instant	diinst

2.4.2.19 Gestion de la sélection d'un instant – SDSELI

La structure de données SDSELI permet de sélectionner un instant suivant une fréquence, une liste de valeurs, en prenant en compte une tolérance et un type de critère (absolu ou relatif).

SDSELI – Objets	
Nom	Description
SDSELI(1:19)//'.INFL'	Informations générales sur la sélection (paramètres de sélection)
SDSELI(1:19)//'.LIST'	Liste des instants donnés par l'utilisateur

Pour opérer sur cette SD, on utilise principalement deux routines :

- une qui lit les paramètres de l'utilisateur (nmcrpx) ;
- recherche si l'instant donné est sélectionné (nmcrpo) ;

Opération sur la gestion de la sélection d'un instant – SDSELI	Routine
Lecture de la liste des instants à sélectionner	nmcrpa
Lecture de la précision et du type de critère (relatif ou absolu)	nmcrpp
Lecture de toutes les informations (appel à nmcrpa et nmcrpp)	nmcrpx
Recherche d'un réel dans une liste (avec précision et critère)	utacli
Routine principale de recherche de l'instant	nmcrpo
Recherche de l'indice dans la SD résultat juste avant un instant donné	nmttch

Cette SD est utilisée pour la gestion de la discrétisation temporelle, de l'état initial, de l'archivage et de l'observation.

2.4.2.20 Gestion des critères de convergence – SDCRIT

Cette SD gère des informations relatives aux critères de convergence, elle sert en particulier à stocker les résidus dans la SD RESULTAT.

SD CRIT – Objets	
Nom	Description
SDCRIT(1:19)//'.CRTR'	Valeurs des informations (résidus, nombre d'itérations, etc.)
SDCRIT(1:19)//'.CRDE'	Nom des informations pour le stockage dans la SD RESULTAT (résidus, nombre d'itérations, etc.)

Cette SD est aussi utilisée pour la commande THER_NON_LINE (attention, les objets ne sont pas de la même dimension !). La sauvegarde des informations pour cette SD se fait dans la routine nmcore qui évalue la convergence à chaque itération de Newton.

Opération sur la gestion des critères de convergence – SDCRIT	Routine
Création de la SD	nmcrvc ntcrvc
Sauvegarde des informations dans la SDCRIT	nmcore op0186

Sauvegarde des informations dans la SD RESULTAT	nmarc0 ntarc0
---	------------------

2.4.2.21 Gestion de la liste de sélection – NL_DS_SelectList

Cette structure de données permet de sélectionner un instant à partir d'une liste ou d'une fréquence.

Type	Nom	Description
integer	nb_value	Nombre de valeurs dans la liste des instants donnés
real(kind=8)	incr_mini	Incrément de temps minimum entre deux instants de la liste
real(kind=8), pointer	list_value	Liste des instants
real(kind=8)	precision	Valeur de la précision pour sélectionner un instant
aster_logical	l_abso	Vaut .true. Si la valeur est sélectionné en absolue
real(kind=8)	tolerance	Tolérance calculée si sélection en relatif
integer	freq_step	Fréquence de sélection des instants
aster_logical	l_by_freq	Vaut .true. Si on sélection par la fréquence

La routine `selectListRead` permet de lire les mots-clefs de l'utilisateur et remplit la structure de données. La routine `selectListGet` retourne `.true.` Si l'instant courant est bien à sélectionner par rapport aux paramètres (fréquence, liste d'instants avec précision, etc.). Enfin, la routine `selectListClean` désalloue la mémoire (nécessaire car on utilise un pointeur pour la liste des instants).

2.4.2.22 Gestion du calcul modale en cours de calcul non-linéaire – NL_DS_PostTimeStep, NL_DS_Spectral, NL_DS_Stability et NL_DS_SpectralResults

Ces structures de données servent à gérer les mots-clefs `MODE_VIBR` et `CRIT_STAB`.

Structure de données pour sauvegarder les paramètres de l'analyse modale : `NL_DS_Spectral`.

Type	Nom	Description
character(len=16)	option	Option de calcul
character(len=16)	type_matr_rigi	Type de matrice de rigidité
aster_logical	l_small	Vaut <code>.true.</code> si on calcule les plus petites valeurs propres
aster_logical	l_strip	Vaut <code>.true.</code> si on calcule les valeurs propres dans une bande
real(kind=8)	strip_bounds(2)	Bande de fréquence si <code>l_strip</code>
integer	nb_eigen	Nombre de valeurs propres si <code>l_small</code>
integer	coef_dim_espace	Paramètre pour le solveur modal
type(NL_DS_SelectList)	selector	Sélecteur des instants de calcul
character(len=16)	level	Niveau de calcul : par bande, plus petites valeurs ou mode calibration (uniquement nombre de valeurs propres)

Structure de données pour sauvegarder les paramètres de l'analyse de stabilité (`CRIT_STAB`): `NL_DS_Stability`.

Type	Nom	Description
------	-----	-------------

aster_logical	l_geom_matr	Vaut <code>.true.</code> pour prendre en compte la rigidité géométrique
aster_logical	l_modi_rigi	Vaut <code>.true.</code> pour prendre en compte la modification de la rigidité
integer	nb_dof_excl	Nombre de DDL exclus
character(len=8), pointer	list_dof_excl	Liste des DDL exclus
integer	nb_dof_stab	Nombre de DDL de stabilisation
character(len=8), pointer	list_dof_stab	Liste des DDL de stabilisation
character(len=16)	instab_sign	Valeur du signe de l'instabilité
real(kind=8)	instab_prec	Valeur absolue de l'instabilité

Structure de données pour sauvegarder les paramètres de l'analyse modale (MODE_VIBR et CRIT_STAB):
NL_DS_PostTimeStep.

Type	Nom	Description
aster_logical	l_crit_stab	Si CRIT_STAB est renseigné
aster_logical	l_mode_vibr	Si MODE_VIBR est renseigné
type(NL_DS_Spectral)	crit_stab	Paramètres généraux de CRIT_STAB
type(NL_DS_Spectral)	mode_vibr	Paramètres généraux de MODE_VIBR
type(NL_DS_Stability)	stab_para	Paramètres spécifiques de CRIT_STAB
type(NL_DS_TableIO)	table_io	Structure de données table_container ANALYSE_MODAL
aster_logical	l_hpp	Vaut <code>.true.</code> si HPP

2.4.2.23 Gestion des tables container – NL_DS_TableIO

Cette structure de données permet de gérer les `table_container` attachées à STAT_NON_LINE et DYNA_NON_LINE.

Type	Nom	Description
character(len=8)	result	Nom de la structure de données résultats
character(len=19)	table_name	Nom JEVEUX de la table_container
character(len=24)	table_type	Type de la table_container
integer	nb_para	Nombre total de paramètres dans la table_container (nombre de colonnes)
integer	nb_para_inte	Nombre de paramètres de type entier
integer	nb_para_real	Nombre de paramètres de type réel
integer	nb_para_cplx	Nombre de paramètres de type complexe
integer	nb_para_strg	Nombre de paramètres de type chaîne
character(len=24), pointer	list_para	Liste des noms des paramètres
character(len=8), pointer	type_para	Liste des types des paramètres

La routine `nonlinDSTableIOCreate` permet de créer la structure de données et la `table_container` dans la structure de données `evol_noli`.

La routine `nonlinDSTableIOSetPara` permet de donner la liste des paramètres dans la table. On peut les donner de deux manières :

- soit à partir de la structure de données `NL_DS_Table` (voir § 2.4.2.2) ;
- soit à partir d'une liste exhaustive de ces paramètres.

La routine `nonlinDSTableIOClean` désalloue les objets (nécessaire à cause de l'usage de pointeurs).

2.4.2.24 Gestion du comportement CARCRI et COMPOR

La structure de données `CARCRI` est une `sd_carte` qui contient des réels. Elle stocke actuellement 22 paramètres dont voici la liste.

Indice	Contenu
1	Mot-clef <code>COMPORTEMENT/ITER_INTE_MAXI</code>
2	Mot-clef <code>COMPORTEMENT/TYPE_MATR_TANG</code>
3	Mot-clef <code>COMPORTEMENT/RESI_INTE_RELA</code>
4	Mot-clef <code>COMPORTEMENT/PARM_THETA</code>
5	Mot-clef <code>COMPORTEMENT/ITER_INTE_PAS</code>
6	Mot-clef <code>COMPORTEMENT/ALGO_INTE</code>
7	Mot-clef <code>COMPORTEMENT/VALE_PERT_RELA</code>
8	Mot-clef <code>COMPORTEMENT/RESI_CPLAN_MAXI</code>
9	Mot-clef <code>COMPORTEMENT/ITER_CPLAN_MAXI</code>
10	Mot-clef <code>COMPORTEMENT/RESI_RADI_RELA</code>
11	Entier codé pour la présence de variables de commandes de type <code>ExternalStateVariable</code>
12	Mot-clef <code>SCHEMA_THM/PARM_THETA</code>
13	Mot-clef <code>COMPORTEMENT/POST_ITER</code>
14	Pointeur vers le nombre de variables internes <code>StateVariable</code> pour <code>MFront</code>
15	Pointeur vers les noms des variables internes <code>StateVariable</code> pour <code>MFront</code>
16	Pointeur vers la loi de comportement <code>MFront</code>
17	Indicateur de symétrie de la matrice tangente de comportement
18	Mot-clef <code>SCHEMA_THM / PARM_ALPHA</code>
19	Pointeur vers les noms des paramètres matériaux pour <code>MFront</code>
20	Pointeur vers les noms des paramètres matériaux pour <code>MFront</code>
21	Mot-clef <code>COMPORTEMENT/POST_INCR</code>
22	Type de modèle cinématique pour <code>MFront</code>

La structure de données `COMPOR` est une `sd_carte` qui contient des chaînes de caractère. Elle stocke actuellement 20 paramètres dont voici la liste.

L'indice est donné dans le fichier `Behaviour_type.h`.

Nom de l'indice	Contenu
<code>RELA_NAME</code>	Mot-clef <code>COMPORTEMENT/ RELATION</code>
<code>NVAR</code>	Nombre de variables internes
<code>DEFO</code>	Mot-clef <code>COMPORTEMENT/ DEFORMATION</code>

INCRELAS	Indicateur de modèle incrémental ou total
PLANESTRESS	Modèle en contraintes planes (Deborst ou analytique)
NUME	Indice d'appel de la loi de comportement (Icxxxx)
MULTCOMP	Nom de la structure de données issue de DEFI_COMPOR
POSTITER	Contenu du mot-clef COMPOTEMENT/ POST_ITER
KIT1_NAME THMC_NAME CREEP_NAME CABLE_NAME	Nom de la première relation pour un kit
KIT2_NAME THER_NAME PLAS_NAME SHEATH_NAME	Nom de la deuxième relation pour un kit
KIT3_NAME COUPL_NAME HYDR_NAME	Nom de la troisième relation pour un kit
KIT4_NAME CPLA_NAME MECA_NAME	Nom de la quatrième relation pour un kit
KIT1_NUME THMC_NUME PLAS_NUME	Indice d'appel de la première relation pour un kit
KIT2_NUME THER_NUME CREEP_NUME	Indice d'appel de la deuxième relation pour un kit
KIT3_NUME HYDR_NUME	Indice d'appel de la troisième relation pour un kit
KIT4_NUME MECA_NUME	Indice d'appel de la quatrième relation pour un kit
KIT1_NVAR THMC_NVAR CREEP_NVAR	Nombre de variables internes de la première relation pour un kit
KIT2_NVAR THER_NVAR PLAS_NVAR	Nombre de variables internes de la deuxième relation pour un kit
KIT3_NVAR HYDR_NVAR	Nombre de variables internes de la troisième relation pour un kit
KIT4_NVAR MECA_NVAR	Nombre de variables internes de la quatrième relation pour un kit

3 Gestion de l'algorithme

Nous allons nous intéresser à la gestion de l'algorithme. Pour gérer la convergence, les différents niveaux de boucle et les erreurs survenues lors d'un calcul, on utilise un formalisme commun, basé sur la notion d'événement.

3.1 Les différentes boucles

Dans l'algorithme, il y a cinq niveaux de boucles <BOUC> :

- <RESI> : la boucle sur les différents résidus d'équilibre demandés par l'utilisateur (RESI_GLOB_RELA , RESI_GLOB_MAXI , etc) ;
- <NEWT> : la boucle sur les itérations de Newton ;
- <FIXE> : la boucle sur les points fixes (contact) ;
- <INST> : la boucle sur les instants de calcul ;
- <CALC> : la boucle sur le calcul.

La « boucle » <CALC> n'en est pas vraiment une. Elle sert à gérer deux situations :

1. Le calcul se termine normalement (pas d'erreur) mais autrement que lorsqu'on a atteint la fin de la boucle sur les pas de temps. Pour l'instant, le seul cas est celui où le pilotage a atteint ses bornes ;
 2. Un événement est déclenché à l'extérieur de la boucle sur les pas de temps, c'est-à-dire pendant le post-traitement (détection d'instabilité par modes vibratoires) ;
- Les différentes boucles sont réparties entre `op0070`, `nmnewt` (statique et dynamique implicite) et `ndexpl` (dynamique explicite). Pour la boucle sur les résidus d'équilibre, il faut regarder dans la routine `nmcore`, appelée par `nmconv`. Pour la boucle sur les points fixes, on utilise les routines `nmible/nmtble`, contenues dans `nmnewt`.

3.2 État des boucles

L'état d'une boucle est stocké dans l'objet `SDERRO` (§2.4.2.6), on y accède par `nmleeb` et `nmeceb`. Il existe six états :

1. `CONT` : la boucle continue ;
2. `CONV` : la boucle a convergé (événements de type convergence et divergence) ;
3. `ERRE` : une erreur (événement de type erreur) est survenue pendant la boucle, on va la traiter ;
4. `EVEN` : un événement (événement de type informatif) est survenu pendant la boucle ;
5. `STOP` : une erreur (événement de type erreur) est survenue pendant la boucle, on s'arrête ;
6. `CTCD` : état particulier de la boucle de Newton pour le contact discret ;

3.3 Les événements

On peut classer les événements selon leur origine :

- Les événements définis par l'utilisateur dans `DEFI_LIST_INST` (par exemple, `DELTA_Grandeur`) ;
- Les événements intrinsèques à l'algorithme : les erreurs et la convergence des différentes boucles ;

3.3.1 Types des événements

Un événement est défini par son type qui est une chaîne de caractère en deux parties <XXXX_YYYY>. La première chaîne <XXXX> décrit le type de l'événement :

- Les événements donnant lieu à une erreur sont préfixés par <ERRC_*> ou <ERRI_*> ;
- Les événements donnant lieu à une convergence sont préfixés par <CONV_*> ;
- Les événements donnant lieu à une divergence sont préfixés par <DIVE_*> ;
- Les événements informatifs sont préfixés par <EVEN_*> ;

La seconde chaîne <YYYY> décrit le niveau de boucle de l'événement :

- Boucle sur les résidus d'équilibre <*_RESI> ;
- Boucle sur les itérations de Newton <*_NEWT> ;
- Boucle de point fixe pour le contact <*_FIXE> ;
- Boucle sur les pas de temps <*_INST> ;

Cette information décrit dans quelle boucle les événements peuvent potentiellement se déclencher.

3.3.1.1 Événements de type erreur <ERR*_*>

Des erreurs sont à traiter immédiatement (c'est-à-dire dès déclenchement de l'événement) car elles sont bloquantes pour le processus, elles sont notées <ERRI>. Les erreurs à traiter uniquement à convergence de la boucle sont notées <ERRC>.

Par exemple :

- <ERRI_NEWT> est une erreur à traiter immédiatement dans une itération de Newton comme un défaut d'intégration de la loi de comportement empêche ou une matrice non factorisable ;
- <ERRC_NEWT> est une erreur à traiter à convergence de Newton, par exemple une sortie d'un critère physique hors des bornes de son domaine de définition ;
- <ERRI_FIXE> est une erreur à traiter immédiatement dans une boucle de point fixe ;

Remarque :

Les erreurs typées <ERRI_CALC> entraînent l'arrêt immédiat du calcul car aucune action ne peut les traiter. Ce sont les arrêts en manque de temps CPU et l'arrêt extérieur par utilisateur.

3.3.1.2 Événements de type convergence <CONV_ *>

Les événements de type convergence se traitent à chaque niveau de boucle. Cette convergence peut-être liée à une fonctionnalité activée ou pas (cf §2.4.1.1).

3.3.1.3 Événements de type divergence <DIVE_ *>

Les événements de type divergence se traitent à chaque niveau de boucle. Cette divergence peut-être liée à une fonctionnalité activée ou pas (cf §2.4.1.1).

En pratique, l'état de chaque boucle est plutôt traitée en divergence. En effet, pour éviter d'avoir à vérifier qu'une fonctionnalité spécifique est active (pilotage, Deborst, contact, etc) et donc tester la convergence d'une boucle en vérifiant cette fonctionnalité, on préfère émettre un événement de divergence qu'un événement de convergence : on ne peut avoir divergence que si la fonctionnalité est activée, alors qu'on pourrait avoir convergence même si la fonctionnalité n'est pas activée.

3.3.1.4 Événements de type informatif <EVEN>

Les événements de type informatifs sont les autres événements (ni erreur, ni convergence). Par défaut, ils ne servent qu'à donner des indications à l'utilisateur (souvent sous la forme de messages d'alarmes, le passage de RESI_GLOB_RELA à RESI_GLOB_MAXI par exemple). Certains ne sont activables que sur demande de l'utilisateur (commande DEFI_LIST_INST).

Ces événements pourront aussi être traité explicitement (autrement que par l'émission d'une alarme ou d'une information) via DEFI_LIST_INST.

Ces événements ne sont pas liés à un niveau de boucle.

3.3.1.5 Le cas des code-retour

Un code-retour est un entier unique donnant le statut d'un opération. Il est possible de lier un événement à la valeur d'un code-retour. Chaque valeur du code-retour peut générer un événement différent, de n'importe quel type. Les codes retour -1 et 0 ont toujours le même sens :

- -1 : on n'a rien fait (pas de factorisation, pas d'intégration de loi de comportement, etc.) ;
 - 0 : on a fait quelque chose et tout s'est bien passé ;
- Les autres valeurs de codes retour ont un sens dépendant de leur type :

Type	Description	Signification du code	
FAC	Retour de la factorisation	-1	Pas de factorisation
		0	Tout s'est bien passé
		1	La matrice est singulière

		2	La factorisation a échoué
		3	On ne sait pas dire si la matrice est singulière
PIL	Retour du pilotage	-1	Pas de pilotage
		0	Tout s'est bien passé
		1	Pas de solution de l'équation de pilotage
		2	On a atteint une borne (fin du calcul)
LDC	Retour de l'intégration de la loi de comportement	-1	Pas d'intégration du comportement
		0	Tout s'est bien passé
		1	Échec lors de l'intégration de la loi de comportement
		2	Un paramètre physique n'est pas dans son domaine de définition
		3	La contrainte <i>SIZZ</i> n'est pas nulle (algorithme de De Borst)
CTC	Retour du traitement du contact discret	-1	Pas de contact discret
		0	Tout s'est bien passé
		1	Le nombre maximum d'itérations de contact a été atteint
		2	La matrice du contact est singulière

3.4 Gestion des événements

3.4.1 Modification, ajout ou suppression d'un événement

La plupart des événements standardisés sont prévus dans la structure de données et les utilitaires qui y sont liés. Dans la plupart des cas, il ne s'agit de modifier que la routine `nmcrga` (voir §2.4.2.6 en y ajoutant la caractéristique du l'événement dans les `DATA` en début de routine.

Description	DATA
Nom de l'événement	NEVEN
Nom du code-retour lié à l'événement (XXX si pas code-retour)	NCRET
Valeur du code-retour lié à l'événement (99 si pas code-retour)	VCRET
Type et niveau de déclenchement de l'événement	TEVEN
Fonctionnalité activant un événement de type convergence ou divergence	FEVEN
Code du message à afficher quand l'événement se déclenche	MEVEN

Le système de vérification des messages fait que le code du message à afficher (`MEVEN`) n'est pas suffisant, il faut aussi impacter `nmevim`.

3.4.2 Émissions des événements

Pour déclencher un événement le développeur doit le prévoir dans l'algorithme en appelant la routine `nmcrel`. Par exemple :

Commande	Effet
<code>CALL NMCREL(SDERRO, 'ERRE_TIMN', .TRUE.)</code>	Manque de temps CPU pendant une itération de Newton

CALL NMCREL (SDERRO, 'RESI_MAXR', .TRUE.)	Passage de RESI_GLOB_RELA à RESI_GLOB_MAXI
CALL NMCREL (SDERRO, 'DIVE_FIXG', .FALSE.)	Pas de divergence de la boucle de point fixe sur la géométrie

Si l'événement est de type <ERRI_BOUC>, le statut de la boucle <BOUC> est automatiquement modifié. C'est une précaution pour éviter que le développeur oublie de traiter l'événement (et donc risque de provoquer des résultats faux). Une erreur immédiate de niveau <ERRI> est répercutée à tous les niveaux de boucle pour les mêmes raisons.

Pour activer un événement lié à un code-retour, il faut utiliser la routine `nmcret` au lieu de `nmcrel`. Par exemple `CALL NMCRET (SDERRO, 'LDC', LDCCVG)` s'occupe de transformer en événement la valeur du code retour de la loi de comportement.

3.4.3 Traitement des événements

L'idée principale est de traiter les événements à tous les niveaux de boucle, de changer l'état des boucles selon le résultat de ce traitement.

3.4.3.1 Événements de type convergence et divergence

Les événements de type convergence ou divergence sont examinés à chaque niveau de boucle, dans une routine dédiée appelée `nmevcv`. Cette routine modifie l'état de la boucle :

1. On suppose initialement que la boucle continue (état `CONT`, cf §3.2)
2. On boucle sur les événements de type <CONV_*> et <DIVE_*> en prenant en compte des éventuelles fonctionnalités activées ;
3. On calcule l'état résultat pour ce niveau de boucle : si tous les événements de divergence sont faux et tous les événements de convergence sont vrais, alors ce niveau de boucle est dans l'état convergé ;
4. On vérifie les états de convergence des boucles intérieures à ce niveau. Pour que l'état final de cette boucle soit convergé, toutes les boucles intérieures doivent être convergées. Si c'est le cas, la boucle passe dans l'état convergé (état `CONV`, cf §3.2)
5. On modifie l'état de la boucle courante en appelant la routine `nmeceb` ;
6. La routine `nmeceb` transmet l'état de la boucle aux boucles supérieures (évite les erreurs non-traitées) ;

Boucle	Code	Routine	Routine appelante
Résidus	RESI	<code>nmcvgr</code>	<code>nmconv</code>
Newton	NEWT	<code>nmcvgn</code>	<code>nmnewt</code>
Point fixe	FIXE	<code>nmcvgf</code>	<code>nmtble</code>
Pas de temps	INST	<code>nmcvgp</code>	<code>op0070</code>
Calcul	CALC	<code>nmcvgc</code>	<code>op0070</code>

3.4.3.2 Événements de type erreurs

Les événements de type erreur sont particulièrement sensibles et doivent être traités de manière très rigoureuse pour éviter les résultats faux. En premier lieu, l'événement de type erreur a été émis par le biais des routines standards : `nmcrel` et `nmcret`. On rappelle que dans le cas des événements erreur, on modifie systématiquement l'état de la boucle en mode `ERRE` dans l'optique d'éviter de continuer ces boucles si jamais l'erreur n'a pas été traitée convenablement par l'algorithme (oubli du développeur).

De manière systématique, les événements de type erreur sont testés dans l'algorithme via la routine `nmltev`. Si un événement de type erreur est activé, un `GOTO` est immédiatement fait dans le programme.

4 Algorithme général

Le processus est standardisé au maximum, pour chaque niveau de boucle :

- Évaluation de la convergence par appel aux routines `nmcvg*` ;
- Action suite à la situation de la boucle par appel aux routines `nmact*` ;

4.1 Lectures et initialisations globales

La routine `op0070` gère l'algorithme global et se découpe en trois parties :

- Lecture et initialisations des données ;
- Boucle sur les pas de temps ;
- Post-traitements ;
- Gestion des erreurs globales ;
- Archivage ;

Pour la lecture et l'initialisation des données, on se reportera en particulier aux informations relatives à la gestion des SD (§2). L'ensemble des initialisations faites à ce niveau sera valable pour tout le calcul. La routine principale d'initialisation est `nminit`. Voici les opérations prévues dans cette routine :

Opérations d'initialisations dans <code>nminit</code>	Routine
Création du profil de la matrice et de la <code>SDNUME</code>	<code>nmnume</code>
Création des variables-chapeaux	<code>nmchap</code>
Création du vecteur des fonctionnalités activées <code>list_func_acti</code>	<code>nmfonc</code>
Création des vecteurs dans les variables-chapeaux	<code>nmcrch</code>
Création de la structure de données pilotage	<code>nmdopi</code>
Duplication <code>NUME_DDL</code> pour <code>SDNUME</code>	<code>nmpro2</code>
Préparation de la carte <code>COMPOR</code> (transformation en <code>CHAM_ELEM_S</code>)	<code>nmdoco</code>
Création de <code>SDDISC</code> et <code>SDOBSE</code>	<code>diinit</code>
Initialisation des variables de commande	<code>nmcrvv</code>
Pré-calcul des <code>MATR_ELEM</code> constants au cours du calcul	<code>nminmc</code>
Pré-calcul des <code>VECT_ELEM</code> et <code>VECT_ASSE</code> constants au cours du calcul	<code>nminvc</code>
Création de la <code>SDCRIT</code>	<code>nmcrvc</code>
Initialisation du calcul par sous-structuration	<code>nmlssv</code>
Création de la SD pour le chargement <code>FORCE_SOL</code>	<code>nmexso</code>
Calcul de l'accélération initiale	<code>accel0</code>
Création de la <code>SDCONV</code>	<code>nmcrvcg</code>
Initialisation de <code>NL_DS_Print</code>	<code>nminim</code>
Pré-calcul des <code>MATR_ASSE</code> constants au cours du calcul	<code>nminma</code>
Réalisation d'une observation initiale	<code>nmobsv</code>
Création de la SD <code>RESULTAT</code> (<code>EVOL_NOLI</code>)	<code>nmnoli</code>
Création de la table des grandeurs (pour <code>ERRE_THM</code>)	<code>cetule</code>
Calcul du second membre initial pour les schémas multi-pas en dynamique	<code>nmihtt</code>

L'algorithme général de `op0070` est résumé sur l'organigramme (Figure 1).

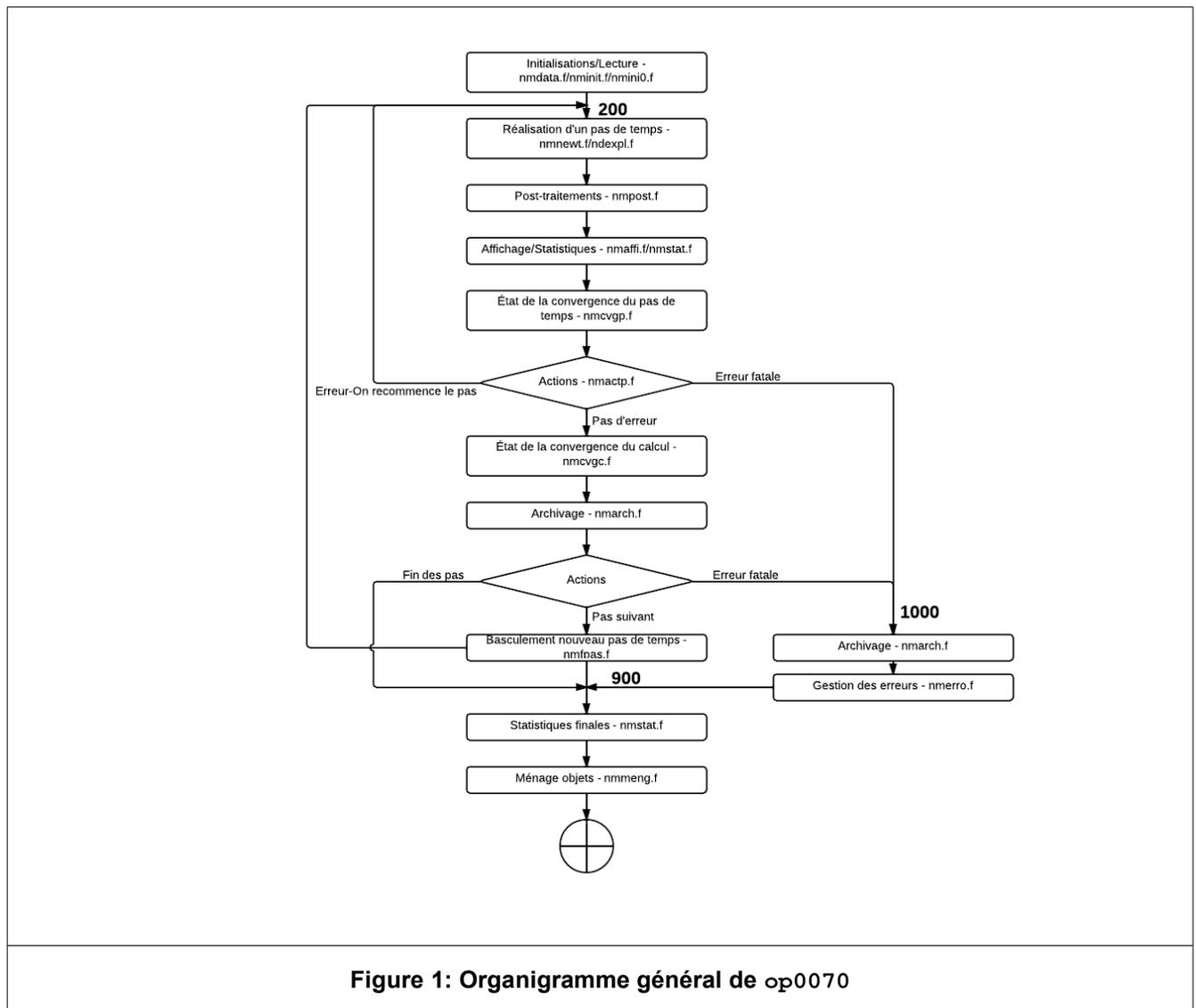


Figure 1: Organigramme général de op0070

4.2 Réalisation d'un pas de temps

Un pas de temps utilise plusieurs niveaux de boucles imbriqués :

- Des boucles de point fixe, utilisées exclusivement pour le contact (jusqu'à trois niveaux de boucle) ;
- Une boucle sur les itérations de Newton. Un processus de Newton contient une prédiction d'Euler et des corrections de Newton ;

L'algorithme général de `nmnewt` est résumé sur l'organigramme (Figure 2).

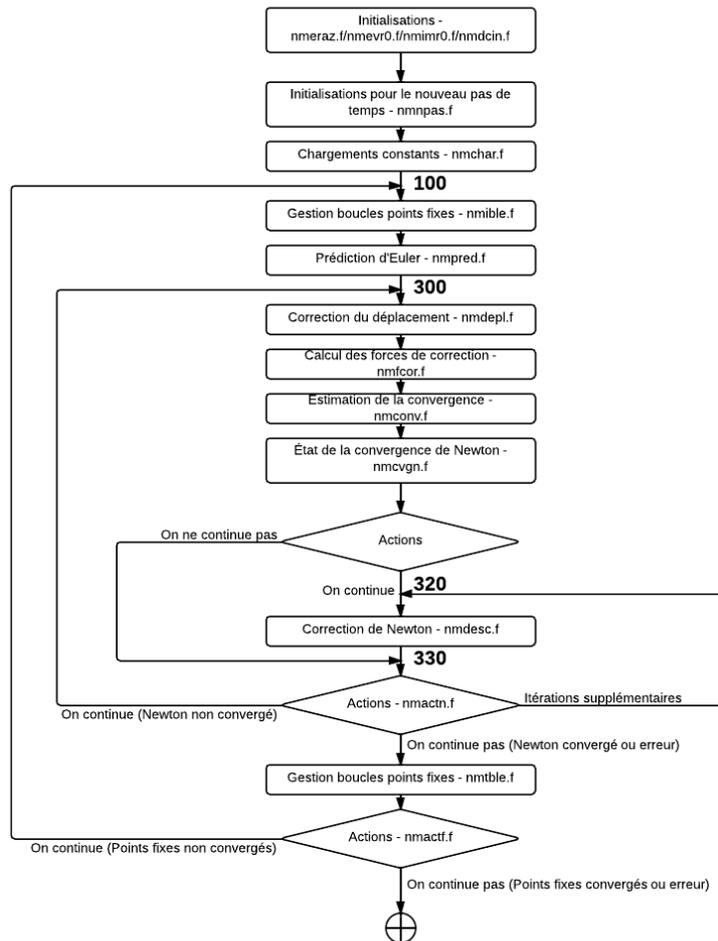


Figure 2: Organigramme général de nmnewt

4.2.1 Initialisations du pas

Chaque pas de temps est initialisé par une série de routines :

- Les routines `nmeraz`, `nmevr0` s'occupent d'initialiser la gestion des événements ;
- La routine `nmdcin` vérifie que la découpe du pas de temps est correcte (contrôle du nombre de niveau de découpe d'un pas de temps à l'autre) ;

La routine la plus importante est la routine `nmnpas`. Elle réalise les opérations suivantes :

- Les routines `nmimr0` et `nminin` initialisent l'affichage, en particulier le tableau de convergence (ce qui permet de faire varier la nature de celui-ci d'un pas de temps à l'autre) ;
- La routine `nmvcre` prépare les variables de commande pour le pas de temps courant ;
- On initialise à zéro l'incrément de déplacement cumulé depuis le début du pas de temps (vecteur `DEPDEL`, voir § 2.4.1.6). Attention l'initialisation est spéciale à cause de la prise en compte des grandes rotations ;
- On initialise toutes les données pour la dynamique, en particulier les différents coefficients (voir § 2.4.2.17) dans `ndnpas` ;
- On initialise différentes informations pour Newton-Krylov et le contact (routines `cfinit`, `mmapin` et `nmnkft`) ;

4.2.2 Prédiction d'Euler

La prédiction d'Euler est une estimation de l'incrément de déplacement en linéarisant le problème par rapport au temps. Il existe plusieurs méthodes et plusieurs types de matrice utilisables. Le calcul proprement dit est réalisé dans la routine `nmpréd` (et ses -jolies- filles), au moyen des principes établis dans le §5.

4.2.3 Mise à jour des champs

La mise à jour des champs est réalisée dans la routine `nmdepl`. Cette mise à jour consiste à modifier les vecteurs solutions (déplacements, vitesses et accélérations), en prenant en compte éventuellement :

- La recherche linéaire sans pilotage ;
- La recherche de η pour le pilotage avec ou sans recherche linéaire ;
- Le contact (formulation discrète) ou les liaisons unilatérales ;

Voici les phases :

1. Recalcul des efforts extérieurs, routine `nmfext` ;
2. Conversion des incréments de solution `DEPSO1` et `DEPSO2` (voir §2.4.1.6), issus de la résolution du système linéaire, vers les incréments en déplacement/vitesse/accélération (prise en compte des coefficients de changement de schéma), via la routine `nmincr` ;
3. Calcul recherche linéaire et pilotage, routines `nmreli`, `mpich` et `nmrepl` ;
4. Mise à jour de la direction de descente (prise en compte des coefficients issus de la recherche linéaire et du pilotage), routine `mpild` ;
5. Modification des déplacements par le contact et les liaisons unilatérales, par la routine `nmcou` ;
6. Actualisation des champs de solutions dans `nmmajc` ;

La phase 4.2.3 consiste à mettre à jour les champs « plus » (`DEPPLU`, `VITPLU`, `ACCPLU`) et les champs cumulés (`DEPDEL`, `VITDEL`, `ACCDEL`), en prenant en compte les éventuelles grandes rotations (mise à jour des quaternions) et de l'endommagement aux nœuds.

4.2.4 Forces de correction

Puisque les déplacements ont été modifiés (voir § 4.2.3), il est nécessaire de ré-évaluer les forces variables : soit les forces extérieures de type « suiveuse », soit les forces intérieures et les réactions de contact/frottement, soit les forces liées à la dynamique (inertie, amortissement). L'ensemble est réalisé dans la routine `nmfcor`.

4.2.5 Estimation de la convergence

L'estimation de la convergence de Newton est un moment critique, qui va conditionner la justesse du calcul. L'ensemble de l'estimation est réalisé dans la routine `nmconv`. Cette routine s'occupe du calcul des résidus (`nmresi`), de l'estimation de leur convergence (`nmcore`). C'est donc dans cette routine qu'on va traiter la boucle `<RESI>` sur les résidus d'équilibre. Mais on doit aussi prendre en compte le nombre d'itérations de Newton, le cas de la convergence du contact (formulations discrète ou continue), de la méthode de De Borst ou de la méthode `IMPLEX`.

Remarque :

Il convient d'être très prudent dans la modification de cette routine.

4.2.6 Correction de Newton

Si le processus n'a pas convergé, on procède au calcul d'une correction de Newton. On réalise donc le calcul d'un système linéaire (voir §5) dans la routine `nmdesc` (comme direction de **descente**).

4.2.7 Boucle sur les points fixes

Il existe trois boucles dite « de point fixe » entre la boucle sur les pas de temps et la boucle sur les itérations de Newton. Ces boucles sont utilisés pour le contact :

1. Boucle de point fixe sur la géométrie ;
2. Boucle de point fixe sur les seuils de frottement ;
3. Boucle de point fixe sur les statuts de contact ;

Ces trois boucles sont gérées par le duo de routine `nmible/nmtble`, via le passage de la variable `NIVEAU`, qui indique dans quel type de boucle de point fixe on se trouve actuellement.

5 Construction et résolution des systèmes

Une partie importante de l'algorithme non-linéaire consiste à résoudre des systèmes linéaires, que l'on construit en quatre temps :

- Calcul et assemblage des chargements ;
- Calcul et assemblage des seconds membres ;
- Calcul et assemblage de la matrice ;
- Résolution du système linéaire ;

Dans cette partie, nous allons décrire les différentes phases et les principales routines à considérer.

5.1 Systèmes à résoudre

Actuellement, il existe plusieurs systèmes différents qui sont résolus dans l'opérateur `op0070`. Ils auront toujours la forme suivante (sauf pour le post-traitement, qui utilise les opérateurs de recherche de valeurs propres) :

$$\begin{bmatrix} K & B^T \\ B & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{Bmatrix} \delta r \\ \delta s \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} L_r \\ L_s \end{Bmatrix} \quad (1)$$

$[K]$ est la matrice de rigidité ou une combinaison linéaire de matrices et $[B]$ est la matrice des Lagrange de Dirichlet.

$[\delta r]$ est l'incrément de solution des valeurs nodales inconnues du système et $[\delta s]$ est l'incrément des paramètres de Lagrange associés à la dualisation des conditions limites. Concrètement, les « valeurs nodales inconnues » du systèmes peuvent être des déplacements, des vitesses, des accélérations, des pressions, des températures, etc. Les deux seconds membres sont également des valeurs nodales. Le détail des systèmes est donné dans les documentations de référence [R5.03.01] et [R5.05.05].

5.2 La routine `merimo`

Pour le calcul des matrices tangentes (options `FULL_MECA`, `FULL_MECA_ELAS`, `RIGI_MECA_TANG`, `RIGI_MECA_ELAS`, `RIGI_MECA`, `RIGI_MECA_IMPLEX`) et les efforts intérieurs (option `RAPH_MECA`), on passe systématiquement par la routine `merimo`. Cette routine prépare les champs d'entrées (nombreux dans ce cas), elle est appelée à la fois pour le calcul des vecteurs élémentaires pour les efforts intérieurs (voir §5.5.2) mais aussi pour le calcul des matrices élémentaires tangentes de rigidité (voir §5.3).

5.3 Calcul des matrices

Nous considérons ici des matrices élémentaires (`MEELEM`) et des matrices assemblées (`MEASSE`). Tout comme pour le chargement (§5.5.1), ce calcul utilise un système en deux temps :

- Création d'une **liste locale** des matrices à calculer ou assembler ;
- Calcul ou assemblage des matrices ;

Pour la phase de création de la liste des matrices à calculer ou assembler, il y a plusieurs routines (contrairement aux chargements qui n'utilisent que la routine `nmchar`). Ces routines sont les suivantes :

Opérations	Routine
Construction de la liste locale pour les matrices utilisées en dynamique explicite	<code>ndxprm</code>
Construction de la liste locale pour les matrices utilisées en correction	<code>nmcoma</code>
Construction de la liste locale pour les matrices utilisées en prédiction	<code>nmprma</code>
Construction de la liste locale pour les matrices utilisées en post-traitement (modes vibratoires ou modes de flambement)	<code>nmflma</code>
Construction de la liste locale pour les matrices constantes durant tout le calcul	<code>nmnmc</code>

Pour la phase de calcul ou assemblage des matrices, on retrouve des routines similaires au cas des chargements.

Opérations	Routine
Ajout d'une matrice à assembler et/ou calculer dans la liste locale Initialisation de la liste locale	nmcmat nmcmat
Aiguillage calcul et/ou assemblage des matrices	nmixmap
Calcul des matrices	nmcalm
Assemblage des matrices	nmassm
Calcul et assemblage des matrices de rigidité	nmrigi

Il y a néanmoins une exception notable : le calcul des matrices tangentes non-linéaires utilise un appel direct par `nmrigi` car cela nécessite des paramètres supplémentaires (appel à `merimo`, voir 5.2) dont n'ont pas besoin les autres matrices. Le type de matrice `MERIGI` utilise donc `nmrigi` à la place de `nmcalm` et `nmassm`.

Si on désire modifier une matrice, il faut donc :

- Ajouter son calcul ou son assemblage au bon endroit (`ndxprm`, `nmcoma`, `nmprma`, `nmflma` ou `nminmc`) selon le cas, voire ajouter une nouvelle routine ;
- Ajouter le calcul élémentaire ou l'assemblage dans `nmcalm` et `nmassm` ;
Les routines `nmixmap` et `nmcmat` de manipulation de la liste locale **ne doivent pas être modifiées**.

5.4 Calcul de la matrice résultante MATASS

Selon le type de matrice résultante que l'on désire obtenir (en prédiction, en correction ou pour l'accélération initiale), on utilise trois routines globales qui vont s'occuper de cette construction. Ce sont les routines `nmprac`, `nmcoma` et `nmprma`. Ces trois routines gèrent également l'affichage (option de calcul de la matrice de rigidité) et les statistiques (temps passé dans les opérations). Elles ont le même schéma de principe :

- Calcul ou assemblage de matrices élémentaires (`MEELEM`) dans des matrices assemblées (`MEASSE`), (voir § 5.3) ;
- Gestion des paramètres de réactualisation des matrices (rigidité, masse, amortissement), routine `nmchrn` ;
- Gestion du type de la matrice de rigidité (nom de l'option), routine `nmchoi` ;
- Construction de la matrice résultante par combinaison linéaire des autres matrices. En dynamique, les différentes contributions dans la matrice résultante (matrices de masse, d'amortissement et de rigidité) se combinent en utilisant un coefficient multiplicateur dépendant du schéma en temps utilisé et du pas de temps, on récupère ces coefficients via la routine d'accès `NDYNRE` (voir § 2.4.2.17). C'est la routine `nmmatr` ;
- Factorisation (ou pas) de la matrice résultante par appel à la routine `preres` ;

Opérations	Routine
Calcul de la matrice assemblée résultante pour le calcul de l'accélération initiale	nmprac
Calcul de la matrice assemblée résultante pour la phase de prédiction	nmprma
Calcul de la matrice assemblée résultante pour la phase de correction	nmcoma
Gestion des paramètres de réactualisation des matrices (rigidité, masse, amortissement)	nmchrn
Gestion du type de la matrice de rigidité (nom de l'option)	nmchoi
Choix de re-création de la numérotation	nmrenu
Calcul de la matrice résultante <code>MATASS</code>	nmmatr
Prise en compte des chargements suiveurs avec leur fonction multiplicatrice	ascoma
Prise en compte de la modification de la matrice résultante par le contact/frottement (méthode <code>DISCRETE</code>)	nmasfr

5.5 Calcul du second membre

Le calcul du second membre est la partie la plus différente d'un système linéaire à l'autre, il va contenir :

- Les chargements donnés (voir le § 5.5.1)
- Les forces internes provenant de l'intégration du comportement (§5.5.2) ;
- Les quantités liées aux conditions limites de Dirichlet comme les réactions d'appui (§5.5.3) ;
- Les quantités liées aux variables de commande (§5.5.4) ;
- Les différentes quantités liées au contact/frottement (pas de détails dans ce document) ;
- Les contributions d'inertie et d'amortissement pour la dynamique (§5.5.6) ;

Dans le cas de la dynamique, pour les schémas multi-pas (Newmark complet avec `MODI_EQUI='OUI'`) on va de plus ajouter les contributions des pas de temps précédents.

5.5.1 Calcul des chargements

Il y a trois modes d'évaluation des chargements et deux phases. Les modes sont les suivants :

- Mode `<ACCI>` des chargements pour l'évaluation de l'accélération initiale en dynamique ;
- Mode `<FIXE>` des chargements pour l'évaluation des chargements fixes ne dépendant pas de la solution ;
- Mode `<VARI>` des chargements pour l'évaluation des chargements variables dépendant de la solution (chargements suiveurs) ;

Il y a également deux phases. Soit on est en correction, soit on est en prédiction. Ces phases ne sont utiles que pour des cas très particuliers : amortissement modal, méthode IMPLEX et impédance modale.

La routine principale qui calcule les chargements est `nmchar`. Dans cette routine, suivant les fonctionnalités activées (`list_func_acti`) et suivant le mode/phase de calcul, on va provoquer le calcul des vecteurs élémentaires (variable-chapeau `VEELEM`) et leur assemblage en vecteurs assemblés (variable-chapeau `VEASSE`). Pour cela, on utilise un certain nombre de routines utilitaires qui gèrent des listes locales à `nmchar`.

Opérations	Routine
Ajout d'un chargement à assembler ou calculer, avec une option éventuelle Initialisation de la liste des chargements (initialisations listes locales de <code>nmchar</code>)	<code>nmcvec</code> <code>nmcvec</code>
Aiguillage calcul ou assemblage des chargements	<code>nmxvec</code>
Calcul des chargements	<code>nmcalv</code>
Assemblage des chargements	<code>nmassv</code>

Certains chargements n'ont pas de phase de calcul élémentaire mais seulement la création d'un vecteur assemblé directement. Si on désire ajouter un chargement, il faut donc :

- Définir quelle phase et quel mode va l'activer ;
- Ajouter son calcul ou son assemblage dans `nmchar` selon la fonctionnalité activée ;
- Ajouter le calcul élémentaire et/ou l'assemblage dans `nmcalv` et `nmassv` ;

Les routines `nmxvec`, `nmcvec` **ne doivent pas être modifiées**.

5.5.2 Calcul des quantités liées aux efforts intérieurs

Le calcul des efforts intérieurs peut être réalisé de deux manières :

- Par intégration de la loi de comportement, c'est l'option de calcul `RAPH_MECA` ;
- Par ré-utilisation des contraintes calculées par ailleurs, c'est l'option de calcul `FORC_NODA` ;

Cette distinction est importante car elle n'engendre pas les mêmes coûts (le second cas est beaucoup plus rapide). L'intégration du comportement est une opération coûteuse qui implique de modifier variables internes et contraintes, et, souvent, de résoudre localement (à chaque point de Gauss), un système non-linéaire. Comme le calcul des contraintes est également nécessaire lors de l'évaluation des matrices tangentes, le comportement est aussi intégré lors du calcul des matrices tangentes (option `FULL_MECA`). En statique, la phase de prédiction calcule les efforts intérieurs par l'option `FORC_NODA`. En dynamique, on intègre systématiquement le comportement.

Opérations	Routine
Calcul des vecteurs élémentaires pour les efforts intérieurs (intégration du comportement)	nmfint
Assemblage des vecteurs élémentaires pour les efforts intérieurs (intégration du comportement)	nmain

Le calcul de l'option FORC_NODA est fait par le mécanisme d'évaluation des chargements (§5.5.1).

5.5.3 Calcul des quantités liées aux conditions limites dualisées

La dualisation des conditions limites de Dirichlet (voir [R3.01.01]) entraîne le calcul de deux quantités de type vecteur assemblée :

- Les réactions d'appui, par le produit de la matrice des conditions limites dualisées avec les Lagrange correspondant aux degrés de liberté $[B].[\lambda]$, il s'agit du vecteur identifié par CNDIRI ;
- La valeur des degrés de liberté imposée par dualisation $[B].[u]$. A convergence, cette quantité sera égale aux conditions limites données $[u^d]$, le vecteur est identifié par CNBUDI ;

Opérations	Routine
Calcul des vecteurs élémentaires pour les réactions d'appui	nmdir
Assemblage des vecteurs élémentaires pour les réactions d'appui	nmdir
Calcul et assemblage des quantités imposées par dualisation	nmbudi

5.5.4 Calcul des quantités liées aux variables de commande

Le calcul de ces quantités se fait par le mécanisme d'évaluation des chargements (§5.5.1), type CNVCF0, CNVCF1 et CNVCPR.

5.5.5 Calcul des quantités constantes pendant le calcul

Un certain nombre de vecteurs sont constants durant le calcul, ils utilisent alors un mécanisme similaire aux chargements (§5.5.1), à l'aide des routines nmxvec, nmcvec, nmcalv et nmassv, sauf qu'on passe par la routine nminvc au lieu de nmchar.

Opérations	Routine
Calcul et assemblage des vecteurs constants durant le calcul	nminvc

5.5.6 Calcul des quantités liées à la dynamique – Forces d'inertie et d'amortissement

Le calcul de ces quantités se fait par le mécanisme d'évaluation des chargements (§ 5.5.1), type CNDYNA. Ces quantités n'existent pas à l'état élémentaire puisqu'ils sont le résultat d'un produit matrice/vecteur.

Opérations	Routine
Calcul des quantités dynamiques pour le second membre	ndfdyn
Calcul des forces d'inertie	nminer
Calcul des forces d'amortissement	nmhyst

Selon les schémas en temps, il est nécessaire d'utiliser des coefficients multiplicateurs spécifiques devant chacune de ces quantités, on récupère ces coefficients via la routine d'accès NDYNRE (voir § 2.4.2.17).

5.5.7 Seconds membres résultants

Il en reste plus qu'à construire les différents seconds membres par combinaison linéaire de toutes les quantités détaillées précédemment. Les routines principales de construction de ces seconds membres sont au nombre de sept :

Opérations	Routine
Calcul du second membre pour la correction	nmassc
Calcul du second membre pour la prédiction – Option DEPL_CALCULE ou EXTRAPOLE	nmassd
Calcul du second membre pour l'accélération initiale	nmassi
Calcul du second membre pour la prédiction	nmassp
Calcul du second membre pour la prédiction – Cas statique	nsassp
Calcul du second membre pour la prédiction – Cas dynamique implicite	ndassp
Calcul du second membre pour la prédiction – Cas dynamique explicite	nmassx

Toutes ces routines reposent sur les mêmes principes :

- Récupération des quantités nécessaires, déjà assemblées ou calculées localement dans ces routines, via la variable-chapeau VEASSE (voir les §5.5.1 à §5.5.6) ;
- Récupération des différents coefficients multiplicateurs. En dynamique, selon les schémas en temps, il est nécessaire d'utiliser des coefficients multiplicateurs spécifiques devant chacune de ces quantités, on récupère ces coefficients via la routine d'accès NDYNRE (voir § 2.4.2.17) ;
- Construction d'un ou de deux seconds membres par combinaison linéaire (utilisation des routines standards vtaxy). Il y a deux seconds membres dans le cas du pilotage ;

Pour améliorer la lisibilité, on utilise des routines utilitaires standardisées pour regrouper les cas les plus fréquents.

Opérations	Routine
Calcul des composantes du vecteur second membre pour les chargements de type Dirichlet, fixes au cours du pas de temps, pour le cas normal et le cas piloté	nmasdi
Calcul des composantes du vecteur second membre pour les chargements de type Neumann, fixes au cours du pas de temps, pour le cas normal et le cas piloté	nmasfi
Calcul des composantes du vecteur second membre pour les chargements de type Neumann, variables (suiveurs) au cours du pas de temps, pour le cas normal (pas de cas piloté)	nmasva
Calcul des composantes du vecteur second membre pour les chargements spécifiques de la dynamique, variables (suiveurs) au cours du pas de temps, pour le cas normal (pas de cas piloté)	ndasva
Calcul des composantes du vecteur second membre pour les chargements spécifiques de la dynamique, calcul de l'accélération initiale, variables (suiveurs) au cours du pas de temps, pour le cas normal (pas de cas piloté)	nmacva

5.6 Résolution du système

La résolution se fait via l'intermédiaire de la routine nmresd, qui prend en entrée la matrice résultante assemblée (voir § 5.4) et les seconds membres idoines (deux seconds membres si on a du pilotage).

Opérations	Routine
Résolution du système	nmresd

Résolution du système sur les degrés de liberté physiques (appel à <code>resoud</code>)	<code>nmreso</code>
Résolution du système sur les degrés de liberté généralisés	<code>nmresg</code>

La routine de résolution va donc retourner un ou deux champs solutions `DEPSO1` et `DEPSO2`, stockés dans la variable-chapeau `SOLALG`.