
Opérateur CALCUL

1 But

Pour la mécanique :

- calculer les contraintes et les variables internes pour l'intégration d'une loi de comportement non-linéaire ;
- calculer les vecteurs élémentaires `vect_elem` des forces internes et nodales et les matrices élémentaires `matr_elem` d'une matrice tangente ;
- calculer les vecteurs élémentaires `vect_elem` des forces correspondant aux variables de commande.

Pour la thermique :

- calculer les vecteurs élémentaires `vect_elem` des résidus d'équilibre et les matrices élémentaires `matr_elem` d'une matrice de rigidité thermique;
- calculer les vecteurs élémentaires `vect_elem` des forces correspondant aux chargements thermiques non-linéaires.

Produit une structure de données de type `table_container`.

2 Syntaxe

```
table_container      = CALCUL
(
  ♦ MODELE           = mo,                [modele]
  ♦ CHAM_MATER       = chmat,            [cham_mater]
  ♦ CARA_ELEM        = carac,            [cara_elem]
  ♦ TABLE           = table,            [table_container]
  ♦ INCREMENT        = _F(
      ♦ LIST_INST = litps,                [listr8]
      ♦ NUME_ORDRE = nuini,              [I]
    ),
  ♦ PHENOMENE        = /'MECANIQUE'      [DEFAULT]
                          /'THERMIQUE'

Si PHENOMENE = 'MECANIQUE'
{
  ♦ OPTION           = /'COMPORTEMENT'    [DEFAULT]
                          /'MATR_TANG_ELEM'
                          /'FORC_INTE_ELEM'
                          /'FORC_NODA_ELEM'
                          /'FORC_VARC_ELEM_M'
                          /'FORC_VARC_ELEM_P'
  ♦ EXCIT            = _F(
      ♦ CHARGE       = chi,                [char_meca]
      ♦ FONC_MULT    = fi,                [fonction/formule]
    ),
  ♦ COMPORTEMENT    = _F(voir le document [U4.51.11]),
  ♦ SCHEMA_THM      = _F(voir le document [U4.51.11]),
  ♦ DEPL            = depl,                [cham_no]
  ♦ INCR_DEPL       = incdepl,            [cham_no]
  ♦ SIGM            = sigm,                [cham_elem]
  ♦ VARI            = vari,                [cham_elem]
  ♦ MODE_FOURIER    = nh,                  [I]
}
Si PHENOMENE = ' THERMIQUE '
{
  ♦ OPTION           = /' CHAR_THER_ELEM '
                          /'MATR_TANG_ELEM'
                          /'CHAR_EVOL_ELEM'
                          /'RESI_THER_ELEM'
  ♦ EXCIT            = _F(
      ♦ CHARGE       = chi,                [char_ther]
      ♦ FONC_MULT    = fi,                [fonction/formule]
    ),
  ♦ TEMP            = temp,                [cham_no]
  ♦ INCR_TEMP       = inctemp,            [cham_no]
  ♦ COMPORTEMENT    = _F(voir le document [U4.54.02]),
  ♦ PARM_THETA      = /theta,            [R]
                          /0.57,          [DEFAULT]
}

  ♦ INFO            = /1,                [DEFAULT]
                          /2,
)
)
```

3 Opérandes communs

3.1 Mot-clé PHENOMENE

◇ PHENOMENE = / 'MECANIQUE' [DEFAULT]
/ 'THERMIQUE'

Permet de choisir le phénomène qui sera calculé.

3.2 Mot-clé TABLE

◇ TABLE

Permet d'introduire une `table_container` non-vide pour compléter (avec le numéro d'ordre adéquat) avec les nouveaux concepts calculés dans l'opérande CALCUL.

Si la table contient déjà des champs pour le numéro d'ordre réclamé par le mot-clef INCREMENT/NUME_ORDRE, ces champs sont écrasés et une alarme est émise pour prévenir l'utilisateur.

3.3 Mot-clé MODELE

◇ MODELE = mo

Nom du concept définissant le modèle dont les éléments font l'objet du calcul.

3.4 Mot-clé CHAM_MATER

◇ CHAM_MATER = chmat

Nom du concept définissant le champ de matériau affecté sur le modèle mo.

3.5 Mot-clé CARA_ELEM

◇ CARA_ELEM = carac

Nom du concept définissant les caractéristiques des éléments de poutre, coques, etc...

3.6 Mot-clé INCREMENT

◇ INCREMENT

Définit les intervalles de temps pris dans la méthode incrémentale.

En mécanique, les instants ainsi définis n'ont de sens physique que pour des relations de comportement où le temps intervient explicitement (visco-élastiques ou visco-plastiques par exemple). Dans les autres cas, ils permettent seulement d'indicer les incréments de charge et de paramétrer l'évolution d'un éventuel champ de température.

3.6.1 Opérande LIST_INST

◇ LIST_INST = litps

Les instants de calcul sont ceux définis dans le concept litps par l'opérateur DEFI_LIST_REEL [U4.34.01].

3.6.2 Opérandes NUME_ORDRE

◇ NUME_ORDRE = nume

Permet de définir le numéro d'ordre (et donc l'instant) pour lesquelles seront calculées les grandeurs dans la `table_container`.

3.7 Opérande INFO

◇ INFO = inf

Permet d'effectuer dans le fichier message diverses impressions intermédiaires.

4 Opérandes pour la mécanique

4.1 Mot clé EXCIT

◇ EXCIT

Ce mot clé facteur permet de décrire à chaque occurrence une charge (solllicitations et conditions aux limites), et éventuellement un coefficient multiplicateur et/ou un type de charge.

Ce mot-clé est utile pour produire la matrice des conditions limites dualisées de Dirichlet qui sera intégrée dans le `matr_elem` produit par le calcul de la matrice tangente.

4.1.1 Opérande CHARGE

◆ CHARGE : ch_i

ch_i est le chargement mécanique (comportant éventuellement l'évolution d'un champ de température) précisé à la $i^{\text{ème}}$ occurrence de EXCIT.

4.1.2 Opérande FONC_MULT

◇ FONC_MULT : f_i

f_i est la fonction du temps multiplicatrice du chargement précisé à la $i^{\text{ème}}$ occurrence de EXCIT.

Le chargement et les conditions aux limites pour n occurrences du mot clé facteur EXCIT sont :

$$ch = \sum_{i=1}^n f_i \cdot ch_i$$

Pour les conditions de Dirichlet, bien entendu, seule la valeur imposée est multipliée par f_i .

Par défaut : $f_i=1$.

4.2 Opérande OPTION

◆ OPTION = /'COMPORTEMENT' [default]
/'MATR_TANG_ELEM'
/'FORC_INTE_ELEM'
/'FORC_NODA_ELEM'
/'FORC_VARC_ELEM_M'
/'FORC_VARC_ELEM_P'

Permet de spécifier ce que l'on calcule :

- 'COMPORTEMENT' intègre la loi de comportement et produit donc trois objets : `cham_elem` des contraintes, `cham_elem` des variables internes et un `cham_elem` comportant le code retour de la loi de comportement ;
- 'MATR_TANG_ELEM' calcule la matrice tangente cohérente (option `FULL_MECA`) et produit donc quatre objets : un `cham_elem` des contraintes, un `cham_elem` des variables internes, un `cham_elem` comportant le code retour de la loi de comportement et un `matr_elem` des matrices élémentaires tangentes ;
- 'FORC_INTE_ELEM' calcule le vecteur des forces internes après intégration de la loi de comportement (`RAPH_MECA` dans le langage Aster) et produit donc quatre objets : un `cham_elem` des contraintes, un `cham_elem` des variables internes, un `cham_elem` comportant le code retour de la loi de comportement et un `vect_elem` des vecteurs élémentaires des forces internes ;
- 'FORC_NODA_ELEM' calcule le vecteur des forces nodales à partir des contraintes aux points de Gauss et produit un `vect_elem` des vecteurs élémentaires des forces nodales.
- 'FORC_VARC_ELEM_M' calcule le vecteur des forces correspondant aux variables de commandes au temps précédent (donné par `LIST_INST`). Voir le paragraphe afférent dans la documentation théorique de `STAT_NON_LINE` [R5.03.01].
- 'FORC_VARC_ELEM_P' calcule le vecteur des forces correspondant aux variables de commandes au temps courant (donné par `LIST_INST`). Voir le paragraphe afférent dans la documentation théorique de `STAT_NON_LINE` [R5.03.01].

4.3 Mot clés DEPL/INCR_DEPL/SIGM/VARI

◇ DEPL = depl, [cham_no],
◇ INCR_DEPL = incdepl, [cham_no],
◇ SIGM = sigm, [cham_elem],
◇ VARI = vari, [cham_elem],

Permet d'introduire des champs d'entrées pour calculer les différents champs par la commande CALCUL :

- DEPL donne un champ de déplacement ;
- INCR_DEPL est l'incrément du champ de déplacement depuis le début du pas de temps ;
- SIGM donne un champ de contraintes ;
- VARI donne un champ de variables internes.

Remarques :

Il faut veiller à être cohérent entre le comportement demandé par `COMPORTEMENT` et la taille du champ des variables internes.

*Le champ des contraintes servant à calculer l'option `FORC_NODA_ELEM` n'est pas le même selon les calculs demandés. En effet, si on intègre la loi de comportement (options `COMPORTEMENT`, `MATR_TANG_ELEM`, `FORC_INTE_ELEM`), alors le champ de contraintes pris dans le calcul de l'option `FORC_NODA_ELEM` sera celui calculé **après** l'intégration du comportement. Dans ce cas, `SIGM` est le tenseur des contraintes **initiales** et ne sera pas celui employé dans le calcul de `FORC_NODA_ELEM`. Par contre, si seule l'option `FORC_NODA_ELEM` est demandée, alors on utilisera directement le champ des contraintes donné par `SIGM`.*

4.4 Opérande MODE_FOURIER

◇ MODE_FOURIER = nh

Entier positif ou nul indiquant l'harmonique de FOURIER sur laquelle on calcule le vecteur élémentaire pour un modèle 2D axisymétrique.

5 Opérandes pour la thermique

5.1 Mot clé EXCIT

◇ EXCIT

Ce mot clé facteur permet de décrire à chaque occurrence une charge (solicitations et conditions aux limites), et éventuellement un coefficient multiplicateur et/ou un type de charge.

Ce mot-clé est utile pour produire la matrice des conditions limites dualisées de Dirichlet qui sera intégrée dans le `matr_elem` produit par le calcul de la matrice de rigidité thermique.

5.1.1 Opérande CHARGE

◆ CHARGE : `chi`

Concept de type `charge` produit par `AFFE_CHAR_THER` ou par `AFFE_CHAR_THER_F` [U4.44.02].

Remarque importante :

Pour chaque occurrence du mot clé facteur EXCIT les différents concepts `char` utilisés doivent être construits sur le même modèle `mo`.

5.1.2 Opérande FONC_MULT

◇ FONC_MULT : `fi`

Coefficient multiplicatif fonction du temps (concept de type `fonction`, `nappe` ou `formule`) appliqué à la charge.

Remarque importante :

L'utilisation concomitante de FONC_MULT avec une charge contenant des chargements thermiques dépendant de la température est interdite ; c'est-à-dire pour des chargements de type ECHANGE_, RAYONNEMENT, SOUR_NL ou FLUNL.

5.2 Opérande OPTION

◆ OPTION = `/'CHAR_THER_ELEM'`
`/'MATR_TANG_ELEM'`
`/'CHAR_EVOL_ELEM'`
`/'CHAR_RESI_ELEM'`

Permet de spécifier ce que l'on calcule :

- `'CHAR_THER_ELEM'` calcule les `vect_elem` correspondant aux chargements thermiques non-linéaires (`SOURCE_NL`, `RAYONNEMENT` et `FLUX_NL`). Pour les chargements linéaires, il faudra utiliser `CALC_VECT_ELEM` ;
- `'MATR_TANG_ELEM'` calcule la matrice de rigidité thermique non-linéaire et produit donc les `matr_elem` des matrices élémentaires. Ces matrices comporte les termes volumiques de la forme variationnelle mais aussi les termes provenant de la contribution des chargements¹ : `ECHANGE`, `ECHANGE_PAROI`, `RAYONNEMENT`, `FLUX_NL` et `SOUR_NL`. Si les chargements comprennent des conditions de type Dirichlet (`AFFE_CHAR_THER/DDL_IMPO`), on a également les matrices de dualisation provenant des multiplicateurs de Lagrange ;
- `'CHAR_EVOL_ELEM'` calcule les `vect_elem` des vecteurs élémentaires correspondant à la résolution du problème transitoire en temps ;
- `'CHAR_RESI_ELEM'` calcule les `vect_elem` des vecteurs élémentaires correspondant au déficit d'équilibre des résidus pour les coefficients non-linéaires des paramètres thermiques (conductivité thermique par exemple).

1 Pour `FLUX_NL` et `SOUR_NL` seulement si les coefficients sont des fonctions

5.3 Mot clés TEMP/ INCR_TEMP

◇ TEMP = temp, [cham_no],
◇ INCR_TEMP = inctemp, [cham_no],

Permet d'introduire des champs d'entrées pour calculer les différents champs par la commande CALCUL :

- TEMP donne un champ de température;
- INCR_TEMP est l'incrément du champ de température depuis le début du pas de temps ;

5.4 Opérande PARM_THETA

◇ PARM_THETA = theta

L'argument `theta` est le paramètre de la théta-méthode appliquée au problème évolutif. Il doit être compris entre 0 (méthode explicite) et 1 (méthode totalement implicite). En l'absence, du mot clé, la valeur utilisée est $\theta=0.57$, un peu supérieure à $\theta=0.5$ correspond au schéma de Crank-Nicholson. L'incidence du choix de `theta` sur la stabilité de la méthode est détaillée dans [R5.02.02].

6 Usage de CALCUL et des table_container

CALCUL ne produit qu'une table_container dans laquelle est stockée pour chaque numéro d'ordre un ou plusieurs champs (contraintes, variables internes, vecteurs élémentaires des forces internes, matrices élémentaires de la matrice tangente).

Pour extraire ces champs, il convient d'utiliser la commande EXTR_TABLE. Par exemple, si l'on veut le champ des contraintes issu de la commande CALCUL, on fera :

```
CONT=CALCUL (OPTION= ('COMPORTEMENT', 'FORC_INTE_ELEM', 'MATR_TANG_ELEM'),
             MODELE=MO,
             CHAM_MATER=CHMAT,
             INCREMENT=_F (LIST_INST=LIST,
                           NUME_ORDRE=1),
             EXCIT=_F (CHARGE=CHARGE),
             DEPL=U,
             INCR_DEPL=DU,
             SIGM=SIGP,
             VARI=VARIP,
             COMPORTEMENT=_F (RELATION='VMIS_ISOT_LINE',),
             INFO=2,);

SIGM=EXTR_TABLE (TYPE_RESU='CHAM_GD_SDASTER',
                 TABLE=CONT,
                 NOM_PARA='NOM_SD',
                 FILTRE=_F (NOM_PARA='NOM_OBJET',
                           VALE_K='SIEF_ELGA'),)
```

Pour calculer le second membre des forces extérieures ou d'autres quantités (comme les matrices masses), on peut utiliser les commandes CALC_VECT_ELEM ou CALC_MATR_ELEM. Les matr_elem ou les vect_elem peuvent être assemblés via les commandes ASSE_VECTEUR et ASSE_MATRICE.

Il convient de noter que les MATR_ELEM de rigidité produits par CALCUL contiennent aussi la contribution issue de la dualisation des conditions limites de Dirichlet (EXCIT).

Un exemple d'usage de CALCUL pour la mécanique est disponible dans le cas-test pynl01a.