Opérateur CALC_ERREUR

1 But

Créer ou compléter un résultat en calculant des champs par élément d'erreur de discrétisation.

Remarque : CALC_ERREUR ne peut pas être utilisé sur plusieurs processeurs.

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

Table des Matières

1 But....1
2 Syntaxe....3
2.1 Opérandes RESULTAT/MODELE/CHAM_MATER/CARA_ELEM/EXCIT/ SOLVEUR....5
2.1.1 Opérandes RESULTAT....5
2.1.2 Opérandes MODELE / CHAM_MATER / CARA_ELEM....5
2.1.3 Mot clé EXCIT....5
2.1.4 Mot clé SOLVEUR....5
2.2 Sélection des numéros d'ordre....5
2.3 Opérandes pour les options mécaniques....6
2.3.1 Options de calcul d'indicateurs d'erreur....6
2.4 Opérandes pour les options thermiques....9
2.4.1 Opérande OPTION....9
2.5 Opérande TITRE....9

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

2 Syntaxe

```
resu   [*] = CALC_ERREUR

          (  ◊  reuse = resu,
             ◊  MODELE =            mo,                          [modele]
             ◊  CHAM_MATER =        chmater,                     [cham_mater]
             ◊  CARA_ELEM =         carac,                       [cara_elem]
             ◊  SOLVEUR = _F ( voir le document [U4.50.01] ),
             ◊  EXCIT = _F   (      ♦  CHARGE = l_charge,        [l_char_meca]
                                    ◊  FONC_MULT = fm,           [fonction]
                                )
             ◊  #  Sélection des mailles concernées par le calcul
                /  TOUT =    'OUI',                               [DEFAUT]

             ♦  #  Sélection des numéro d'ordre :
                /  TOUT_ORDRE =     'OUI',
                /  NUME_ORDRE =     l_nuor ,                     [l_I]
                /  LIST_ORDRE =     l_nuor ,                     [listis]
                /  NUME_MODE  =     l_numo ,                     [l_I]
                /  NOEUD_CMP  =     l_nomo ,                     [l_K16]
                /  NOM_CAS    =     nocas  ,                     [K16]
                /  ♦  /    INST =       l_inst ,                [l_R]
                      /  FREQ =         l_freq ,                 [l_R]
                      /  LIST_INST =    l_inst ,                 [listr8]
                      /  LIST_FREQ =    l_freq ,                 [listr8]
                   ◊  |  P RECISION =  / prec,
                                       / 1.0E-3,                [DEFAUT]
                      |  CRITERE =     / 'RELATIF',             [DEFAUT]
                                       / 'ABSOLU' ,

      #   options mécaniques
             ♦  RESULTAT =   resu,
                   ♦  OPTION   =    |  'SIZ1_NOEU'
                                    |  'ERZ1_ELEM'
                                    |  'SIZ2_NOEU'
                                    |  'ERZ2_ELEM'
                                    |  'ERME_ELEM'
                                    |  'ERME_ELNO'
                                    |  'ERME_NOEU'
                                    |  'QIZ1_ELEM'
                                    |  'QIZ2_ELEM'
                                    |  'QIRE_ELEM'
                                    |  'QIRE_ELNO'
                                    |  'QIRE_NOEU'
                                    |  'SING_ELEM'
                                       ♦  PREC_ERR  =  err    [R]
                                       ◊  TYPE_ESTI =  /  'ERME_ELEM',
                                                       /  'ERZ1_ELEM',
                                                       /  'ERZ2_ELEM',
                                                       /  'QIRE_ELEM',
                                                       /  'QIZ1_ELEM',
                                                       /  'QIZ2_ELEM',

      #  options thermiques
             ♦  RESULTAT  =  resu,                          /  [evol_ther]
             ♦  OPTION    =  |  'ERTH_ELEM',
                             |  'ERTH_ELNO',
```


Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

```
                                  | 'ERTH_NOEU',

                ◊  TITRE  = titre   ,                                [l_Kn]
                ◊  INFO   =  /  1,                                   [DEFAUT]
                             /  2,

        );
```


Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

2.1 Opérandes RESULTAT/MODELE/CHAM_MATER/CARA_ELEM/EXCIT/ SOLVEUR

2.1.1 Opérandes RESULTAT

♦ RESULTAT = resu

Nom de la structure de données résultat à enrichir. Cet argument peut être le même que celui utilisé pour le concept enrichi par l'opérateur, ou un nom différent, ce qui créera une nouvelle structure de données résultat (voir par exemple le test SSLS504 [V3.03.504].

Remarque :

Dans la majorité des situations, la structure de données resu contient toutes les informations nécessaires au calcul des options : le modèle, le champ de matériau, les caractéristiques élémentaires, les chargements. Les mots-clés MODELE, CHAM_MATER, CARA_ELEM et EXCIT sont donc inutiles.

2.1.2 Opérandes MODELE / CHAM_MATER / CARA_ELEM.

◊ MODELE = mo

Nom du modèle sur lequel sont calculés les efforts, les contraintes, les déformations, …. Il est optionnel car peut être extrait du résultat.

◊ CHAM_MATER = chmater

Champ de matériau associé au modèle mo. Ce mot-clé est optionnel, et ne doit être fourni que dans des cas exceptionnels (modification volontaire du matériau par exemple).

◊ CARA_ELEM = carac

Caractéristiques élémentaires associées au modèle mo, s'il contient des éléments de structure ou si les éléments iso-paramétriques sont affectés par un repère local d'anisotropie. Ce mot-clé est optionnel.

2.1.3 Mot clé EXCIT

Ce mot clé facteur (optionnel) permet de spécifier les chargements thermiques ou mécaniques à utiliser pour le calcul des options, en lieu et place de ceux qui ont servi dans le calcul de la structure de données spécifiée sous le mot clé RESULTAT.

La définition de ce mot-clé est identique à celle des commandes qui ont construit la structure de données resu : voir les commandes MECA_STATIQUE [U4.51.01], STAT_NON_LINE [U4.51.03], DYNA_LINE_HARM [U4.53.11], et DYNA_LINE_TRAN [U4.53.02].

2.1.4 Mot clé SOLVEUR

La syntaxe de ce mot clé commun à plusieurs commandes est décrite dans le document [U4.50.01].

Remarque :

Dans la commande, le solveur n'est utilisé que pour l'estimateur d'erreur 'ZZ1'. Les solveurs autorisés sont 'GCPC', 'LDLT', 'MULT_FRONT' (défaut), *'MUMPS'* et *'PETSC'.*

2.2 Sélection des numéros d'ordre

L'emploi des mots-clés TOUT_ORDRE, NUM_ORDRE, INST,FREQ est décrit dans le document [U4.71.00].

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

2.3 Opérandes pour les options mécaniques

2.3.1 Options de calcul d'indicateurs d'erreur

| 'ERZ1_ELEM' (respectivement 'ERZ2_ELEM')

Calcul de l'estimateur d'erreur de ZHU-ZIENKIEWICZ (élasticité linéaire 2D et 3D pour la version 1, élasticité linéaire 2D pour la version 2) à partir de l'option 'SIZ1_NOEU' (respectivement 'SIZ2_NOEU'). Si ce dernier champ n'existe pas dans resu, il est automatiquement construit au préalable, voir [R4.10.01].

| 'ERME_ELEM'

Estimateur d'erreur en résidu en mécanique [R4.10.02] et en hydro-mécanique stationnaire [R4.10.04] calculé par élément.

Conseils d'utilisation de l'option ERME_ELEM

Pour bien effectuer l'estimation d'erreur du calcul mécanique (dans les limites théoriques de la formule mise au point dans le cadre elliptique avec frontière régulière....), il faut l'effectuer sur tout le modèle :

TOUT = 'OUI' (valeur par défaut)
A noter que le modèle n'est pas forcément défini sur toute la géométrie.

On a également besoin du calcul des contraintes aux nœuds (confer [R3.06.03]), par SIGM_ELNO. Si ce champ de contraintes aux nœuds n'existe pas déjà dans la structure de données resultat, il est automatiquement calculé dans CALC_ERREUR.

- En ce qui concerne les chargements :
  Il faut fournir à CALC_ERREUR les chargements utilisés pour le calcul mécanique :
  EXCIT=_F(CHARGE=....)
  en prenant bien garde aux règles de surcharges différentes pour le solveur mécanique et pour cette option de CALC_ERREUR.
  Ainsi, le calcul mécanique (MECA_STATIQUE, STAT_NON_LINE ...) agrège les conditions aux limites alors que le calcul de l'erreur ne va retenir, pour un type de conditions aux limites donné, que la dernière listée dans le EXCIT de CALC_ERREUR. L'ordre a donc une importance cruciale ! Il ne faut donc, pour un type de conditions aux limites, qu'une seule occurrence dans les AFFE_CHAR ...

  On ne tient compte que des chargements de type : PESANTEUR, ROTATION, FORCE_INTERNE, PRES_REP, FORCE_FACE, FORCE_ARETE.
  Seules les trois derniers peuvent être variables.

  Il est conseillé d'utiliser des éléments finis d'ordre deux dans le cas de forces volumiques, sinon ce terme est très mal calculé puisque la divergence du tenseur des contrainte $\mathrm{div}(\sigma)$ est quasi nulle !

  Pour prendre en compte l'erreur relative à une condition aux limites nulle, il faut l'imposer en tant que fonction via un AFFE_CHAR_MECA_F. Via une constante, elle ne sera pas prise en compte.

- Maillage :

  Le maillage doit être triangulaire, quadrangle, tétraédrique ou hexaédrique, avec aucun GROUP_NO si on veut remailler ensuite via HOMARD.

- En 2D, il ne prend en compte que les erreurs sur (et entre) les éléments isoparamétriques SEG2/3, TRIA3/6, QUAD4/8/9.
  En 3D, idem avec FACE3/4/6/8/9, TETRA4/10, PENTA6/13/15, HEXA8/20/27 et PYRAM5/13 mais pas les éléments de structure (coque, plaque, poutre...).

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

- D'autre part, il faut veiller à ne pas intercaler de segments entre deux quadrangles ou deux triangles (respectivement QUAD ou triangle entre deux HEXA), sinon on ne peut pas calculer le terme de saut relatif à ce voisinage. À la place, on s'enquiert (à tort) d'une éventuelle condition aux limites.

| 'ERME_ELNO'

Estimateur d'erreur en résidu calculé aux nœuds par élément [R4.10.02].

| 'ERME_NOEU'

Estimateur d'erreur en résidu calculé aux nœuds.

| 'QIZ1_ELEM' (respectivement 'QIZ2_ELEM')

Estimateur d'erreur en quantités d'intérêt basé sur la méthode de Zhu-Zienkiewicz (élasticité linéaire 2D).

| 'QIRE_ELEM'

Estimateur d'erreur en quantités d'intérêt basé sur les résidus en mécanique, calculé par élément.

Conseil d'utilisation des options 'QIZ1_ELEM', 'QIZ2_ELEM', 'QIRE_ELEM'

Le domaine d'utilisation des options 'QIZ1_ELEM' et 'QIZ2_ELEM' est le même que pour les options 'ERZ1_ELEM' et 'ERZ2_ELEM' et celui de l'option 'QIRE_ELEM' est le même que celui de l'option 'ERME_ELEM' en mécanique.

Il est nécessaire de définir, en plus du problème initial (problème primal), un second problème (problème dual). Ce problème définit de manière sous-jacente la quantité d'intérêt sur laquelle on veut obtenir une erreur. À ce jour, seulement deux quantités d'intérêt sont disponibles :
•Moyenne d'une composante du déplacement ;
•Moyenne d'une composante du tenseur des contraintes.

Le problème dual diffère du problème primal **uniquement** par son chargement (celui-ci étant la quantité d'intérêt), **les conditions de bords restant les mêmes**. Ainsi le chargement à imposer sur le sous-domaine voulu, par le biais de la commande AFFE_CHAR_MECA, est :
•FORCE_INTERNE, effort unitaire pour la composante voulue du déplacement ;
•PRE_EPSI, déformation unitaire pour la composante voulue du tenseur des contraintes.

Une fois les deux problèmes résolus, on calcule pour chacun des deux l'estimateur d'erreur « classique » désiré (le même pour les deux…) et enfin il faut définir un nouveau CALC_ERREUR avec une des options de calcul d'estimateur d'erreur en quantité d'intérêt.

Un exemple d'utilisation du calcul de l'estimateur en quantités d'intérêt basé sur les résidus peut être trouvé dans le test sslv113c et sslv113d.

| 'QIRE_ELNO'

Estimateur d'erreur en quantités d'intérêt basé sur les résidus calculés aux nœuds par élément.

| 'QIRE_NOEU'

Estimateur d'erreur en quantités d'intérêt basé sur les résidus calculés aux nœuds.

| 'SIZ1_NOEU'

Calcul des contraintes aux nœuds (élasticité linéaire 2D et 3D) ; les contraintes sont obtenues par un lissage global (au sens des moindres carrés) des contraintes aux points de GAUSS. Voir Estimation d'erreur par lissage des contraintes [R4.10.01].

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

| 'SIZ2_NOEU'
Calcul des contraintes aux nœuds (élasticité linéaire 2D) ; les contraintes sont obtenues par un lissage local à un patch d'éléments (au sens des moindres carrés) des contraintes aux points de GAUSS, voir [R4.10.01].

| 'SING_ELEM'
♦ PREC_ERR = err [R]
◊ TYPE_ESTI = 'ERME_ELEM',
'ERZ1_ELEM',
'ERZ2_ELEM',
'QIRE_ELEM',
'QIZ1_ELEM',
'QIZ2_ELEM',
Cette option ([R4.10.04]) vise à améliorer le traitement des singularités dans les stratégies d'adaptation de maillage (en l'occurrence avec HOMARD). En pratique les indicateurs d'erreur sont élevés dans les zones singulières si bien que rapidement seules les zones singulières sont raffinées et masquent donc les autres zones sensibles (zones à fort gradient) que l'on souhaiterait raffiner.
Cette option est un champ constant par élément et comporte trois composantes :
1) 'DEGRE' qui correspond à la détection des éléments finis singuliers. En pratique, cette composante vaut le degré d'interpolation des éléments finis choisis si l'élément fini n'est connecté à aucune singularité et vaut l'ordre de la singularité si l'élément fini est connecté à un nœud considéré par la méthode comme singulier (par exemple pour un élément voisin de la pointe d'une fissure, cette valeur vaut 0.5).
2) 'RAPPORT' qui correspond à la carte de modification de taille des éléments finis en cas de remaillage pour une erreur globale donnée. Cette composante est égale au rapport entre la nouvelle taille de l'élément fini et la taille actuelle.
3) 'TAILLE' qui correspond à la carte des nouvelles tailles des éléments finis en cas de remaillage pour une erreur globale donnée. Cette donnée est directement utilisable par certains mailleurs (GMSH par exemple)

Cette option peut s'utiliser selon deux schémas :
- Les éléments finis considérés comme « singuliers » par la méthode peuvent être exclus du processus de découpage (en leur affectant par exemple une erreur nulle),
- la nouvelle taille des éléments finis est donnée à un remailleur (en l'occurrence HOMARD pour Code_Aster) pour que celui-ci construise le nouveau maillage en respectant au mieux cette nouvelle carte de taille. Actuellement, le logiciel HOMARD découpe une fois l'élément (par exemple en 2D, un triangle est divisé en 4 mais pas plus). Pour continuer le découpage, il faut faire appel de nouveau à HOMARD. Une évolution est donc à prévoir pour qu'on puisse diviser plusieurs fois un élément et donc respecter au mieux la carte de taille du nouveau maillage.

Le calcul de cette option nécessite, au préalable, le calcul d'un indicateur d'erreur (c'est la composante absolue qui est utilisée et c'est codé dans le source d'Aster) et de l'énergie de déformation totale. Dans le cas où l'une de ces options n'est pas calculée, un message d'alarme est émis et l'option 'SING_ELEM' n'est pas calculée.

- Pour l'indicateur d'erreur, quatre choix sont possibles :
  - 'ERME_ELEM' pour l'indicateur en résidus,
  - 'ERZ(1 ou 2)_ELEM_SIGM' pour l'indicateur de Zhu-Zienkiewicz (versions 1 ou 2),
  - 'QIRE_ELEM' pour l'indicateur en quantité d'intérêt basé sur les résidus,
  - 'QIZ(1 ou 2)_ELEM_SIGM' pour l'indicateur en quantité d'intérêt basé sur Zhu-Zienkiewicz (versions 1 ou 2),
  - Si les six indicateurs sont présents et que rien n'est précisé avec 'TYPE_ESTI', l'indicateur en résidu 'ERME_ELEM' est choisi par défaut (message d'alarme émis). Si les deux indicateurs de Zhu-Zienkiewicz sont présents, on choisit 'ERZ1_ELEM'.

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

- Pour l'énergie de déformation totale, on utilise :
  - Avec STAT_NON_LINE : 'ETOT_ELEM' qui est l'énergie de déformation totale sur un élément fini (valable pour un comportement élastique et pour un comportement élastoplastique 'VMIS_ISOT_XXX').
  - Avec MECA_STATIQUE : 'EPOT_ELEM' qui est l'énergie potentielle de déformation élastique sur un élément fini et intégrée à partir des déplacements et de la température (valable uniquement pour un comportement élastique).

L'utilisateur doit également renseigner le mot-clé 'PREC_ERR' (un message fatal est émis en cas d'absence) qui permet de calculer la précision souhaitée sur l'erreur globale pour déterminer la carte de modification de taille (cf [R4.10.04]). La valeur de 'PREC_ERR' est comprise strictement entre 0 et 1 (un message fatal est émis si cette condition n'est pas vérifiée).

Le périmètre d'utilisation est le même (mais plus réduit) que celui de l'indicateur d'erreur choisi à savoir :
- Pour l'indicateur en résidu : éléments finis des milieux continus en 2D (triangles et quadrangles) ou 3D (uniquement les tétraèdres) pour un comportement élastoplastique,
- Pour l'indicateur de Zhu-Zienkiewicz : éléments finis des milieux continus en 2D (triangles et quadrangles) pour un comportement élastique.

En toute rigueur, le calcul de l'ordre de la singularité est obtenu à partir de l'énergie théorique en pointe de fissure, équation valable uniquement en élasticité. L'utilisation de cette option en élastoplasticité est donc à manipuler avec prudence.

| 'SING_ELNO'
Détection des singularités et carte de modification de tailles aux nœuds par élément. Le calcul préalable de 'SING_ELEM' est donc nécessaire. Si 'SING_ELEM' est absent, un message d'alarme est émis et l'option 'SING_ELNO' n'est pas calculée.

2.4 Opérandes pour les options thermiques

2.4.1 Opérande OPTION

| 'ERTH_ELEM'
| 'ERTH_ELNO'
| 'ERTH_NOEU'

Estimateurs d'erreur en résidu en thermique calculés à partir des flux aux nœuds [R4.10.03] . Si le calcul des flux aux nœuds n'est pas préalablement effectué dans la commande CALC_CHAMP via FLUX_ELNO, il est automatiquement réalisé dans CALC_ERREUR.
Le mot-clé INFO procure tous les affichages intermédiaires du calculs (connectivités, normales, diamètres, valeurs des champs, jacobien).
L'option 'ERTH_ELNO' permet de ramener le champ par élément ERTH_ELEM a un champ aux nœuds par élément, ce qui permet de faire des relevés de valeurs ou des impressions / visualisations.
L'option 'ERTH_NOEU' permet de transformer le champ aux nœuds par élément en un champ aux nœuds.

2.5 Opérande TITRE

◊ TITRE = titre

Titre que l'on veut donner au résultat de la commande [U4.02.01].

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)