



HAL
open science

Adaptation de maillage anisotrope : étude, construction d'estimateurs d'erreur et raffinement hexaédrique.

Raphaël Kuate

► **To cite this version:**

Raphaël Kuate. Adaptation de maillage anisotrope : étude, construction d'estimateurs d'erreur et raffinement hexaédrique.. Mathématiques [math]. Université Pierre et Marie Curie - Paris VI, 2008. Français. NNT: . tel-00363511

HAL Id: tel-00363511

<https://theses.hal.science/tel-00363511v1>

Submitted on 23 Feb 2009

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

**Adaptation de maillage anisotrope : Etude, construction
d'estimateurs d'erreur et raffinement hexaédrique.**

THÈSE DE DOCTORAT

présentée et soutenue publiquement le 3 décembre 2008 pour l'obtention du titre de

Docteur de l'Université Pierre et Marie Curie – Paris VI

Spécialité Mathématiques Appliquées

par

RAPHAËL KUATE

Composition du jury

Directeur de thèse : Frédéric HECHT

Rapporteurs : Alain DERVIEUX
Jacques-Hervé SAIAC

Examineurs : Christine BERNARDI
Paul-Louis GEORGE
Bijan MOHAMMADI
Serge NICAISE

Laboratoire Jacques-Louis Lions – UMR 7598



Remerciements

Je tiens à remercier en premier lieu Fabrice Béthuel, Yvon Maday, Edwige Godlewski, Frédéric Hecht ainsi que tous leurs collègues du laboratoire Jacques-Louis Lions pour la confiance qu'il m'ont accordée, en me permettant d'obtenir un financement sans lequel cette thèse n'aurait pas eue lieu.

J'aimerais exprimer ma reconnaissance envers mon directeur de thèse Frédéric Hecht pour tout l'encadrement qu'il m'a apporté et pour tout ce que j'ai pu apprendre auprès de lui durant ces trois années. Grâce à sa générosité, sa bonne humeur et surtout la confiance et la liberté qu'il a accordées à mes balbutiements, j'ai pu découvrir et faire mes premiers pas dans le monde de la recherche. Merci également à Olivier Pironneau pour toute sa bienveillance et son aide durant cette thèse.

J'adresse des remerciements tout particuliers à Jacques-Hervé Saiac et Alain Dervieux pour avoir accepté de rapporter cette thèse. L'intérêt qu'ils ont porté à mes travaux ainsi que leurs critiques ont permis d'améliorer ce mémoire.

Je remercie Christine Bernardi, Paul-Louis George, Bijan Mohammadi et Serge Nicaise pour l'honneur qu'ils m'ont fait en acceptant d'examiner ce rapport.

Toute ma gratitude envers mes camarades, stagiaires et permanents du LJLL pour l'intérêt qu'ils m'ont porté durant ces années de thèse et pour les échanges scientifiques enrichissants que nous avons eues. Merci en particulier à Joëlle et Paulo pour leur gentillesse et leur disponibilité. Alexandra C., Frédéric L. et Laurent pour leur sympathie non bornée, ainsi qu'à Benjamin A., Driss, Nicole, et Rachida. Je pense à Alban, Nicolas R. et Vincent pour nos belles discussions. Je n'oublie pas Alexandra F., Antoine, Baver, Benjamin B., Cuc, Emmanuel, Evelyne, Hamdi, Hyam, Jean Baptiste, Jean François, Khashayar, Kirill, Martin, Maya, Mouna, Nicolas S., Radu, Sonia, Thomas, Ulrich... j'en oublie certainement.

Un grand merci à tous les membres du personnel administratif du laboratoire Jacques-Louis Lions pour toute leur aide ô combien précieuse. En particulier à mesdames D. Boulic, S. Lounici, L. Ruprecht et messieurs C. David, H. Esser.

À ma famille, merci pour tout.
À André, je ne te remercierai jamais assez pour cette perche que tu m'as tendue.

Table des matières

Résumé	1
Abstract	2
Notations	3
1 Introduction	5
1.1 Présentation générale	5
1.2 Etat de l'art	7
1.2.1 Les indicateurs d'erreur	8
1.2.2 Modifications de maillage	9
1.2.3 Le logiciel Freefem++	11
1.3 Notre apport	12
1.3.1 Reconstruction de la matrice hessienne	12
1.3.2 Généralisation de la construction de métriques pour d'autres es- timations d'erreur d'interpolation	13
1.3.3 Reconstruction de dérivées troisièmes	14
1.3.4 Estimation de l'erreur d'interpolation	15
1.3.5 Modifications locales de maillages hexaédriques	15
I Métriques et estimateurs d'erreur	17
2 Méthodes de reconstruction de la matrice hessienne	19
2.1 Introduction	21
2.2 Reconstruction par moindres carrés	22
2.3 Approximation locale par un polynôme du second degré	25
2.4 Méthode basée sur la formule de Green	26
2.5 Nouvelle approche	28
2.5.1 Cas des éléments finis P_1	31
2.6 Résultats numériques	32
2.6.1 En dimension deux avec Freefem++	32
2.6.2 En dimension trois d'espace	48
2.7 Conclusion	48

3	Métriques pour d'autres estimations d'erreur d'interpolation	49
3.1	Introduction	52
3.2	Definitions	54
3.3	The problem description	57
3.4	Resolution	59
3.4.1	Algebraic resolution	59
3.4.2	Algorithm order	61
3.4.3	Convergence of the approximation	61
3.5	Validation	62
3.5.1	Some examples	62
3.5.2	Test with Freefem++	63
3.6	Conclusion	71
4	Reconstruction de dérivées troisièmes	73
4.1	Introduction	75
4.2	Approximation de dérivées troisièmes par la méthode des moindres carrés	75
4.2.1	Exemple	77
4.2.2	Application à l'adaptation de maillage	84
4.3	Conclusion	87
5	Estimations d'erreur d'interpolation de Lagrange	89
5.1	Introduction	91
5.2	Interpolation P_{n-1} Lagrange d'un polynôme de degré n	91
5.2.1	En dimension deux d'espace	95
5.2.2	En dimension trois d'espace	96
5.3	Estimation de l'erreur d'interpolation de Lagrange sur un simplexe	97
5.3.1	Evaluation de l'estimateur	100
5.4	Conclusion	104
6	Tests numériques et comparaisons	105
6.1	Introduction	107
6.2	Génération de métriques et calcul de la matrice hessienne	107
6.2.1	Exemple	108
6.3	Dérivées secondes et troisièmes	113
6.4	Conclusion	117
II	Maillages hexaédriques et quadrilatéraux	119
7	Transformations Locales de Maillages Hexaédriques	121
7.1	Introduction	124
7.1.1	Definitions and notations	124
7.2	Quad mesh and local modifications	125
7.3	Hexahedral meshing and local modifications	128

7.3.1	Elementary hex meshes local modifications	129
7.4	Flipping quad and hex meshes	133
7.4.1	Definition	134
7.5	Some new hex mesh local modifications	139
7.6	Conclusion	140
Conclusion et perspectives		145
Table des Figures		148
Bibliographie		151

Résumé

Cette thèse est consacrée aux études théoriques et numériques des problèmes suivants qui sont liés à l'adaptation de maillage anisotrope :

Les métriques et estimateurs d'erreur,

les modifications locales de maillages hexaédriques et quadrilatéraux.

Nous procédons à la mise en oeuvre de nouveaux algorithmes, schémas numériques et méthodes dans ces deux parties ; notamment en codant dans le logiciel *Freefem++* de nouvelles méthodes de reconstruction d'estimateurs d'erreur et de construction de métriques. Nous étudions trois des méthodes de reconstruction de la matrice hessienne, estimateur d'erreur d'interpolation de Lagrange à l'ordre deux qui sont :

La reconstruction de la matrice hessienne par moindres carrés,

la méthode basée sur la formule de Green,

l'approximation locale de la fonction par un polynôme du second degré.

Nous proposons une nouvelle approche basée sur l'interpolation polynomiale locale par maille et un schéma aux différences finies. Nous établissons des propriétés de stabilité et de convergence ainsi que des résultats numériques en dimension deux. Nous étudions aussi la reconstruction des dérivées troisièmes par moindres carrés. Nous proposons également de nouvelles estimations d'erreur d'interpolation de Lagrange grâce à un développement de Taylor à l'ordre trois sans calcul direct de dérivées troisièmes. Il est aussi proposé un algorithme de construction de métriques à partir d'une estimation d'erreur pouvant être représentée localement par une courbe fermée, applicable à l'erreur d'interpolation polynomiale d'ordre supérieur.

Enfin, nous proposons de nouvelles façons de raffiner ou dé-raffiner localement les maillages hexaédriques. Nous faisons une étude des techniques existantes en proposant de nouvelles caractérisations des transformations locales de maillages quadrilatéraux et hexaédriques.

Mots clés : adaptation de maillage anisotrope, estimateurs d'erreur, métriques, interpolation de Lagrange, maillages hexaédriques et quadrilatéraux.

Abstract

During this thesis we have investigate two important fields of the anisotropic meshes adaptation problems which are:

- Metrics and errors estimators,
- the locals modifications of hexahedral and quadrilateral meshes.

We propose new algorithms, methods and numerical schemes within this two parts. We add new methods of building errors estimators and metrics in the software *Freefem++*. We have work about some hessian matrix recovery techniques, as second order error estimator of the Lagrange polynomial interpolation which are:

- The last square recovery method,
- the method based on the Green formula,
- the local approximation of the function by a second degree polynomial.

We propose a new recovery technique which uses a local interpolation inside each element of the mesh and a finite difference scheme. we show some properties like consistence and convergence of all these methods and numerical results in dimension two of the space. We study the third order derivatives recovery using the least square technique. We also propose a new calculation of the Lagrange interpolation error estimator. This result uses a Taylor development of the third order without any direct calculus of third other derivatives. We also propose an algorithm for building metrics using any given error estimation that can be represented by a close curve.

We finally propose a new set of local hex meshes transformations and a study about the existing local quad and hex meshes modifications by showing some new properties.

Key words : anisotropic mesh adaptation, metrics and error estimators, Lagrange interpolation, hexahedral and quadrilateral meshes.

Notations

Nous présentons ici les principales notations qui seront utilisées dans chacune des parties de ce rapport.

Première partie

Ω	Domaine de \mathbb{R}^d $d = 2, 3$.
Ω_h, \mathcal{T}	Maillage de \mathbb{R}^d
$C^m(\Omega)$	L'espace vectoriel des fonctions définies et continues sur Ω et dont les dérivées jusqu'à l'ordre n sont continues
$L^1(\Omega)$	L'espace des fonctions intégrables sur Ω
$L^2(\Omega)$	L'espace des fonctions de carré intégrable sur Ω
$H^n(\Omega)$	L'espace des fonctions de $L^2(\Omega)$ dont les dérivées partielles jusqu'à l'ordre n appartiennent à $L^2(\Omega)$
$ \cdot $	Valeur absolue
$ \cdot _{l,T}$	Semi-norme H^l sur l'ensemble T
$\ \cdot\ $	Norme
$\ \cdot\ _a$	Norme dans l'espace a
$supp f$	Support de la fonction f
u_h	Valeur approchée de la fonction u
$H_{u(z)}$	Matrice hessienne de la fonction u au point z
$H_{ij_u(z)}$	Composante ij de la matrice hessienne de la fonction u au point z
$\mathcal{H}_{u(z)}$	Valeur approchée de la matrice hessienne de la fonction u au point z
\mathcal{M}	Métrique
$\langle \cdot, \cdot \rangle$	Produit scalaire de \mathbb{R}^d
∇u	Gradient de la fonction u
${}^t A$	Transposée de la matrice A
D^m	Opérateur de dérivation d'ordre supérieur
$\mathcal{I}u$	Interpolée de la fonction u
\mathcal{I}_s	Isométrie
P_k	L'espace vectoriel des polynômes de degré k

$$D^k u(a) \cdot (\xi)^k = \sum_{\alpha_1 + \dots + \alpha_d = k} \frac{\partial^k u}{\partial x_1^{\alpha_1} \dots \partial x_d^{\alpha_d}}(a) \xi_1^{\alpha_1} \dots \xi_d^{\alpha_d}; \xi = \begin{pmatrix} \xi_1 \\ \vdots \\ \xi_d \end{pmatrix}, a \in \mathbb{R}^d$$

Deuxième partie

P	The number of polyhedrons
F	The number of faces
V	The number of vertices
V_j^k	The number of vertices with j internal edges and k edges on the boundary
E	The number of edges
$\overset{\circ}{W}$	W of the interior of the mesh
\bar{W}	W on the boundary of the mesh

Chapitre 1

Introduction

L'objectif principal de cette thèse est l'étude de certains problèmes relatifs à l'adaptation de maillage anisotrope, indépendamment des équations aux dérivées partielles. Le second objectif est la description des opérations de raffinement local de maillages hexaédriques.

L'adaptation de *maillage anisotrope* est un procédé de modification de *maillage* où la taille des mailles est non uniforme en espace et en direction (c'est-à-dire que les éléments peuvent être étirés dans une direction particulière, en fonction des besoins de l'utilisateur).

Un *maillage* est un support géométrique de données qui permet par exemple : soit de définir un objet, soit de résoudre des équations aux dérivées partielles par des méthodes d'éléments finis, volumes finis, Galerkin discontinu ...

1.1 Présentation générale

Le problème d'adaptation de maillage peut être subdivisé en deux parties :

- la définition des critères d'adaptation,
- la génération ou modification [HG99, LB96, FG99] de maillages de façon à respecter localement des critères d'adaptation.

L'adaptation de maillage dans son principe consiste à trouver le maillage garantissant un meilleur critère à moindre coût (i.e minimiser un critère pour un nombre de mailles fixé ; ou encore minimiser le nombre de mailles pour un critère donné).

A ce jour, deux méthodes pour générer des maillages anisotropes adaptés sont mises en oeuvre :

- l'utilisation de métriques [Ala03, Hec03],
- la reconstruction de fonctions afin de définir une taille anisotrope de maille [For01] comme l'erreur sur une arête.

Nous pouvons citer quelques champs d'application de l'adaptation de maillage anisotrope :

- la mise en forme des matériaux [Gru04],
- les maillages de surface adaptés à une courbure locale pour des reconstructions de surfaces [Fre03],
- plus généralement, ce procédé est très utilisé pour adapter les maillages à la solution d'une équation. Le plus souvent une équation aux dérivées partielles ou EDP de la forme suivante :

$$\begin{aligned} \text{trouver } u \in V, \text{ espace continu tel que} \\ A(u) = g \end{aligned} \tag{1.1}$$

qui sera discrétisée par

$$A_h u_h = g_h; u_h \in V_h,$$

espace de dimension finie défini sur un maillage paramétré par le pas de maillage h . L'erreur d'approximation est définie par $\|u - u_h\|$

Sous l'hypothèse "naturelle" que l'erreur diminue si le pas du maillage décroît, l'adaptation de maillage consiste essentiellement à *raffiner* ou à *dé-raffiner* le maillage localement afin de satisfaire le critère désiré. Pour une méthode numérique donnée, le but d'adapter le maillage est d'offrir un meilleur compromis coût-précision des calculs, comparativement au procédé de raffinement uniforme de maillage.

Le but d'une méthode numérique étant d'approcher au mieux une fonction (solution d'une équation), l'adaptation anisotrope de maillage intervient dans ce cadre. Elle nécessite donc l'utilisation de critères décrivant la qualité de l'approximation que sont les estimateurs d'erreur, dont on tire la prescription locale de la taille des mailles. Pour les EDP, il existe deux classes d'estimateurs d'erreur spécifiques aux équations résolues :

les estimateurs à priori [BMR04, GRW01] qui sont de la forme

$$\|u - u_h\|_a \leq C(h)\|u\|_b,$$

les estimateurs à posteriori [BMV93, Hec03], de la forme

$$\|u - u_h\|_a \leq C(h)\|(u_h, g)\|_b.$$

Si $h \rightarrow 0$ alors $C(h) \rightarrow 0$ pour une "bonne" approximation.

On dispose aussi d'estimateurs d'erreur géométriques [AF03] (i.e qui ne dépendent pas de la nature du problème résolu) avec la particularité que la taille des mailles n'est pas supposée tendre vers zéro.

1.2 Etat de l'art

Parmi les procédés permettant d'améliorer la précision d'une méthode numérique on peut citer :

- la *h-adaptation* qui consiste à améliorer la précision des calculs en faisant varier la taille des mailles ou *pas de maillage*.
- la *p-adaptation* qui consiste à changer localement l'espace d'approximation pour améliorer le résultat numérique,
- la *hp-adaptation* qui est une combinaison de p-adaptation et h-adaptation.

Dans la suite de ce rapport, nous nous intéressons à la h-adaptation qui correspond à l'adaptation de maillage.

Des travaux [Ver93a, Ver93b, Pic03] proposent des stratégies d'adaptation de maillage basées sur des *estimateurs d'erreur par résidu* ou encore estimateurs à posteriori consistants pour le résidu. Ces estimateurs sont exprimés généralement avec des normes hilbertiennes ou avec en plus des normes d'énergie (norme de la forme bilinéaire associée à l'opérateur de l'équation) [Woh99]. L'idée principale dans ces estimations est de faire varier localement les tailles de mailles à l'aide des ordres de convergence donnés par les estimateurs à priori.

De nombreux travaux effectués en adaptation de maillage anisotrope [Ala03, Lag06, Dob05, Les01, DS91a] etc., sur des problèmes elliptiques, proposent des contributions basées sur l'erreur d'interpolation de type éléments finis en diverses normes. Ces estimations sont ensuite appliquées à l'erreur d'approximation grâce au lemme de Céa qui garantit la majoration de l'erreur d'approximation par l'erreur d'interpolation [EG02].

Beaucoup d'applications d'adaptation de maillage sont faites en mécanique des fluides, essentiellement avec l'interpolation P_1 éléments finis de Lagrange en dimension deux et trois d'espace.

Un développement de Taylor à l'ordre deux, nous montre que la matrice hessienne [Les01, Ala03] peut être utilisée comme estimateur d'erreur d'interpolation locale, à partir de cette matrice hessienne nous construisons naturellement des métriques.

En effet soit T un simplexe, soient $x \in T$ et y un sommet de T . Supposons que l'erreur maximale d'interpolation est atteinte en x . Alors le gradient de cette erreur est nul en x . En faisant un développement de Taylor à l'ordre deux de l'erreur d'interpolation en y à partir du point x on obtient :

$$|(u - u_h)(x)| \leq C \|\langle \vec{xy}, H_{u(z)} \cdot \vec{xy} \rangle\|_{\infty}; \quad (1.2)$$

$z \in [x, y]; x \in T$ simplexe ; y sommet de T .

On en déduit que la matrice hessienne constitue un bon indicateur d'erreur pour l'erreur d'interpolation P_1 .

Cependant pour l'interpolation de degré élevé sur un simplexe, lorsqu'on effectue un développement de Taylor de l'erreur d'interpolation à l'ordre deux, la matrice hessienne

de l'interpolée n'est pas nulle au point d'erreur maximale. L'utilisation de la matrice hessienne de la solution comme estimateur d'erreur ne serait pas optimale. En général, cet estimateur est utilisé en chacune des directions du gradient pour les éléments finis P_2 . Ce qui revient à faire de l'adaptation sur le gradient de la solution, ou sur ses dérivées d'ordre supérieur.

La reconstruction de la matrice hessienne à partir des valeurs d'une fonction connue en des points pose des problèmes. De nombreux travaux [MVDG05, Ala03, ZZ92, Hec05] proposent des méthodes de reconstruction ainsi que des études essentiellement numériques sur ces différentes méthodes. Mais il subsiste le problème de la consistance des schémas existants.

1.2.1 Les indicateurs d'erreur

Les estimateurs d'erreur à priori et à posteriori donnent en général une majoration de l'erreur d'approximation de l'EDP résolue. Ces estimations dépendent à la fois de l'espace d'approximation, du pas de maillage, de l'équation, de la solution approchée dans le cas des estimateurs à posteriori ou de la solution exacte dans le cas des estimateurs à priori. Les estimateurs d'erreur pour les EDP sont donc assez spécifiques aux types d'équations étudiées. L'un des objectifs de cette thèse étant de s'affranchir des équations sur lesquelles un processus d'adaptation de maillage sera appliqué, nous nous sommes intéressés aux indicateurs d'erreur d'interpolation : la matrice hessienne et les dérivées troisièmes. Les indicateurs d'erreur d'interpolation restent valides pour toutes équations vérifiant le lemme de Cea, comme ces indicateurs ne dépendent pas du problème traité mais seulement de la géométrie de la solution, ils sont appelés indicateurs d'erreur géométrique.

Nous présentons sommairement quelques différentes méthodes de reconstruction de l'indicateur d'erreur géométrique qu'est la matrice hessienne.

- La double projection L^2 du gradient.

Elle consiste à utiliser un opérateur de projection L^2 dans P_k pour reconstruire le gradient d'une fonction. Le procédé est appliqué au gradient reconstruit pour obtenir une matrice H^* . La matrice hessienne reconstruite est la moyenne arithmétique de H^* et de sa transposée [Ala03]. La fonction dont on veut approcher la matrice hessienne est connue aux noeuds. Dans le cas d'une solution approchée P_1 éléments finis, si la projection L^2 est faite dans l'espace P_0 , le gradient reconstruit en un sommet donné correspond à une reconstruction par moyennage pondéré par l'aire. C'est-à-dire que l'on prend la somme sur l'ensemble des mailles autour du sommet considéré du gradient dans chaque maille multiplié par l'aire de la maille. Le résultat est divisé par la somme des aires des mailles considérées.

- L'approximation locale de la solution de l'EDP par un polynôme du second degré.

Elle consiste à approcher localement la fonction par un polynôme du second degré en se servant de ses valeurs aux noeuds voisins. La matrice hessienne (constante) du polynôme obtenu est prise comme valeur locale de la matrice hessienne de la fonction.

- La double interpolation linéaire.

1.2. Etat de l'art

Elle consiste à approcher localement la fonction par un polynôme du premier degré dont on récupérera le gradient. On réitère le procédé au gradient pour obtenir la matrice hessienne. Ce procédé correspond à la double projection L^2 sur l'espace P_0 dans le cas d'une cas d'une solution approchée P_1 éléments finis.

- La reconstruction de la matrice hessienne par moindres carrés.

Il s'agit d'écrire un développement de Taylor à l'ordre deux autour d'un sommet à partir des noeuds voisins ce qui donne des équations avec les coefficients de la matrice hessienne comme inconnues. Le système linéaire obtenu est résolu par moindres carrés.

- La méthode basée sur la formule de Green (type formulation faible).

Elle consiste à définir chaque composante de la matrice hessienne d'une fonction sous forme de valeur moyenne de l'intégrale de cette fonction multipliée par une fonction test sur le support de celle-ci.

1.2.2 Modifications de maillage

Une fois que l'on dispose de la matrice hessienne reconstruite comme estimateur d'erreur, cette erreur peut être vue comme une longueur dans une norme particulière ou *métrique* (matrice symétrique définie positive) que l'on définit [Les01, Ala03]. La relation (1.2) est ramenée à une inégalité du type

$$\|u - u_h\|_{\infty, T} \leq C \max_{x \in T} \max_{e \in E_T} \langle \vec{e}, |H_{u(x)}| \vec{e} \rangle ; E_T \text{ ensemble des arêtes de } T.$$

$|H_{u(x)}|$ n'étant pas connue, on suppose que l'on sache exhiber sur T un tenseur de métrique $\overline{\mathcal{M}}(T)$ telle que

$$\max_{x \in T} \langle \vec{e}, |H_{u(x)}| \vec{e} \rangle \leq \langle \vec{e}, \overline{\mathcal{M}}(T) \vec{e} \rangle.$$

Ainsi la relation (1.2) devient :

$$\|u - u_h\|_{\infty, T} \leq C \max_{e \in E_T} \langle \vec{e}, \overline{\mathcal{M}}(T) \vec{e} \rangle. \quad (1.3)$$

Soit ϵ l'erreur d'interpolation que l'on souhaite commettre sur les éléments du maillage. Les arêtes de T doivent d'après l'inégalité (1.3), vérifier l'égalité suivante :

$$\epsilon = C \langle \vec{e}, \overline{\mathcal{M}}(T) \vec{e} \rangle \text{ pour tout } e \in E_T.$$

Le maillage adapté est celui pour lequel les mailles sont de longueur unité dans un champ de métriques. Localement, cela correspond à définir une métrique

$$\mathcal{M}(T) = \frac{C}{\epsilon} \overline{\mathcal{M}}(T) \text{ telle que}$$

$$\langle \vec{e}, \mathcal{M}(T) \vec{e} \rangle = 1 \text{ pour tout } e \in E_T.$$

La matrice hessienne étant symétrique, on la décompose en matrice de vecteurs propres \mathcal{R} . Soient h_{max} la taille maximale d'arête autorisée dans le maillage et h_{min}

la taille minimale d'arête autorisée. \mathcal{M} est donnée par : $\mathcal{M} = \mathcal{R}\Lambda\mathcal{R}^{-1}$. Où Λ est la matrice diagonale de valeurs $\tilde{\lambda}_i$ définis par :

$$\tilde{\lambda}_i = \min \left(\max \left(\frac{C|\lambda_i|}{\epsilon}, \frac{1}{h_{max}^2} \right), \frac{1}{h_{min}^2} \right).$$

Où λ_i est la valeur propre correspondant au $i^{\text{ème}}$ vecteur propre de la matrice hessienne.

La métrique \mathcal{M} ainsi définie est dite métrique donnée par la *valeur absolue* de la matrice hessienne, ou encore métrique obtenue à partir de la *valeur absolue* de la matrice hessienne.

Le maillage adapté est donc celui pour lequel les mailles sont localement de longueur unité dans la métrique donnée par la valeur absolue de la matrice hessienne.

L'essentiel des travaux académiques et logiciels libres portant sur l'adaptation de maillage est basé sur des triangulations (maillages triangulaires ou tétraédriques) à l'exemple de *Freefem++*. Cependant, d'importants codes industriels en mécanique des structures par exemple se servent de maillages quadrilatéraux et hexaédriques pour faire des simulations numériques. Dans ce domaine particulier, les triangulations sont moins appréciées ; bien que les raisons du choix des quadrilatères ne soient pas clairement établies. Un code déjà existant et optimisé pour des éléments hexaédriques peut justifier son utilisation continue, le reprendre pour un autre type d'éléments peut s'avérer très long en temps, financièrement et matériellement coûteux.

De nombreuses applications utilisent des éléments finis hexaédriques, pour les motifs suivants :

- De nombreuses parties géométriques sont formées de parallélépipèdes.
- Les mécaniciens pensent que les éléments hexaédriques sont plus précis (exemple <http://www.hexmesh.com/>).
- De nombreux logiciel industriels ont été certifiés afin de remplacer des essais réels.

Il est donc important d'étudier le problème de raffinement de maillages hexaédriques.

Les maillages quadrilatéraux et hexaédriques se caractérisent essentiellement par le faible nombre d'éléments obtenus pour la même quantité de sommets par rapport aux triangulations. Ce qui peut être avantageux pour des méthodes de type volumes finis, lorsque les inconnues sont définies au centre des mailles.

Raffiner ou dé-raffiner localement les maillages hexaédriques pour faire de l'adaptation de maillage est moins aisé qu'avec les triangulations en raison de leur structure. En effet, si on rajoute des sommets internes à un hexaèdre, il n'est pas toujours évident de pouvoir le subdiviser sans en rajouter sur sa frontière comme on le ferait avec un tétraèdre. En ajoutant des sommets sur une face, tout découpage trivial d'un hexaèdre nécessite un rajout de sommets sur la face opposée (celle qui ne partage pas d'arêtes

1.2. Etat de l'art

avec la face considérée) et pour des *maillages conformes* (maillages où chaque maille n'a de sommet qu'aux extrémités de ses arêtes) cette subdivision se propagera jusqu'à la frontière, affectant ainsi tout un bloc d'éléments du maillage.

En dehors des algorithmes de génération de maillage hexaédriques, et des opérations purement topologiques (ne tenant compte ni de la conformité du maillage ni de la connexion entre facettes i.e., une face peut être commune à plus de deux mailles par exemple) [JKL⁺07, TK02] il existe très peu de travaux sur ce sujet [BEE02].

Un maillage est dit topologique lorsque chaque élément de ce maillage n'est considéré que du point de vue du nombre de ses composantes. La disposition des différentes composantes d'un élément ainsi que la position relative des éléments les uns par rapport aux autres dans le maillage n'est pas prise en compte. Par contre dans un maillage géométrique, on tiendra compte de la forme géométrique de chaque élément ainsi que de la disposition des éléments du maillage, les uns par rapport aux autres.

Les opérations de transformation géométrique locale de maillages hexaédriques dont on dispose sont celles proposées par Bern et. al. [BEE02], appelées *hex flipping*, obtenues par projection en dimension quatre d'un cube (hypercube).

Ces opérations sont une extension en dimension trois d'opérations définies pour des maillages quadrilatéraux par S.A. Canann, S.N. Muthukrishann et R.K. Phillips [CMP98] consistant en de bascules d'arêtes dans une configuration de quadrilatères. Elles mêmes sont une généralisation aux quadrilatères des opérations de *swapping* très utilisées sur des triangles et qui permettent notamment de vérifier le critère de Delaunay [Geo90] entre deux triangles partageant une arête commune.

Pour les maillages quadrangulaires, il existe des outils et algorithmes [CMP98, VGS04] permettant de *régulariser* les maillages topologiques, c'est-à-dire ; ce qui rend les processus de modifications locales relativement aisé comparativement aux hexaèdres. On peut notamment passer d'une configuration ayant un nombre pair de quadrilatères à une configuration où ce nombre est impair (*changement de parité*) tout en gardant la même frontière sur des maillages géométriques (la connexion entre mailles est importante : chaque face est commune à deux éléments au plus...) conformes. Cette question du changement de parité reste encore ouverte pour les maillages géométriques conformes d'hexaèdres.

1.2.3 Le logiciel Freefem++

Une partie des travaux effectués dans cette thèse a été rajoutée aux fonctionnalités du logiciel freefem++. Voici un bref aperçu de ce logiciel.

Freefem++ [HP] est un logiciel libre de calcul scientifique, pour la résolution numérique d'équations aux dérivées partielles développé par Frédéric Hecht et Olivier Pironneau. Il est basé sur la méthode des éléments finis en dimension deux de l'espace. Il se caractérise par les principales fonctionnalités suivantes.

- La prise en compte sous forme variationnelle du problème à résoudre, qu'il soit linéaire, non linéaire, couplé, stationnaire ou évolutif en temps.

- La génération automatique de maillages à partir d'une description simple (par morceaux) de sa frontière, y compris d'éventuels trous.
- L'adaptation de maillage anisotrope basée sur une construction automatisée de métriques à partir de la matrice hessienne de fonctions freefem++.
- Un large choix de types d'éléments finis : continus, discontinus, P_k $1 \leq k \leq 3$ Lagrange, Raviart-Thomas... et de solveurs directs ou itératifs : (LU, Cholesky, Crout, Gradient Conjugué CG, GMRES, UMFPACK) avec des solveurs pour vecteurs propres et valeurs propres.

1.3 Notre apport

Au cours du travail présenté dans ce mémoire, nous nous sommes intéressés dans une première partie à deux étapes importantes d'un schéma classique d'adaptation de maillage (figure 1.1,[Ala03]) :

- la reconstruction de l'estimateur d'erreur anisotrope qu'est la matrice hessienne,
- la construction de métriques à partir d'une estimation d'erreur.

Ensuite, nous avons abordé le problème de l'estimation d'erreur d'interpolation de Lagrange, ainsi que celui de la reconstruction de dérivées troisièmes.

En seconde partie nous avons travaillé sur les modifications locales de maillages hexaédriques et quadrangulaires.

1.3.1 Reconstruction de la matrice hessienne

Dans ce chapitre[HK08a] , nous avons étudié trois méthodes de reconstruction existantes.

-La reconstruction de la matrice hessienne par moindres carrés. Un résultat de convergence de cette méthode est proposé lorsque l'on fait tendre le pas du maillage vers zéro par homothétie. Nous montrons aussi qu'elle vérifie la propriété de linéarité de l'opérateur dérivation.

-La méthode basée sur la formule de Green. Nous montrons qu'elle permet d'approcher une *valeur moyenne de la matrice hessienne* mais elle ne converge pas nécessairement vers cette matrice.

-L'approximation locale de la solution de l'EDP par un polynôme du second degré. Grâce aux résultats de Ciarlet et Raviart [CR72] sur l'interpolation polynomiale, nous proposons un critère de convergence de cette méthode ainsi qu'une variante de la méthode pour laquelle la convergence est assurée.

-Nous suggérons une nouvelle approche basée sur une interpolation polynomiale locale (autour du noeud où l'on fait la reconstruction) et utilisation d'un schéma aux différences fines pour l'obtention de la matrice hessienne. Nous établissons aussi des résultats de consistance et de stabilité de cette nouvelle approche.

Des tests numériques sont faits essentiellement en dimension deux d'espace. Nous avons pu constater que numériquement, la méthode des moindres carrés est la plus pré-

1.3. Notre apport

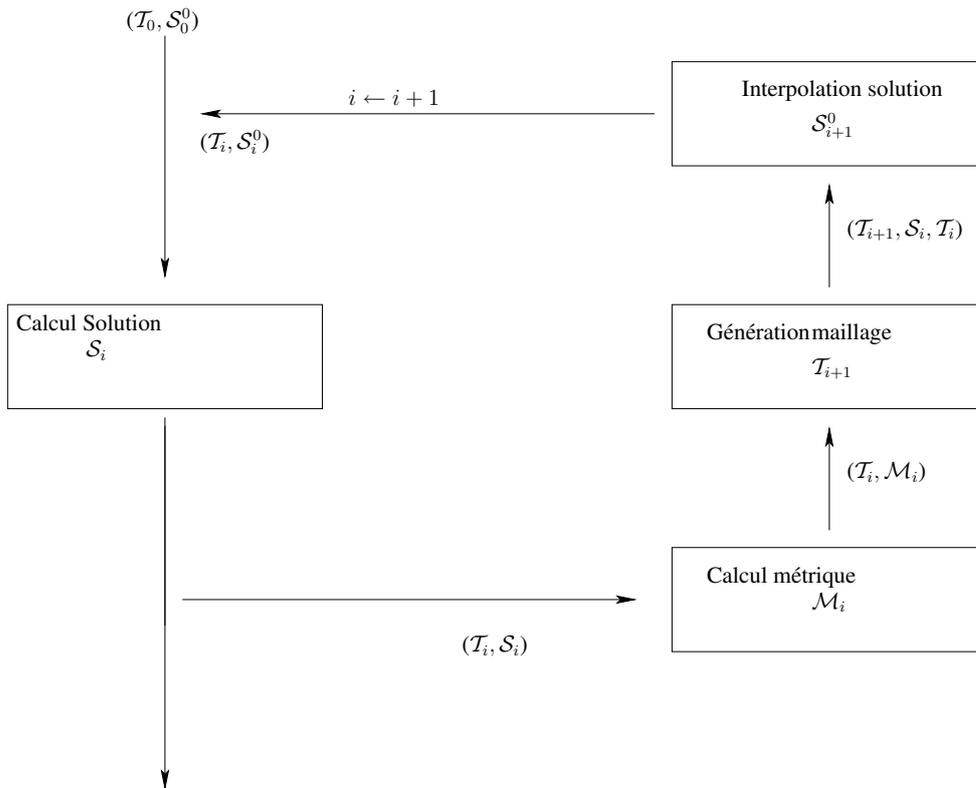


FIG. 1.1 – Schéma classique d'adaptation de maillage : \mathcal{T}_i^0 le maillage initial à l'itération i , S la solution, S^0 la solution initiale et \mathcal{M} la métrique.

cise, lorsque la fonction considérée est affine par triangle. Nous avons observé en dimension trois d'espace que la méthode d'approximation polynomiale P_2 était la moins précise.

L'implémentation de la méthode de reconstruction par moindres carrés et de notre nouvelle approche est faite dans le logiciel *Freefem++* [HP] pour le cas de la dimension deux. Sur les tests faits, nous constatons que notre nouvelle approche est plus précise que celle des moindres carrés lorsque la fonction considérée est un polynôme de degré supérieur ou égal à deux dans chaque triangle.

1.3.2 Généralisation de la construction de métriques pour d'autres estimations d'erreur d'interpolation

Pour de nombreux problèmes dont on dispose d'estimateur d'erreur locale d'interpolation qui n'est pas basé sur la matrice hessienne, la génération de métriques pour construire des maillages adaptés est une question dont nous n'avons trouvé aucun élé-

ment de réponse dans la littérature. L'utilisation de métriques issues de la matrice hessienne n'est justifiée formellement que pour l'erreur d'interpolation linéaire. Avec des estimations d'erreurs d'interpolation pour les éléments finis d'ordre élevé [Hec08, CW71], nous avons donc souhaité construire une métrique en dimension deux d'espace pour générer des mailles adaptées.

On supposera que l'on dispose d'un modèle d'erreur $E(x, \xi)$ ($x \in \Omega$, $\xi \in \mathbb{R}^d$) où x est un point du domaine et où $\|\xi\|$ représente la taille de maille dans la direction du vecteur ξ de \mathbb{R}^d . De plus nous supposons que $E(x, \xi)$ est homogène d'ordre p , c'est-à-dire

$$E(x, \xi) = \|\xi\|^p E(x, \frac{\xi}{\|\xi\|}).$$

Dans le cas où l'erreur d'interpolation est basée sur la matrice hessienne, $E(x, \xi)$ correspond formellement à l'erreur maximale atteinte au point x , sur le triangle T dans la direction $\xi = \overrightarrow{xy}$ où y est un sommet de T .

$$E(x, \xi) = C \langle \xi, H_{u(x)} \cdot \xi \rangle, \quad C \text{ constante réelle.}$$

La représentation graphique de la fonction $|E(x, \xi)| = \mathcal{E}$ nous donne une courbe fermée représentant la ligne de niveau \mathcal{E} de l'erreur locale en x .

Comment construire une métrique pour cette estimation d'erreur locale ?

Nous proposons dans ce chapitre [HK08b] un algorithme permettant de résoudre numériquement ce problème en le ramenant à la construction d'une ellipse d'aire maximale contenue dans une courbe fermée représentant l'erreur locale. Des exemples numériques sont donnés et notre code permet de retrouver approximativement la métrique obtenue à partir de la *valeur absolue* de la matrice hessienne.

L'implémentation de ce code est faite dans le logiciel Freefem++. Des tests d'adaptation de maillage pour l'interpolation de fonctions où nous utilisons des métriques construites à l'aide de cet algorithme et les récentes estimations d'erreur d'interpolation [Hec08] sont proposés. Ces tests montrent que cette nouvelle approche minimise considérablement le nombre d'éléments utilisés par rapport au procédé utilisant les métriques issues de la matrice hessienne. On observe aussi que plus le degré de dérivation de la fonction est élevé, plus le maillage adapté à partir de ces dérivées pris comme estimateur d'erreur d'interpolation est précis. Nous avons aussi observé sur une EDP elliptique que l'utilisation de dérivées troisièmes comme estimateur d'erreur d'interpolation lors sa résolution par éléments finis P_2 donnait des maillages mieux adaptés que ceux obtenus en utilisant la matrice hessienne.

1.3.3 Reconstruction de dérivées troisièmes

L'algorithme proposé pour la construction de métrique lorsque l'erreur est donnée a été en grande partie élaborée pour être utilisée lorsque l'on se sert des dérivées d'ordre

1.3. Notre apport

supérieur à deux comme estimateur d'erreur d'interpolation. Il s'est donc posé le problème de la reconstruction des dérivées d'ordre supérieur.

Nous étudions dans ce chapitre la reconstruction de dérivées troisièmes par la méthode des moindres carrés. Son implémentation numérique en dimension deux est faite. Nous présentons quelques résultats de tests numériques effectués avec le logiciel Freefem++. Les résultats numériques obtenus montrent que la méthode des moindres carrés est moins stable pour l'approximation des dérivées troisièmes que pour la matrice hessienne, à ordre de grandeur du pas de maillage identique.

Malgré ces problèmes numériques, on a constaté que l'utilisation de dérivées troisièmes approchées par la méthode des moindres carrés comme estimateur d'erreur d'interpolation donnait de meilleurs résultats en adaptation de maillage par rapport à l'estimateur basé sur la matrice hessienne.

1.3.4 Estimation de l'erreur d'interpolation

De nombreux travaux portant sur la construction d'une triangulation minimisant l'erreur d'interpolation [DS91b, DS91a, Ala03, LH06] proposent généralement l'interpolation linéaire d'un polynôme du second degré comme premier exemple avant de s'étendre à d'autres cas.

Ayant observé que l'aire comprise entre un polynôme du second degré et son interpolée P_1 Lagrange était exactement la même sur des segments de même longueur en dimension un, nous proposons dans ce chapitre une généralisation de ce résultat. Cette généralisation est faite en dimension quelconque pour l'erreur d'interpolation P_{k-1} Lagrange d'un polynôme de degré k en normes L^p $1 \leq p < \infty$ et H^1 . Il en découle des conséquences quant-à l'équi-répartition de l'erreur d'interpolation en dimensions deux et trois justifiant certains résultats numériques observés dans des travaux parus sur le sujet.

Nous proposons ensuite une autre estimation d'erreur d'interpolation de Lagrange en particulier pour les éléments finis P_2 . Cette estimation est obtenue en faisant un développement de Taylor à l'ordre trois où le calcul direct des dérivées troisièmes n'apparaît pas, tout étant ramené à la matrice hessienne d'une fonction dépendant à la fois de la fonction considérée et de son interpolée.

Cette estimation d'erreur pourrait permettre de contourner les problèmes numériques rencontrés lors de la reconstruction de dérivées troisièmes par moindres carrés, mais le travail effectué est encore purement théorique.

1.3.5 Modifications locales de maillages hexaédriques

Dans cette partie [HKT08], nous avons étudié le problème de la transformation locale des maillages hexaédriques et quadrilatéraux. Il s'agit de la modification d'une des parties ou sous-maillage d'un maillage, sans en modifier la frontière. Ces modifications locales sont nécessaires pour toute application d'un processus d'adaptation anisotrope. Nous établissons [JKL⁺07] que les opérations de flipping en dimension deux et trois

sont algébriquement libres (i.e., qu'aucune transformation géométrique définie dans ces opérations ne peut être obtenue en combinant les autres.)

Nous proposons pour les maillages quadrilatéraux une caractérisation de ces opérations de transformations locales. Elles sont équivalentes à un rajout ou une suppression locale d'autant de sommets internes que l'on souhaite de mailles, à frontière constante.

Pour les maillages hexaédriques, nous avons étudié des opérations de modifications locales existantes [BEE02] et en dégageons quelques propriétés. Elles caractérisent les seules transformations locales possibles ne faisant intervenir que des maillages où le nombre d'arêtes par sommet est égal à trois ou quatre, et ne permettent pas un changement de parité dans ce cadre.

A partir de ces résultats il apparaît que toute nouvelle transformation géométrique locale de maillages hexaédriques ne peut faire intervenir que des maillages contenant des mailles ayant moins cinq arêtes sur certains sommets. Nous proposons donc une nouvelle base (au sens où ces opérations sont algébriquement libres) permettant de générer une infinité de transformations locales sur des configurations de maillages hexaédriques où les sommets ont cinq arêtes au plus.

Première partie

Métriques et estimateurs d'erreur

Chapitre 2

Méthodes de reconstruction de la matrice hessienne

Sommaire

2.1	Introduction	21
2.2	Reconstruction par moindres carrés	22
2.3	Approximation locale par un polynôme du second degré	25
2.4	Méthode basée sur la formule de Green	26
2.5	Nouvelle approche	28
2.5.1	Cas des éléments finis P_1	31
2.6	Résultats numériques	32
2.6.1	En dimension deux avec Freefem++	32
2.6.2	En dimension trois d'espace	48
2.7	Conclusion	48

2.1 Introduction

Pour faire de l'adaptation de maillage lorsque l'on dispose d'estimateurs d'erreur à priori, on se sert de la solution calculée pour approcher l'estimation d'erreur, la solution exacte n'étant pas connue. Dans le cas de la résolution d'EDP par éléments finis P_1 , la matrice hessienne de la solution sert d'indicateur d'erreur pour adapter le maillage [Ala03]. Cependant, la solution calculée n'a pas une matrice hessienne bien définie. On reconstruit donc une fonction régulière à partir de la solution calculée. De cette fonction reconstruite, on fait une approximation de la matrice hessienne. Cette matrice hessienne ainsi reconstruite servira de matrice hessienne de la solution.

La matrice hessienne d'une fonction ou matrice de ses dérivées partielles d'ordre 2 a été introduite pour la première fois en 1842 par Ludwig Otto Hesse, mathématicien allemand qui travaillait sur la théorie des fonctions algébriques.

Il existe différentes méthodes d'approximation des dérivées d'ordre un et deux d'une reconstruction de fonction. Ces méthodes soulèvent quelques fois des problèmes lors de leur mise en oeuvre, notamment au niveau de leur convergence [Hec05]. Parmi les nombreuses publications parues sur la reconstruction de la matrice hessienne, nous pouvons énumérer quelques méthodes basées sur :

- la double projection L^2 du gradient,
- l'approximation locale de la fonction par un polynôme du second degré,
- la double interpolation linéaire.

On peut aussi citer la simple interpolation linéaire pour une reconstruction du gradient.

Des études numériques réalisées ont montré [MVDG05] que les méthodes de double projection L^2 et de double interpolation linéaire ne convergent pas toujours. La méthode de simple interpolation linéaire a des taux de convergence numérique souvent assez faibles, de l'ordre de $h^{0.2}$ voire moins. Dans toute la suite de ce chapitre, la notion de convergence d'une matrice vers une autre matrice désigne la convergence terme à terme.

Dans l'étude suivante, nous nous intéressons essentiellement à trois méthodes de reconstruction de la matrice hessienne :

- la reconstruction de la matrice hessienne par moindres carrés,
- la méthode basée sur la formule de Green,
- l'approximation locale de la fonction par un polynôme du second degré.

Nous présentons ensuite notre approche basée sur de l'interpolation polynomiale locale par maille et un schéma aux différences finies.

Quelques tests numériques obtenus avec des fonctions en dimension deux pour les méthodes des moindres carrés et notre nouvelle approche sont faits. Nous présentons les résultats de ces tests pour l'implémentation de ces deux méthodes dans le logiciel Freefem++ [HP].

2.2 Reconstruction par moindres carrés

Soit Ω_h un maillage. Sur chaque noeud de Ω_h , on dispose de la solution approchée u_h d'une EDP, dans une base d'éléments finis. Les dérivées de u_h ne sont en général pas régulières. Soit u^* une fonction régulière reconstruite à partir des valeurs de u_h aux noeuds de la triangulation. On veut déterminer la matrice hessienne de u^* .

Pour estimer $H_{u^*}(x_n)$, matrice hessienne de u^* au noeud x_n , on effectue un développement de Taylor de u^* en un point x à partir du point x_n :

$$u^*(x) = u^*(x_n) + \overrightarrow{x_n x} \cdot \nabla u^*(x_n) + \frac{1}{2} \langle \overrightarrow{x_n x}, H_{u^*}(x_n) \overrightarrow{x_n x} \rangle + O(\|\overrightarrow{x_n x}\|^3), \quad (2.1)$$

où \langle, \rangle désigne le produit scalaire de \mathbb{R}^d ; $d = 2, 3$.

Pour obtenir $H_{u^*}(x_n)$ en supposant que $\nabla u^*(x_n)$ est connu, l'équation (2.1) doit être écrite en autant de points x_i que $H_{u^*}(x_n)$ comporte d'inconnues (3 en dimension 2 et 6 en dimension 3), à partir du point x_n . Cependant le nombre de noeuds connectés à x_n (boule de x_n dans un maillage) est en général différent de 3 en dimension 2 ou de 6 en dimension 3, lorsque ce nombre est insuffisant (inférieur à 3 ou 6 selon la dimension), on prend la réunion des boules de chacun des noeuds de la boule de x_n . On est amené donc à résoudre un système sur-déterminé de la forme

$$AX = b$$

où X est le vecteur des inconnues de la matrice hessienne, A la matrice rectangulaire des coefficients des composantes de X dans l'équation (2.1) et b le vecteur second membre résultant. Dans ces conditions on résout ce système par une approximation au sens des moindres carrés, en minimisant l'écart entre AX et b par une minimisation du carré de la norme euclidienne de leur différence. Et on montre que la solution de ce problème n'est autre que la solution du système linéaire suivant :

$${}^t A.AX = {}^t A.b \quad (2.2)$$

Remarque 2.2.1.

Soient $A_{m \times n}$ une matrice réelle et $\text{Rang}(A)$ son rang. Pour que le système linéaire (2.2) admette une unique solution il faut que $\text{Rang}(A) = n$, i.e $m \geq n$.

En effet si $m < n$ alors $\text{Rang}({}^t A.A) \leq \min [\text{Rang}(A), \text{Rang}({}^t A)] = \text{Rang}(A)$.

Ainsi ${}^t A.A$ est une matrice carrée d'ordre n de rang $m < n$ donc non inversible.

Définitions 2.2.2.

Soient Ω_h un maillage et x un sommet ou noeud de Ω_h .

On appelle **boule** de x l'ensemble des mailles ayant en commun le sommet x .

On appelle **stencil** de centre x un ensemble de mailles autour du sommet x , support d'un schéma numérique.

2.2. Reconstruction par moindres carrés

Deux **stencils** M_0 et M_1 de centre x seront dit **homothétiques** si l'un est l'image de l'autre par une homothétie de centre x . En d'autres termes, s'il existe un unique réel k non nul tel que pour tout noeud x_{0i} de M_0 il existe x_{1i} , noeud de M_1 pour lequel on a $\overrightarrow{xx_{0i}} = k \overrightarrow{xx_{1i}}$.

Deux maillages \mathcal{M}_0 et \mathcal{M}_1 sont dits **homothétiques** si pour chaque stencil M_0 de \mathcal{M}_0 il existe un stencil M_1 de \mathcal{M}_1 tel que M_0 et M_1 soient homothétiques.

Théorème 2.2.3.

Soit u une fonction suffisamment régulière sur Ω_h et $b \neq \vec{0}$, alors la matrice hessienne de u évaluée numériquement à partir des valeurs discrètes de u par la méthode précédente en résolvant le système $AX = b$ par moindres carrés converge vers la matrice hessienne de u lorsque le pas du maillage tend vers zéro sur des stencils homothétiques.

Démonstration.

Pour établir ce résultat nous allons montrer que le résidu

$$R = A\tilde{X} - b$$

tend vers zéro en norme lorsque le pas du maillage tend vers zéro, où \tilde{X} est la solution analytique de l'équation (2.2), c'est à dire ${}^t A \cdot A$ est inversible (ce qui en pratique est le cas quand le système est sur-déterminé).

Considérons (M_k) , $k \in \mathbb{N}$ une suite de stencils centrés au point x_n tel que le stencil M_{k+1} soit l'image de M_k par une homothétie de rapport α ; $0 < \alpha < 1$. Soient la suite de résidus $R_k = A_k \tilde{X}_k - b_k$ et I la matrice identité.

Sans nuire à la généralité nous prenons α constant.

Sinon on impose que $\sup_k \alpha_k < 1$.

Le système $A_k X_k = b_k$ correspond aux équations

$$u^*(x_k^i) - u^*(x_n) - \overrightarrow{x_n x_k^i} \cdot \nabla u^*(x_n) = \frac{1}{2} \langle \overrightarrow{x_n x_k^i}, H_{u^*}(x_n) \overrightarrow{x_n x_k^i} \rangle,$$

$1 \leq i \leq m$; où m est le nombre de noeuds utilisés autour de x_n .

Sur M_{k+1} ,

$$\overrightarrow{x_n x_{k+1}^i} = \alpha \overrightarrow{x_n x_k^i}. \quad (2.3)$$

Ainsi $A_{k+1} = \alpha^2 A_k$

$$\begin{aligned} R_k &= A_k \tilde{X}_k - b_k \\ &= [A_k \cdot ({}^t A_k \cdot A_k)^{-1} \cdot {}^t A_k - I] b_k \\ &= [A_{k-1} \cdot ({}^t A_{k-1} \cdot A_{k-1})^{-1} \cdot {}^t A_{k-1} - I] b_k \\ &= [A_0 \cdot ({}^t A_0 \cdot A_0)^{-1} \cdot {}^t A_0 - I] b_k \end{aligned}$$

ainsi

$$\| R_k \| \leq \| A_0 \cdot ({}^t A_0 \cdot A_0)^{-1} \cdot {}^t A_0 - I \| \| b_k \|$$

comme $\alpha < 1$, chacune des composantes b_k^i de b_k ,
 $b_k^i = u^*(x_k^i) - u^*(x_n) - \overrightarrow{x_n x_k^i} \cdot \nabla u^*(x_n)$ tend vers zero lorsque k tend vers l'infini car

$$\begin{array}{l} x_k^i \rightarrow x_n \\ k \rightarrow \infty \end{array} \quad \text{donc} \quad \left\| b_k \right\|_{k \rightarrow \infty} \rightarrow 0 \implies \left\| R_k \right\|_{k \rightarrow \infty} \rightarrow 0$$

Corollaire 2.2.4.

Supposons que u^ est reconstruite à partir de la solution approchée d'une EDP par éléments finis P_k de Lagrange sur un maillage en dimension 2 et que l'on approche la matrice hessienne de u^* par la méthode des moindres carrés dans la boule de chaque sommet du maillage. Alors cette approximation de la matrice hessienne est consistante sur ce maillage lorsque ce dernier est raffiné par découpage parallèle d'arêtes (i.e., chaque nouvelle arête introduite dans le maillage est parallèle à un côté du triangle qui le contient).*

Démonstration.

La solution approchée par éléments finis P_k Lagrange d'une EDP prend ses valeurs aux degrés de liberté de chaque élément. Tous les degrés de liberté d'un élément fini P_k Lagrange ont la même position relative les uns par rapport aux autres dans chaque triangle.

Considérons un sommet x du maillage et la boule de ce sommet. Effectuons un découpage parallèle d'arêtes autour de x . Grâce aux propriétés des droites parallèles dans un triangle, on montre qu'il existe une relation de type (2.3) entre chaque degré de liberté des triangles de la nouvelle boule (après découpage d'arêtes) de x et un seul des degrés de liberté de la boule initiale autour de x . Ce qui correspond bien à faire tendre le pas vers zéro par homothétie autour de x .

Proposition 2.2.5.

La méthode des moindres carrés conserve la linéarité de l'opérateur dérivation et pour toute fonction affine, la matrice hessienne obtenue est identiquement nulle.

Démonstration.

- Montrons que la linéarité de l'opérateur dérivation est conservée :

Soient u_1 et u_2 deux fonctions régulières ; $x \in \Omega$; $\lambda \in \mathbb{R}$.

Pour évaluer $\mathcal{H}_{u_1 + \lambda u_2}(x)$ par moindres carrés, on résout

$${}^t A A X = {}^t A b.$$

La matrice A ne dépend que du maillage, elle est donc la même si l'on détermine la matrice hessienne de la fonction u_1 ou celle de $u_1 + \lambda u_2$ au point x . Il est évident que le second membre se décompose en $b_1 + \lambda b_2$; b_1 et b_2 correspondant respectivement à u_1 et u_2 . Ainsi, la solution obtenue est exactement $\mathcal{H}_{u_1}(x) + \lambda \mathcal{H}_{u_2}(x)$.

- Montrons que pour toute fonction affine la matrice hessienne obtenue par moindres carrés est identiquement nulle :

2.3. Approximation locale par un polynôme du second degré

Il est évident que le second membre b de l'équation précédente est identiquement nul dans le cas d'une fonction affine ce qui conduit à une solution identiquement nulle. Dans le cas où le gradient fait partie des inconnues, la solution triviale pour la matrice hessienne est la matrice nulle.

Convergence de la méthode

Le théorème 2.2.3 nous donne la consistance de cette approximation par moindres carrés sur des maillages homothétiques. La proposition 2.2.5 garantit la stabilité de la méthode. En effet, toute perturbation des données par une fonction destinée à tendre vers zéro indépendamment du maillage (i.e., par un facteur multiplicatif) aura sa matrice hessienne (celle de la perturbation) qui tendra vers zéro, grâce à la linéarité de cet opérateur. Ces deux résultats nous assurent la convergence de cette méthode dans le cas des maillages homothétiques.

2.3 Approximation locale par un polynôme du second degré

Cette méthode est l'une des plus anciennes, apparue en 1992, elle a été proposée par Zienkiewicz-Zhu [ZZ92].

Elle consiste à considérer localement un ensemble de noeuds. Ces noeuds sont pris autour du noeud où l'on veut déterminer la matrice hessienne d'une fonction régulière reconstruite à partir de la solution approchée d'une EDP ou de toute fonction discrète. La fonction reconstruite est approchée par un polynôme de degré 2 telle que décrite dans [MVDG05] à l'aide des valeurs prises aux noeuds considérés. Les coefficients du polynôme sont obtenus en résolvant un système linéaire sur-déterminé, par moindres carrés en général. On effectue à peu de choses près le même travail que dans la méthode précédente à la seule différence que les inconnues de notre système à résoudre sont les coefficients du polynôme dont on déduira les coefficients de la matrice hessienne. On résout donc un système par moindres carrés ayant une inconnue en plus que le système à résoudre pour la méthode des moindres carrés.

En nous servant des estimations d'erreur pour l'interpolation de Lagrange généralisée, nous avons le résultat suivant :

Proposition 2.3.1.

Soit u une fonction de classe C^{k+1} sur un ouvert $\Omega \subset \mathbb{R}^n$, à valeurs réelles. Soit $\tilde{P}_k u$ un polynôme de degré k stricte qui approche u sur $K_\Sigma \subset \Omega$, convexifié des points de l'approximation et tel que K_Σ soit non dégénéré. Soit $\#_{\Sigma_k}$ le nombre de degrés de liberté de $\tilde{P}_k u$. Si la fonction $R_k u = u - \tilde{P}_k u$ admet $\#_{\Sigma_k}$ racines sur un ensemble \tilde{K}_Σ convexifié de l'ensemble des dites racines tel que $K_\Sigma \subset \tilde{K}_\Sigma$ alors pour $k \geq 2$, la matrice hessienne de $\tilde{P}_k u$ converge vers la matrice hessienne de u .

Démonstration.

Aux $\#_{\Sigma_k}$ racines de $R_k u$, $\tilde{P}_k u$ est l'unique interpolée P_k Lagrange de u et d'après le théorème suivant de Ciarlet et Raviart [CR72] on a la convergence de la matrice hessienne de $\tilde{P}_k u$ vers la matrice hessienne de u sur \tilde{K}_Σ contenant K_Σ .

Théorème. (Ciarlet et Raviart) Soit $\Sigma = \{a_i\}_1^N$ un ensemble de k -unisolvants points de \mathbb{R}^n , si $P_k u$ est l'unique polynôme de degré $\leq k$ interpolant u sur K alors pour $m \in \mathbb{N}$ $m \leq k$, on a :

$$\sup_{x \in K} \|D^m u(x) - D^m P_k u(x)\| \leq C M_{k+1} \frac{h^{k+1}}{\rho^m}$$

pour toute fonction u de classe C^{k+1} sur K convexe de Σ , où

$$M_{k+1} = \sup_{x \in K} \|D^{k+1} u(x)\|$$

$h = \text{diamètre de } K$

$\rho = \sup$ des diamètres des sphères inscriptibles dans K

C constante indépendante de Σ .

Remarque 2.3.2.

1 Cette méthode conserve aussi les propriétés de linéarité de l'opérateur dérivation. La matrice hessienne obtenue avec cette méthode pour une fonction affine est identiquement nulle, pour les mêmes raisons qu'avec la méthode des moindres carrés.

2 Une autre variante de la méthode.

On peut remplacer l'approximation polynomiale par l'interpolation de Lagrange de degré $k \geq 2$ autour du point x où l'on veut déterminer la matrice hessienne. Il suffit alors de choisir convenablement des noeuds à utiliser (par exemple les noeuds les plus proches de x dont le centre de l'enveloppe convexe est le plus proche de x). Dans ce cas, le théorème précédent (Ciarlet et Raviart) nous garantit la convergence de cette variante de la méthode d'Approximation locale de la solution par un polynôme.

2.4 Méthode basée sur la formule de Green

On reconstruit la composante ij de la matrice hessienne au point p_n par une formule du type

$$\mathcal{H}_{ij}(p_n) = \frac{- \int_{S_n} \frac{\partial u_h}{\partial x_j} \frac{\partial \varphi_n}{\partial x_i}}{\int_{S_n} \varphi_n}$$

2.4. Méthode basée sur la formule de Green

où S_n désigne le support de la fonction de base φ_n associée au noeud p_n , et u_h la solution approchée par éléments finis de Lagrange. Cependant, cette méthode de reconstruction de la matrice hessienne pose des problèmes de convergence [Hec05].

Soit $\bar{H}_{ij}(p_n)$ la valeur moyenne de la composante ij de la matrice hessienne pondérée par φ_n de la solution analytique u au point p_n , définie par

$$\bar{H}_{ij}(p_n) = \frac{\int_{S_n} \frac{\partial^2 u}{\partial x_j \partial x_i} \varphi_n}{\int_{S_n} \varphi_n},$$

on a

$$\begin{aligned} |\mathcal{H}_{ij}(p_n) - \bar{H}_{ij}(p_n)| &= \left| \frac{\int_{S_n} \left(\frac{\partial u_h}{\partial x_j} - \frac{\partial u}{\partial x_j} \right) \frac{\partial \varphi_n}{\partial x_i}}{\int_{S_n} \varphi_n} \right| \\ &\leq C_n \left\| \frac{\partial \varphi_n}{\partial x_i} \right\|_{L^\infty(S_n)} |S_n|^{-1/2} \left(\int_{S_n} \left| \frac{\partial u_h}{\partial x_j} - \frac{\partial u}{\partial x_j} \right|^2 \right)^{1/2}. \end{aligned}$$

Où

$$C_n = \frac{|S_n|}{\left| \int_{S_n} \varphi_n \right|}.$$

S_n étant partagé sur plusieurs mailles, nous avons $S_n = \bigcup_{p_n} T_n$ réunion de toutes les mailles autour de p_n qui interceptent S_n . Alors,

$$|\mathcal{H}_{ij}(p_n) - \bar{H}_{ij}(p_n)| \leq C'_n \left\| \frac{\partial \varphi_n}{\partial x_i} \right\|_{L^\infty(S_n)} |T_n|^{-1/2} \sum_{p_n} |u - u_h|_{1, T_n},$$

avec

$$C'_n = \sup_{p_n} \frac{|T_n|}{\left| \int_{S_n} \varphi_n \right|}.$$

Soient h_n la longueur de la plus grande arête dans S_n , ρ_n le diamètre de la boule inscrite dans T_n , et d la dimension de l'espace ($d = 2, 3$). Il existe une constante \tilde{C}_n telle que $C'_n |T_n| \leq \tilde{C}_n h_n^d$.

Supposons que $u \in H^{k+1}(T_n)$. Alors, on montre [Gir06] qu'il existe une constante \hat{C} indépendant de T_n tel que

$$|u - u_h|_{1, T_n} \leq \hat{C} \frac{h_n^{k+1}}{\rho_n} |u|_{k+1, T_n},$$

où k désigne le degré des polynômes de base d'éléments finis de Lagrange.

Posons $\sigma_n = \frac{h_n}{\rho_n}$ et supposons que $\sigma_n < \infty$ c'est à dire que les éléments sont non dégénérés, ce qui est vrai dans la pratique. Alors, nous obtenons le résultat suivant :

Proposition 2.4.1.

Sous les conditions qui précèdent, nous avons l'estimation suivante :

$$\left| \mathcal{H}_{ij}(p_n) - \overline{H}_{ij}(p_n) \right| \leq \tilde{C}_n \hat{C} h_n^{k-d/2} \left\| \frac{\partial \varphi_n}{\partial x_i} \right\|_{L^\infty(S_n)} \sum_{p_n} \sigma_n |u|_{k+1, T_n}.$$

Cette estimation nous montre que pour des éléments finis P_k Lagrange, $k \geq 2$, \mathcal{H}_{ij} converge vers \overline{H}_{ij} .

Remarque 2.4.2.

En pratique cette méthode n'est utilisée que pour de l'interpolation P_1 .

En général avec cette méthode \mathcal{H}_{ij} ne converge pas vers H_{ij} .

Les fonctions tests associées aux noeuds frontaliers ne sont pas nulles au bord du maillage. Dans ce cas la formule de Green utilisée pour définir cette méthode n'est plus valable. Cette méthode donne donc de mauvais résultats sur le bord du maillage.

• F. Hecht [Hec05] montre qu'en faisant tendre le pas du maillage vers zéro par homothétie pour une fonction quadratique en utilisant les éléments finis P_1 Lagrange, la matrice hessienne évaluée par cette méthode n'est pas consistante.

2.5 Nouvelle approche

Nous proposons une approche basée sur l'interpolation polynômiale dans chaque maille et un schéma aux différences finies.

Soit Ω_h un maillage. Sur chaque noeud de Ω_h , on dispose de la solution approchée u_h d'une EDP et l'on veut déterminer la matrice hessienne d'une fonction régulière u^* reconstruite à partir de cette solution. Soit $\mathcal{I}u^*$ l'interpolée de u^* sur Ω_h . Pour estimer $H_{u^*}(x_n)$, matrice hessienne de u^* au noeud x_n , de composantes H_{ij}^* définissons le repère orthonormé local (x_n, \vec{i}, \vec{j}) en dimension 2 ; ou $(x_n, \vec{i}, \vec{j}, \vec{k})$ en dimension 3.

Par un développement de Taylor de $\mathcal{I}u^*$ en un point x à partir du point x_n l'on obtient :

$$\mathcal{I}u^*(x) = \mathcal{I}u^*(x_n) + \overrightarrow{x_n x} \cdot \nabla \mathcal{I}u^*(x_n) + \frac{1}{2} \langle \overrightarrow{x_n x}, H_{\mathcal{I}u^*}(x_n) \overrightarrow{x_n x} \rangle + O(\|\overrightarrow{x_n x}\|^3), \quad (2.4)$$

où \langle, \rangle désigne le produit scalaire de \mathbb{R}^d ; $d = 2, 3$.

Soit h_n le pas local associé à la grille différences finies définie par le repère orthonormé $(x_n, \vec{i}, \vec{j}, \vec{k})$ et soient $H_{ij}^{*\mathcal{I}}$ les composantes de $H_{\mathcal{I}u^*}$.

En choisissant successivement $x = h_n \cdot \vec{l}$; $x = -h_n \cdot \vec{l}$ dans l'équation (2.4) en dimension 3, on obtient respectivement $H_{11}^{*\mathcal{I}}, H_{22}^{*\mathcal{I}}, H_{33}^{*\mathcal{I}}$, pour l valant respectivement i, j, k ; suivant un schéma aux différences finies centré. Pour $\vec{l} = \vec{i} + \vec{j}$ nous obtenons $H_{12}^{*\mathcal{I}}$ en fonction de $H_{11}^{*\mathcal{I}}$ et $H_{22}^{*\mathcal{I}}$ déjà calculés. Et de même que l'on a $H_{13}^{*\mathcal{I}}$ et $H_{23}^{*\mathcal{I}}$ en fonction de $H_{11}^{*\mathcal{I}}, H_{33}^{*\mathcal{I}}$ et $H_{22}^{*\mathcal{I}}, H_{33}^{*\mathcal{I}}$ pour $\vec{l} = \vec{i} + \vec{k}$ ou $\vec{l} = \vec{j} + \vec{k}$.

2.5. Nouvelle approche

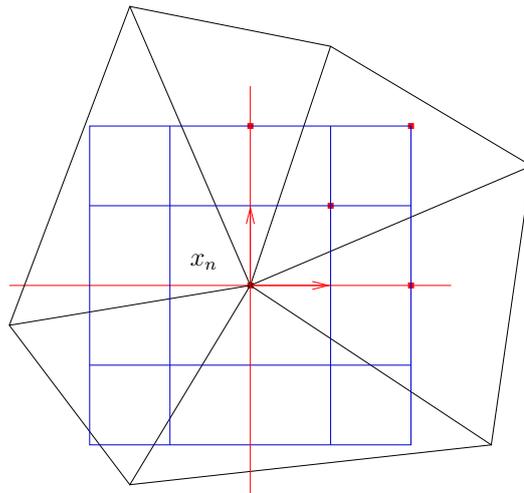


FIG. 2.1 – Grille locale au noeud x_n .

Si l'on dispose d'une "bonne" interpolation $\mathcal{I}u^*$ de u^* sur Ω_h , l'estimation de $H_{u^*}(x_n)$ par $H_{\mathcal{I}u^*}(x_n)$ obtenue précédemment est "satisfaisante" et l'on a le résultat suivant.

Théorème 2.5.1.

Soit u^* une fonction de classe C^4 et soit $\mathcal{I}u^*$ son interpolée sur un ensemble Ω_h . S'il existe une constante $C > 0$ et un réel $k > 2$ tel que

$$\|u^* - \mathcal{I}u^*\|_{L^\infty(\Omega_h)} \leq C.h^k, \quad (2.5)$$

alors tout schéma aux différences finies d'ordre strictement positif est consistant pour l'approximation de H_{ij}^* , composante ij de la matrice hessienne de u^* , par la composante correspondante $H_{ij}^{*\mathcal{I}}$ de son interpolée.

Démonstration.

Soit $k = 2 + \alpha$, $\alpha > 0$. Pour vérifier l'équation 2.5, il est nécessaire et suffisant d'avoir

$$\mathcal{I}u^*(x) = u^*(x) + c(x).h^k \text{ avec } \|c(x)\|_{L^\infty} \leq C, \quad \forall x \in \Omega_h. \quad (2.6)$$

Dans le cas d'un schéma aux différences finies centré on a :

$$H_{ii}^{*\mathcal{I}}(x_n) := \frac{\mathcal{I}u^*(x_n + \vec{i}.h_n) + \mathcal{I}u^*(x_n - \vec{i}.h_n) - 2\mathcal{I}u^*(x_n)}{h_n^2}$$

en remplaçant dans cette formule $\mathcal{I}u^*$ par son expression (2.6), l'on obtient

$$\begin{aligned} H_{ii}^{*\mathcal{I}}(x_n) &= \frac{u^*(x_n + \vec{i} \cdot h_n) + u^*(x_n - \vec{i} \cdot h_n) - 2u^*(x_n)}{h_n^2} \\ &\quad + \frac{\left[c(x_n - \vec{i} \cdot h_n) + c(x_n + \vec{i} \cdot h_n) - 2c(x_n) \right] h^k}{h_n^2} \\ &= H_{ii}^*(x_n) + \frac{c(x_n + \vec{i} \cdot h_n) + c(x_n - \vec{i} \cdot h_n) - 2c(x_n)}{h_n^2} h^k + \mathcal{O}(h_n^2) \end{aligned}$$

en prenant $h_n = h$ nous avons l'estimation suivante.

$$\left| H_{ii}^*(x_n) - H_{ii}^{*\mathcal{I}}(x_n) \right| \leq 4Ch^\alpha + \mathcal{O}(h^2).$$

En procédant de la même manière pour $i \neq j$ avec

$$\begin{aligned} H_{ij}^{*\mathcal{I}}(x_n) &:= \frac{\mathcal{I}u^*(x_n + (\vec{i} + \vec{j}) \cdot h_n) + \mathcal{I}u^*(x_n - (\vec{i} + \vec{j}) \cdot h_n) - 2\mathcal{I}u^*(x_n)}{2h_n^2} \\ &\quad - \frac{H_{ii}^{*\mathcal{I}}(x_n) + H_{jj}^{*\mathcal{I}}(x_n)}{2} \end{aligned}$$

nous obtenons

$$\left| H_{ij}^*(x_n) - H_{ij}^{*\mathcal{I}}(x_n) \right| \leq 4Ch^\alpha + \mathcal{O}(h^2). \quad (2.7)$$

D'où $H_{ij}^{*\mathcal{I}}(x_n)$ tend vers $H_{ij}^*(x_n)$ lorsque h tend vers zéro. Le schéma est donc consistant.

On a un résultat similaire pour un schéma aux différences finies décentré avec le second terme de droite de l'inégalité (2.7) en $\mathcal{O}(h)$.

Proposition 2.5.2.

Pour tout opérateur linéaire d'interpolation, la matrice hessienne obtenue par cette méthode conserve la linéarité de l'opérateur dérivation et par conséquent tout schéma aux différences finies d'ordre strictement positif est stable.

Si de plus l'opérateur d'interpolation est exact toute fonction affine, alors la matrice hessienne résultante est identiquement nulle pour toute fonction affine.

Démonstration.

Il est évident que tout schéma aux différences finies est linéaire. La composée de deux applications linéaires étant linéaire, on conserve la linéarité de l'opérateur dérivation. En écrivant le développement de Taylor pour une fonction affine, on a

$$\frac{1}{2} \langle \overrightarrow{x_n \hat{x}}, H_{\mathcal{I}u^*}(x_n) \overrightarrow{x_n \hat{x}} \rangle + \mathcal{O}(\|\overrightarrow{x_n \hat{x}}\|^3) = 0 \forall x, x_n \in \mathbb{R}^d \quad (2.8)$$

Donc $H_{\mathcal{I}u^*} \equiv 0$ pour tout $\mathcal{I}u^*$ affine.

2.5. Nouvelle approche

Remarque 2.5.3.

Cette méthode définit une reconstruction numérique continue de la matrice hessienne (sur l'ensemble du maillage et pas seulement aux noeuds). On peut ainsi générer des métriques entre les extrémités d'une arête. Permettant ainsi l'intégration numérique pour le calcul de la longueur d'une arête, sans interpolation de métrique.

2.5.1 Cas des éléments finis P_1

Cette méthode d'interpolation et différences finies locales n'est pas consistante de manière générale, lorsque l'on fait de l'interpolation linéaire. Bien que théoriquement on ait aucun résultat de convergence nous avons essayé d'améliorer le résultat lorsque la fonction dont on cherche la matrice hessienne est solution d'une EDP obtenue par éléments finis P_1 . Nous nous sommes restreints au cas de la dimension 2.

a. En procédant à une double résolution.

Si la solution dont on dispose est obtenue par éléments finis P_1 Lagrange, on va rajouter un noeud sur chaque arête du maillage remailler uniquement avec les noeuds rajoutés (voir figure 2.2). Ensuite, résoudre une nouvelle fois le problème sur le nouveau maillage (i.e., sa restriction aux degrés de libertés nouvellement rajoutés). Puis on prendra la solution initiale aux sommets et la nouvelle solution sur les arêtes pour en faire une interpolation P_2 . Cependant ce procédé donne numériquement une solution P_2 reconstruite très oscillante. La matrice hessienne de cette solution P_2 reconstruite n'est pas pas meilleure que celle obtenue à partir de la solution P_1 éléments finis.

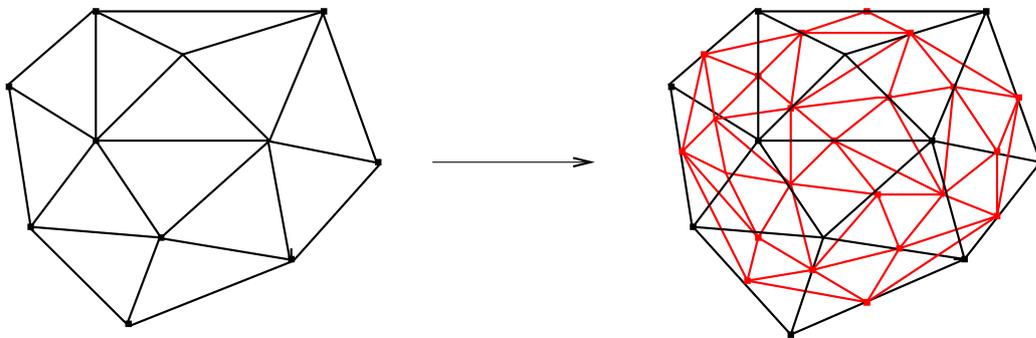


FIG. 2.2 –

b. En faisant une résolution hiérarchique par éléments finis P_2 .

On résout une nouvelle fois le problème par éléments finis P_2 sur sa restriction aux degrés de libertés des éléments finis P_2 ne contenant pas les degrés de liberté du P_1 c'est-à-dire aux milieux des arêtes.

On pose $u_h = u_1 + u_2$. u_1 est calculée par éléments finis P_1 dans un premier temps. u_2 est prise nulle aux sommets des triangles. On cherche donc u_h c'est-à-dire u_2 par éléments finis P_2 . Ce procédé est moins coûteux que la "vraie" résolution par éléments finis P_2

Mais numériquement on obtient aussi de mauvais résultats pour la matrice hessienne.

2.6 Résultats numériques

2.6.1 En dimension deux avec Freefem++

Nous présentons ici les résultats obtenus pour l'implémentation de la méthode des moindres carrés et notre nouvelle approche en dimension 2 avec le logiciel Freefem++ [HP].

Exemple 1 Nous évaluons la matrice hessienne d'un polynôme de degré trois aux sommets de la triangulation. Les différents maillages sont obtenus en faisant varier le nombre de noeuds sur le carré unité $[0, 1] \times [0, 1]$. Les valeurs de la fonction sont prises aux sommets du maillage et aux milieux des arêtes. La norme L^2 de l'erreur présentée est l'intégration numérique de l'interpolée P_1 des différentes composantes de la matrice hessienne sur le maillage. Pour les normes L^∞ et L^2 (figures 2.3) parmi

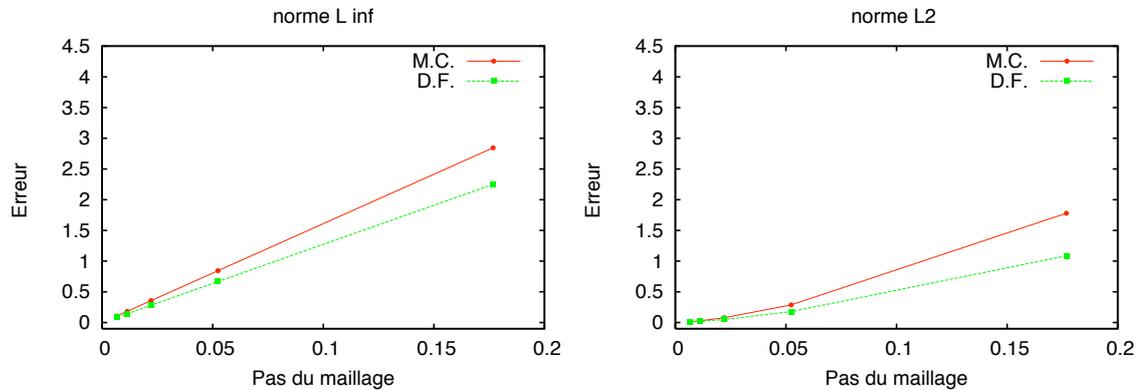


FIG. 2.3 – Les erreurs en 2D : à gauche en norme L^∞ , à droite en norme L^2 .

ces deux méthodes, on constate que celle des moindres carrés est moins précise sur cet exemple (figure 2.4).

2.6. Résultats numériques

```
load "hess2d"

func F=x*x*x -y*y*y-2.*x*y*y-10*x*x*y+5.*x*x+7.*y*y+5*x*y+y+x ;
func Fxx = 6*x-20*y+10 ;
func Fyy =-6*y -4*x+14;
func Fxy =-4*y-20*x+5 ;
ofstream fichier("hess2d.dat");
for(int msh=2;msh<7;msh++)
{
  mesh Th=square(msh*msh*msh,msh*msh*msh);
  fespace Wh(Th,P2);
  fespace Vh(Th,P1);
  Vh m11,m12,m22;
  Wh Fh =F;
  Vh Fxxh=Fxx, Fxyh=Fxy,Fyyh=Fyy;
  Vh hmax = hTriangle;

  hessienMC(Th,F,2,[m11[],m12[],m22[]]);
  Vh err11Mc,err12Mc, err22Mc;
  err11Mc=abs(Fxxh-m11);
  err12Mc=abs(Fxyh-m12);
  err22Mc=abs(Fyyh-m22);
  real errMcL2= sqrt(int2d(Th)(err11Mc*err11Mc)
                    +sqrt(int2d(Th)(err12Mc*err12Mc))
                    +sqrt(int2d(Th)(err22Mc*err22Mc)));

  real[int] err(6);
  err[0]=err11Mc[].min;err[1]=err12Mc[].min;err[2]=err22Mc[].min;
  err[3]=err11Mc[].max;err[4]=err12Mc[].max;err[5]=err22Mc[].max;
  real errminMc= err.min;
  real errmaxMc=err.max;

  hessienDF(Th,F,3,[m11[],m12[],m22[]]);
  Vh err11Df,err12Df, err22Df;
  err11Df=abs(Fxxh-m11);
  err12Df=abs(Fxyh-m12);
  err22Df=abs(Fyyh-m22);
  real errDfL2=sqrt(int2d(Th)(err11Df*err11Df))
               +sqrt(int2d(Th)(err12Df*err12Df))
               +sqrt(int2d(Th)(err22Df*err22Df));

  err[0]=err11Df[].min; err[1]=err12Df[].min;
  err[2]=err22Df[].min; err[3]=err11Df[].max;
  err[4]=err12Df[].max; err[5]=err22Df[].max;
  real errminDf=err.min; real errmaxDf= err.max;

  fichier<<hmax[].max<<" "<<errMcL2<<" "<<errDfL2
  <<" "<<errmaxMc<<" "<<errmaxDf<<endl;
  cout<<hmax[].max<<" "<<errMcL2<<" "<<errDfL2
  <<" "<<errmaxMc<<" "<<errmaxDf<<endl;
}
```

FIG. 2.4 –

Exemple2 Soit la fonction

$$\begin{aligned}
 F(x, y) &= x^3 - 15y^3 + 0.02xy^2 - 3x^2y + 10x^2 - xy + 100y^2. \\
 \frac{\partial^2 F}{\partial x^2} &= 6x - 6y + 20, \\
 \frac{\partial^2 F}{\partial y^2} &= -90y + 0.04x + 200, \\
 \frac{\partial^2 F}{\partial x \partial y} &= 0.04y - 6x - 1.
 \end{aligned}$$

Les tableaux suivants présentent les résultats obtenus sur le carré unité (Ω). Soit h la plus grande taille d'arête du maillage. Le nombre de sommets sur le bord du maillage par itération est fonction de n , ($n = 2, 3, \dots, 7$). $\partial\Omega$ désigne le bord du maillage et $\overset{\circ}{\Omega}$ son intérieur.

A : Valeurs prises aux sommets du maillage

cas 1A Maillages isotropes uniformes. Le nombre de sommets sur $\partial\Omega$ par itération est n^2 dans les directions Oy et Ox .

Interpolation DF Locales $\frac{\partial^2 F}{\partial x^2}$				Moindres Carrés $\frac{\partial^2 F}{\partial x^2}$			
h	$L^\infty(\partial\Omega)$	$L^\infty(\overset{\circ}{\Omega})$	$L^2(\overset{\circ}{\Omega})$	h	$L^\infty(\partial\Omega)$	$L^\infty(\overset{\circ}{\Omega})$	$L^2(\overset{\circ}{\Omega})$
0.353553	26	69.4589	40.5444	0.353555	10.5061	4.13078	1.34906
0.157135	26	74.4921	51.7513	0.15713	4.66936	1.8359	0.55553
0.0883883	26	76.2537	55.7196	0.08838	2.62652	1.0327	0.25337
0.0565685	26	77.0691	57.5631	0.05656	1.68097	0.66092	0.13399
0.0392837	26	77.5121	58.5662	0.03928	1.16734	0.45897	0.07885
0.0288615	26	77.7791	59.1716	0.02886	0.85763	0.33720	0.05014

Interpolation DF Locales $\frac{\partial^2 F}{\partial x \partial y}$				Moindres Carrés $\frac{\partial^2 F}{\partial x \partial y}$			
h	$L^\infty(\partial\Omega)$	$L^\infty(\overset{\circ}{\Omega})$	$L^2(\overset{\circ}{\Omega})$	h	$L^\infty(\partial\Omega)$	$L^\infty(\overset{\circ}{\Omega})$	$L^2(\overset{\circ}{\Omega})$
0.353553	7	16.5795	8.33153	0.353553	1.98706	2.37073	0.84348
0.157135	7	19.1129	10.9122	0.157135	0.88313	1.05366	0.27775
0.0883883	7	19.9996	11.8593	0.088388	0.49676	0.59268	0.12370
0.0565685	7	20.41	12.3049	0.056568	0.31792	0.37931	0.06626
0.0392837	7	20.633	12.5489	0.039283	0.22078	0.26341	0.04008
0.0288615	7	20.7674	12.6966	0.028861	0.16220	0.19352	0.02641

2.6. Résultats numériques

Interpolation DF Locales $\frac{\partial^2 F}{\partial y^2}$				Moindres Carrés $\frac{\partial^2 F}{\partial y^2}$			
h	$L^\infty(\partial\Omega)$	$L^\infty(\dot{\Omega})$	$L^2(\dot{\Omega})$	h	$L^\infty(\partial\Omega)$	$L^\infty(\dot{\Omega})$	$L^2(\dot{\Omega})$
0.353553	200.04	536.132	315.003	0.353553	34.4042	9.48368	3.92293
0.157135	200.04	573.898	402.953	0.157135	15.2908	4.21497	1.29065
0.088388	200.04	587.116	434.203	0.088388	8.60105	2.37092	0.56220
0.056568	200.04	593.234	448.738	0.056568	5.50467	1.51739	0.29195
0.039283	200.04	596.558	456.652	0.039283	3.82269	1.05374	0.17023
0.028861	200.04	598.562	461.429	0.028861	2.80851	0.77417	0.107681

Cas 2A Maillages anisotropes uniformes. Le nombre de sommets sur $\partial\Omega$ par itération est n^2 dans la direction Ox et n^3 dans la direction Oy .

Interpolation DF Locales $\frac{\partial^2 F}{\partial x^2}$				Moindres Carrés $\frac{\partial^2 F}{\partial x^2}$			
h	$L^\infty(\partial\Omega)$	$L^\infty(\dot{\Omega})$	$L^2(\dot{\Omega})$	h	$L^\infty(\partial\Omega)$	$L^\infty(\dot{\Omega})$	$L^2(\dot{\Omega})$
0.279508	26	127.207	80.2917	0.279508	2.3437	0.87763	0.39563
0.117121	26	200.61	144.67	0.117121	1.05132	0.265	0.09491
0.0644235	26	273.697	204.493	0.0644235	0.58949	0.13612	0.03779
0.0407922	26	346.961	263.014	0.0407922	0.37588	0.08683	0.01913
0.0281609	26	420.384	321.011	0.0281609	0.26023	0.06085	0.01109
0.0206154	26	493.921	378.753	0.0206154	0.19072	0.04497	0.00701

Interpolation DF Locales $\frac{\partial^2 F}{\partial x \partial y}$				Moindres Carrés $\frac{\partial^2 F}{\partial x \partial y}$			
h	$L^\infty(\partial\Omega)$	$L^\infty(\dot{\Omega})$	$L^2(\dot{\Omega})$	h	$L^\infty(\partial\Omega)$	$L^\infty(\dot{\Omega})$	$L^2(\dot{\Omega})$
0.279508	7	11.9684	6.69934	0.279508	1.46994	1.2796	0.39687
0.117121	7	12.6402	7.61682	0.117121	0.63192	0.44678	0.09962
0.0644235	7	12.7852	7.83223	0.064423	0.35565	0.21283	0.03687
0.0407922	7	12.8355	7.90886	0.040792	0.23435	0.11714	0.01712
0.0281609	7	12.8582	7.94338	0.028160	0.16966	0.06962	0.00959
0.0206154	7	12.8704	7.96146	0.020615	0.12953	0.05064	0.00644

Chapitre 2. Méthodes de reconstruction de la matrice hessienne

Interpolation DF Locales $\frac{\partial^2 F}{\partial y^2}$				Moindres Carrés $\frac{\partial^2 F}{\partial y^2}$			
h	$L^\infty(\partial\Omega)$	$L^\infty(\dot{\Omega})$	$L^2(\dot{\Omega})$	h	$L^\infty(\partial\Omega)$	$L^\infty(\dot{\Omega})$	$L^2(\dot{\Omega})$
0.279508	200.04	411.172	254.451	0.279508	17.0358	5.43057	1.38706
0.117121	200.04	392.675	282.029	0.117121	4.90648	2.09752	0.309437
0.064423	200.04	383.362	287.253	0.064423	2.50273	1.26195	0.144991
0.040792	200.04	378.471	288.759	0.040792	2.12011	0.95282	0.098501
0.028160	200.04	375.638	289.302	0.028160	2.01913	0.85779	0.077644
0.020615	200.04	373.861	289.525	0.020615	2.00937	0.84885	0.065273

Cas 3A Maillages anisotropes uniformes. Le nombre de sommets sur $\partial\Omega$ par itération est n^2 dans la direction Oy et n^3 dans la direction Ox .

Interpolation DF Locales $\frac{\partial^2 F}{\partial x^2}$				Moindres Carrés $\frac{\partial^2 F}{\partial x^2}$			
h	$L^\infty(\partial\Omega)$	$L^\infty(\dot{\Omega})$	$L^2(\dot{\Omega})$	h	$L^\infty(\partial\Omega)$	$L^\infty(\dot{\Omega})$	$L^2(\dot{\Omega})$
0.279508	26	51.7287	32.6505	0.279508	39.1486	15.6687	4.38994
0.117121	26	50.1292	36.1508	0.117121	39.0635	15.6835	3.27195
0.0644235	26	49.2757	36.8164	0.064423	39.0909	15.7109	2.38619
0.0407922	26	48.8226	37.01	0.040792	39.1178	15.729	1.83861
0.0281609	26	48.5594	37.0807	0.028160	39.1373	15.7407	1.48117
0.0206154	26	48.3943	37.1102	0.020615	39.1511	15.7486	1.23356

Interpolation DF Locales $\frac{\partial^2 F}{\partial x \partial y}$				Moindres Carrés $\frac{\partial^2 F}{\partial x \partial y}$			
h	$L^\infty(\partial\Omega)$	$L^\infty(\dot{\Omega})$	$L^2(\dot{\Omega})$	h	$L^\infty(\partial\Omega)$	$L^\infty(\dot{\Omega})$	$L^2(\dot{\Omega})$
0.279508	7	13.591	6.87543	0.279508	2.26784	3.21496	1.21571
0.117121	7	13.5216	7.73779	0.117121	1.29694	1.94677	0.532913
0.064423	7	13.3244	7.91074	0.064423	0.91574	1.40783	0.312637
0.040792	7	13.1976	7.96287	0.040792	0.71136	1.11309	0.21412
0.028160	7	13.1178	7.98256	0.028160	0.58314	0.92888	0.160833
0.020615	7	13.0655	7.99111	0.020615	0.49482	0.79687	0.128244

2.6. Résultats numériques

Interpolation DF Locales $\frac{\partial^2 F}{\partial y^2}$				Moindres Carrés $\frac{\partial^2 F}{\partial y^2}$			
h	$L^\infty(\partial\Omega)$	$L^\infty(\bar{\Omega})$	$L^2(\bar{\Omega})$	h	$L^\infty(\partial\Omega)$	$L^\infty(\bar{\Omega})$	$L^2(\bar{\Omega})$
0.279508	200.04	950.895	623.124	0.279508	34.4394	9.25981	4.40095
0.117121	200.04	1518.2	1125.67	0.117121	15.3074	4.10172	1.39218
0.064423	200.04	2084.14	1592.83	0.064423	8.61051	2.30487	0.59670
0.040792	200.04	2650.78	2049.71	0.040792	5.51072	1.47448	0.30729
0.028160	200.04	3218.01	2502.42	0.028160	3.82688	1.02372	0.17831
0.020615	200.04	3785.63	2953.07	0.020615	2.81158	0.75202	0.11244

Commentaires : Dans cet exemple A, on constate que la méthode d'interpolation et différences finies globalement n'est pas consistante pour l'interpolation linéaire.

Elle est constante sur le bord du maillage car le schéma utilisé sur le bord est un schéma décentré dans une seule maille. Donc, les valeurs trouvées sont nulles.

A l'intérieur du maillage, elle a plutôt tendance à diverger. En effet, le schéma à l'intérieur étant centré, les valeurs obtenues correspondent à l'inverse du pas local multiplié par la somme des pentes de chacune des interpolées de part et d'autre du centre. Ces pentes n'étant pas constantes pour notre exemple on peut constater que l'erreur ne varie pas de manière uniforme.

Cependant cette méthode a parfois une convergence numérique lente à l'intérieur du maillage dans certains cas, lorsque les pentes de l'interpolée linéaire dans chaque maille décroissent plus vite que le pas du maillage.

La méthode des moindres carrés quant-à elle est consistante pour la norme L^2 . Pour la norme L^∞ en dehors de la composante $\frac{\partial^2 F}{\partial x^2}$, la méthode est consistante. Nous avons quelques sommets pour lesquels la norme L^∞ de l'erreur est quasi-constante sur les maillages étirés dans la direction Oy) pour la composante $\frac{\partial^2 F}{\partial x^2}$. Ce qui n'affecte pas la consistance en norme L^2 .

On constate sur cet exemple et on vérifie de manière générale que la méthode des moindres carrés est nettement plus précise que celle d'interpolation et différences finies locales lorsque les valeurs de la fonction sont prises aux sommets du maillage. L'anisotropie du maillage et de la fonction n'ont révélé aucun effet sur la consistance des deux méthodes pour les ordres de grandeur du pas de maillage considérés dans cet exemple.

B : Valeurs prises aux sommets et aux milieux des arêtes

cas 1B Maillages isotropes uniformes. Le nombre de sommets sur $\partial\Omega$ par itération est n^2 dans les directions Oy et Ox .

Interpolation DF Locales $\frac{\partial^2 F}{\partial x^2}$				Moindres Carrés $\frac{\partial^2 F}{\partial x^2}$			
h	$L^\infty(\partial\Omega)$	$L^\infty(\check{\Omega})$	$L^2(\check{\Omega})$	h	$L^\infty(\partial\Omega)$	$L^\infty(\check{\Omega})$	$L^2(\check{\Omega})$
0.279508	0.75	1.909e-11	4.380e-12	0.279508	1.48741	0.08143	0.02729
0.117121	0.33333	2.502e-10	5.248e-11	0.117121	0.66427	0.01688	0.00403
0.064423	0.1875	1.1123e-09	2.087e-10	0.064423	0.37336	0.00735	0.00132
0.040792	0.12	6.1156e-09	1.1163e-09	0.040792	0.23866	0.00436	0.00066
0.028160	0.08333	2.162e-08	2.926e-09	0.028160	0.16556	0.00298	0.00040
0.020615	0.06122	5.878e-08	9.364e-09	0.020615	0.12153	0.00220	0.00026

Interpolation DF Locales $\frac{\partial^2 F}{\partial x \partial y}$				Moindres Carrés $\frac{\partial^2 F}{\partial x \partial y}$			
h	$L^\infty(\partial\Omega)$	$L^\infty(\check{\Omega})$	$L^2(\check{\Omega})$	h	$L^\infty(\partial\Omega)$	$L^\infty(\check{\Omega})$	$L^2(\check{\Omega})$
0.279508	0.74625	7.966e-12	2.520e-12	0.279508	1.39641	0.50215	0.21316
0.117121	0.27666	1.674e-10	3.377e-11	0.117121	0.65209	0.16059	0.06854
0.064423	0.14015	1.025e-09	1.686e-10	0.064423	0.37712	0.07058	0.02822
0.040792	0.08376	5.383e-09	7.664e-10	0.040792	0.25081	0.03919	0.01260
0.028160	0.05541	1.785e-08	2.091e-09	0.028160	0.20457	0.02550	0.00541
0.020615	0.03927	5.049e-08	6.303e-09	0.020615	0.17263	0.01786	0.00189

Interpolation DF Locales $\frac{\partial^2 F}{\partial y^2}$				Moindres Carrés $\frac{\partial^2 F}{\partial y^2}$			
h	$L^\infty(\partial\Omega)$	$L^\infty(\check{\Omega})$	$L^2(\check{\Omega})$	h	$L^\infty(\partial\Omega)$	$L^\infty(\check{\Omega})$	$L^2(\check{\Omega})$
0.353553	11.25	2.671e-12	5.973e-13	0.353553	22.49	0.66216	0.240439
0.157135	5	6.338e-11	1.207e-11	0.157135	9.99558	0.29429	0.08344
0.088388	2.8125	1.187e-10	2.256e-11	0.088388	5.62251	0.16554	0.03683
0.056568	1.8	3.392e-10	7.315e-11	0.056568	3.59841	0.10594	0.01923
0.039283	1.25	1.011e-09	1.646e-10	0.039283	2.49889	0.07357	0.01124
0.028861	0.91836	2.301e-09	3.659e-10	0.028861	1.83592	0.05405	0.00712

2.6. Résultats numériques

Interpolée linéaire de la fonction

Nous prenons l'interpolation linéaire de la fonction dans chaque triangle. On prendra donc comme valeur de la fonction au milieu d'une arête, la moyenne arithmétique de ses valeurs aux extrémités de cette arête.

Moindres Carrés $\frac{\partial^2 F}{\partial x^2}$			
h	$L^\infty(\partial\Omega)$	$L^\infty(\dot{\Omega})$	$L^2(\dot{\Omega})$
0.353553	83.5275	27.8857	14.464
0.157135	76.6143	29.9209	20.3701
0.0883883	74.1947	30.6333	22.4444
0.0565685	73.8657	30.9733	23.4058
0.0392837	74.285	31.334	23.9285
0.0288615	74.5378	31.5515	24.2437

Moindres Carrés $\frac{\partial^2 F}{\partial x \partial y}$			
h	$L^\infty(\partial\Omega)$	$L^\infty(\dot{\Omega})$	$L^2(\dot{\Omega})$
0.353553	23.2409	13.5739	6.62988
0.157135	25.8846	14.5942	7.9864
0.0883883	27.3268	14.9512	8.44925
0.0565685	27.9943	15.1423	8.662
0.0392837	28.3569	15.3232	8.77724
0.0288615	28.5755	15.4323	8.84662

Moindres Carrés $\frac{\partial^2 F}{\partial y^2}$			
h	$L^\infty(\partial\Omega)$	$L^\infty(\dot{\Omega})$	$L^2(\dot{\Omega})$
0.353553	204.836	20.1435	11.2644
0.157135	204.733	21.5188	13.0943
0.0883883	204.698	22.0001	13.7364
0.0565685	204.681	22.2229	14.0345
0.0392837	204.672	22.3439	14.1967
0.0288615	204.666	22.4169	14.2946

Chapitre 2. Méthodes de reconstruction de la matrice hessienne

Cas 2B Maillages anisotropes uniformes. Le nombre de sommets sur $\partial\Omega$ par itération est n^2 dans la direction Ox et n^3 dans la direction Oy .

Interpolation DF Locales $\frac{\partial^2 F}{\partial x^2}$				Moindres Carrés $\frac{\partial^2 F}{\partial x^2}$			
h	$L^\infty(\partial\Omega)$	$L^\infty(\dot{\Omega})$	$L^2(\dot{\Omega})$	h	$L^\infty(\partial\Omega)$	$L^\infty(\dot{\Omega})$	$L^2(\dot{\Omega})$
0.279508	0.75	1.909e-11	4.380e-12	0.279508	1.48741	0.08143	0.02729
0.117121	0.333333	2.502e-10	5.248e-11	0.117121	0.66427	0.01688	0.00403
0.064423	0.1875	1.112e-09	2.087e-10	0.064423	0.37336	0.00735	0.00132
0.040792	0.12	6.1156e-09	1.116e-09	0.040792	0.23866	0.00436	0.00066
0.028160	0.0833334	2.162e-08	2.926e-09	0.028160	0.16556	0.00298	0.00040
0.020615	0.0612245	5.878e-08	9.364e-09	0.020615	0.12153	0.00220	0.00026

Interpolation DF Locales $\frac{\partial^2 F}{\partial x \partial y}$				Moindres Carrés $\frac{\partial^2 F}{\partial x \partial y}$			
h	$L^\infty(\partial\Omega)$	$L^\infty(\dot{\Omega})$	$L^2(\dot{\Omega})$	h	$L^\infty(\partial\Omega)$	$L^\infty(\dot{\Omega})$	$L^2(\dot{\Omega})$
0.279508	0.74625	7.966e-12	2.520e-12	0.279508	1.39641	0.50215	0.21316
0.117121	0.27666	1.674e-10	3.377e-11	0.117121	0.65209	0.16059	0.06854
0.064423	0.14015	1.025e-09	1.686e-10	0.064423	0.37712	0.07058	0.02822
0.040792	0.08376	5.383e-09	7.664e-10	0.040792	0.25081	0.03919	0.01260
0.028160	0.05541	1.785e-08	2.091e-09	0.028160	0.20457	0.02550	0.00541
0.020615	0.03927	5.049e-08	6.303e-09	0.020615	0.17263	0.01786	0.00189

Interpolation DF Locales $\frac{\partial^2 F}{\partial y^2}$				Moindres Carrés $\frac{\partial^2 F}{\partial y^2}$			
h	$L^\infty(\partial\Omega)$	$L^\infty(\dot{\Omega})$	$L^2(\dot{\Omega})$	h	$L^\infty(\partial\Omega)$	$L^\infty(\dot{\Omega})$	$L^2(\dot{\Omega})$
0.279508	5.625	1.607e-11	3.052e-12	0.279508	11.0014	0.47125	0.12310
0.117121	1.66667	2.760e-10	6.163e-11	0.117121	3.20583	0.23735	0.03991
0.064423	0.70312	1.484e-09	2.490e-10	0.064423	1.34086	0.17427	0.02123
0.040792	0.36	9.277e-09	1.429e-09	0.040792	0.70471	0.14927	0.01455
0.028160	0.20833	2.450e-08	4.223e-09	0.028160	0.72730	0.13903	0.01134
0.020615	0.13119	7.415e-08	1.153e-08	0.020615	0.88836	0.13342	0.00946

2.6. Résultats numériques

Interpolée linéaire de la fonction

Moindres Carrés $\frac{\partial^2 F}{\partial x^2}$			
h	$L^\infty(\partial\Omega)$	$L^\infty(\bar{\Omega})$	$L^2(\bar{\Omega})$
0.279508	31.636	8.81597	4.99947
0.117121	25.4726	5.25897	3.58786
0.0644235	24.0617	4.21803	2.75733
0.0407922	24.5636	3.77214	2.32531
0.0281609	24.87	3.53553	2.08094
0.0206154	25.0708	3.3967	1.93151

Moindres Carrés $\frac{\partial^2 F}{\partial x \partial y}$			
h	$L^\infty(\partial\Omega)$	$L^\infty(\bar{\Omega})$	$L^2(\bar{\Omega})$
0.279508	11.9596	8.35495	4.69805
0.117121	9.78158	7.59091	4.98888
0.0644235	13.4416	8.06078	5.55596
0.0407922	16.9966	9.25086	6.30977
0.0281609	20.5075	10.6017	7.17026
0.0206154	23.9961	12.0452	8.09531

Moindres Carrés $\frac{\partial^2 F}{\partial y^2}$			
h	$L^\infty(\partial\Omega)$	$L^\infty(\bar{\Omega})$	$L^2(\bar{\Omega})$
0.279508	235.624	28.1148	18.0453
0.117121	294.742	47.0364	34.2135
0.0644235	381.767	73.0179	55.7676
0.0407922	496.502	108.046	83.281
0.0281609	638.883	151.016	116.895
0.0206154	808.882	201.963	156.659

Chapitre 2. Méthodes de reconstruction de la matrice hessienne

Cas 3B Maillages anisotropes uniformes. Le nombre de sommets sur $\partial\Omega$ par itération est n^2 dans la direction Oy et n^3 dans la direction Ox .

Interpolation DF Locales $\frac{\partial^2 F}{\partial x^2}$				Moindres Carrés $\frac{\partial^2 F}{\partial x^2}$			
h	$L^\infty(\partial\Omega)$	$L^\infty(\dot{\Omega})$	$L^2(\dot{\Omega})$	h	$L^\infty(\partial\Omega)$	$L^\infty(\dot{\Omega})$	$L^2(\dot{\Omega})$
0.279508	0.375	8.640e-12	2.008e-12	0.279508	17.9158	2.29867	0.702208
0.117121	0.11111	2.618e-10	5.328e-11	0.117121	18.5622	2.3135	0.488254
0.064423	0.04687	1.210e-09	2.328e-10	0.064423	18.7418	2.31993	0.355494
0.040792	0.024	6.184e-09	9.794e-10	0.040792	18.8136	2.32322	0.275522
0.028160	0.01388	2.412e-08	3.037e-09	0.028160	18.8488	2.32512	0.223503
0.020615	0.00874	6.175e-08	1.039e-08	0.020615	18.8685	2.32631	0.187379

Interpolation DF Locales $\frac{\partial^2 F}{\partial x \partial y}$				Moindres Carrés $\frac{\partial^2 F}{\partial x \partial y}$			
h	$L^\infty(\partial\Omega)$	$L^\infty(\dot{\Omega})$	$L^2(\dot{\Omega})$	h	$L^\infty(\partial\Omega)$	$L^\infty(\dot{\Omega})$	$L^2(\dot{\Omega})$
0.279508	0.5575	6.394e-12	1.698e-12	0.279508	7.91674	2.07586	0.916771
0.117121	0.16481	2.064e-10	3.647e-11	0.117121	5.38457	1.34341	0.590087
0.064423	0.06937	9.319e-10	1.473e-10	0.064423	4.06642	0.99695	0.431488
0.040792	0.03544	3.663e-09	6.609e-10	0.040792	3.26349	0.793645	0.340143
0.028160	0.02046	1.321e-08	2.030e-09	0.028160	2.72425	0.659605	0.280925
0.020615	0.01285	4.349e-08	7.151e-09	0.020615	2.33749	0.564468	0.239407

Interpolation DF Locales $\frac{\partial^2 F}{\partial y^2}$				Moindres Carrés $\frac{\partial^2 F}{\partial y^2}$			
h	$L^\infty(\partial\Omega)$	$L^\infty(\dot{\Omega})$	$L^2(\dot{\Omega})$	h	$L^\infty(\partial\Omega)$	$L^\infty(\dot{\Omega})$	$L^2(\dot{\Omega})$
0.279508	11.25	6.309e-12	2.744e-12	0.279508	22.661	0.62587	0.25328
0.117121	5	3.145e-10	5.552e-11	0.117121	10.0876	0.27617	0.08048
0.064423	2.8125	1.135e-09	1.932e-10	0.064423	5.67762	0.15503	0.03433
0.040792	1.8	5.372e-09	1.109e-09	0.040792	3.6347	0.099139	0.01761
0.028160	1.25	1.997e-08	2.804e-09	0.028160	2.52449	0.06881	0.01018
0.020615	0.91836	6.236e-08	1.018e-08	0.020615	1.85491	0.05054	0.00641

2.6. Résultats numériques

Interpolée linéaire de la fonction

Moindres Carrés $\frac{\partial^2 F}{\partial x^2}$			
h	$L^\infty(\partial\Omega)$	$L^\infty(\bar{\Omega})$	$L^2(\bar{\Omega})$
0.279508	293.091	107.027	66.5489
0.117121	583.262	256.263	190.681
0.0644235	1052.95	465.386	361.339
0.0407922	1661.98	742.209	579.58
0.0281609	2406.67	1080.55	845.786
0.0206154	3287	1480.41	1160.12

Moindres Carrés $\frac{\partial^2 F}{\partial x \partial y}$			
h	$L^\infty(\partial\Omega)$	$L^\infty(\bar{\Omega})$	$L^2(\bar{\Omega})$
0.279508	47.6938	26.5828	12.6404
0.117121	80.2757	42.7946	22.717
0.0644235	112.697	58.8066	31.9109
0.0407922	144.181	75.2566	40.8228
0.0281609	175.202	91.4842	49.6067
0.0206154	205.961	107.585	58.3211

Moindres Carrés $\frac{\partial^2 F}{\partial y^2}$			
h	$L^\infty(\partial\Omega)$	$L^\infty(\bar{\Omega})$	$L^2(\bar{\Omega})$
0.279508	200.385	18.7192	10.7171
0.117121	200.182	19.8339	11.5352
0.0644235	200.064	20.2488	11.768
0.0407922	200.008	20.4531	11.8694
0.0281609	199.98	20.5708	11.9244
0.0206154	199.966	20.6459	11.9582

Commentaires : Lorsque les valeurs de la fonction sont prises aux sommets du maillage et aux milieux des arêtes, la méthode d'interpolation est consistante pour la norme L^∞ sur le bord du maillage. Mais cette tendance est inversée à l'intérieur du domaine pour les normes L^∞ et L^2 , toute fois avec des niveaux d'erreur très faibles.

En effet, l'interpolée dans chaque triangle est un polynôme du second degré. Sur le bord, le schéma décentré nous donne pour chaque composante ij de la matrice hessienne un résultat qui ne dépend pas de la variable d'espace. Cette constante est fonction des coefficients des monômes de degré deux de l'interpolée. A chaque itération, bien que ne s'exprimant pas en fonction du pas du pas local, cette constante décroît lorsque le pas décroît. Pour les sommets internes on a utilisé un schéma centré. A une constante du même type que sur la frontière, il se rajoute l'inverse du pas local multiplié par un polynôme de degré un. Ce qui a pour effet de diminuer considérablement l'erreur. Mais il apparaît dans cet exemple que la partie rajoutée croît plus vite que ne décroît la partie constante quand le pas décroît. La tendance de l'erreur se trouve donc inversée par rapport à la frontière.

La méthode des moindres carrés garde le même comportement que dans le cas A où les valeurs étaient prises uniquement aux sommets du maillage, lorsque les valeurs de la fonction sont prises aux sommets et aux milieux des arêtes.

Cependant, lorsque l'on se donne l'interpolée linéaire de la fonction dans chaque triangle, la prise des valeurs aux sommets et aux milieux des arêtes conduit à une perte de consistance. Le résultat obtenu est assez similaire à celui que l'on obtient avec la méthode d'interpolation et différences finies locales en faisant de l'interpolation linéaire.

On constate que la méthode d'interpolation et différences finies locales est plus précise que celle des moindres carrés lorsque les valeurs de la fonction sont prises aux sommets du maillage et aux milieux des arêtes. Dans cet exemple, le rapport des erreurs sur la frontière est de deux. Ce rapport est multiplié par un facteur de l'ordre de 10^5 au moins à l'intérieur du domaine, lorsqu'on passe de l'une à l'autre méthode.

Exemple d'application à l'adaptation de maillage

Nous avons procédé à l'adaptation de maillage pour l'équation de la chaleur stationnaire résolue par éléments finis. Les conditions aux limites sont de Dirichlet, avec solution exacte donnée. Cette solution analytique (figure 2.6 droite) présente de très fortes variations aux axes médians du maillage. Le code `freefem++` de la figure 2.5 présente l'exemple traité.

Dans cet exemple, le maillage est un carré centré en $(0, 0)$ de côté 200. L'espace d'approximation est l'espace des polynômes d'interpolation de Lagrange P_1 . La taille minimale de l'arête fournie au mailleur de `Freefem++` (Bamg [Hec98]) est 1 (0.005% à l'échelle de la taille du domaine). `nvmax` désigne le nombre maximal de noeuds autorisés dans le maillage. L'erreur est mesurée au barycentre de chaque triangle. L'algorithme de la boucle d'adaptation est le suivant :

2.6. Résultats numériques

- Maillage initial.
- Résolution de l'équation.

- 1: I. Evaluation de la matrice hessienne aux sommets du maillage.
 - 2: Calcul d'un champ de métriques issues de la matrice hessienne.
 - 3: Génération du nouveau maillage "unité" dans le champ de métriques.
 - 4: Résolution de l'équation sur le nouveau maillage.
 - 5: Retour en I.
-

Dans la première boucle de la figure 2.5, la matrice hessienne est approchée par la méthode basée sur la formule de Green. Dans la seconde boucle, on utilise la méthode des moindres carrés pour évaluer la matrice hessienne. Dans la dernière boucle, notre méthode d'interpolation et différences finies locales est utilisée.

Les figures 2.6 gauche et 2.7 présentent résultats obtenus à la dernière itération de l'algorithme dans le cas P_1 . Il apparaît que l'approximation de la matrice hessienne par la méthode des moindres carrés ainsi que par la nouvelle méthode, permet d'obtenir une meilleure adaptation du maillage qu'avec la méthode basée sur la formule de Green. Notre nouvelle méthode n'est théoriquement consistante que pour une interpolation polynomiale de degré supérieure ou égale à deux. On peut cependant observer (figure 2.7) qu'elle donne des résultats numériques dans le cas P_1 comparables à ceux de la méthode des moindres carrés.

```

load"hess2d"
func w =tanh(x*y/20.);
func wxx= -(1/200.)*tanh(x*y/20.)*(1-tanh(x*y/20.)^2)*y^2;
func wyy=-(1/200.)*tanh(x*y/20.)*(1-tanh(x*y/20.)^2)*x^2;
func g= -wxx-wyy; real error=0.05;

border aa(t= -100,100){x=t; y= -100; label=1;};
border ac(t= -100,100){x=100; y=t;label=3;};
border ab(t= -100,100){x=-t; y=100;label=2;};
border ad(t= -100,100){x=-100; y=-t;label=4;};
mesh Th=buildmesh(aa(5)+ac(5)+ab(5)+ad(5));

savemesh(Th,"maillage.mesh");
fespace Vh(Th,P1); fespace Wh(Th,P1); fespace Ph(Th,P0);
Vh u,v; plot(Th,wait=1);
problem laplacien(u,v,solver=CG,eps=1e-6)=int2d(Th)(dx(u)*dx(v)+
dy(u)*dy(v))-int2d(Th)(v*g)+on(1,2,3,4,u=w);
laplacien;
Vh u1=u; Vh uex = w; real Hmin=1; int T =10; int nvmax=50000;

for(int t=0;t<T;t++)
{
  Th=adaptmesh(Th,u,err=error,hmin=Hmin,nbvx=nvmax);
  laplacien; plot(Th,wait=1); Ph eh=abs(u-w);
  cout<<t<<"...."<<eh[.min]<<" "<<eh[.max]<<" "<<eh[.sum/eh[.n
  <<" "<<int2d(Th)(eh)/Th.area<<" "<<Th.nt<<" "<<Th.nv<<endl;
};
plot(Th,ps="mailhessAdap.eps"); Vh uexa=w;

Th=buildmesh(aa(5)+ac(5)+ab(5)+ad(5)); u=u1; plot(Th,wait=1);
for(int t=0;t<T;t++)
{
  Wh m11,m12,m22; hessienMC(Th,u,2,[m11[ ],m12[ ],m22[ ]]);
  Th=adaptmesh(Th,u,m11,m12,m22,err=error,
  nomeshgeneration=false,hmin=Hmin,nbvx=nvmax);
  laplacien; Ph eh=abs(u-w);plot(Th,wait=1);
  cout<<t<<"...."<< eh[.min]<<" "<<eh[.max]<<" "<<eh[.sum/eh[.n
  <<" "<<int2d(Th)(eh)/Th.area<<" "<<Th.nt<<" "<<Th.nv<<endl;
};
plot(Th,ps="mailhessMC.eps");

Th=buildmesh(aa(5)+ac(5)+ab(5)+ad(5)); u=u1; plot(Th,wait=1);
for(int t=0;t<T;t++)
{
  Wh m11,m12,m22; hessienDF(Th,u,2,[m11[ ],m12[ ],m22[ ]]);
  Th=adaptmesh(Th,u,m11,m12,m22,err=error,
  nomeshgeneration=false,hmin=Hmin,nbvx=nvmax);
  laplacien; Ph eh=abs(u-w); plot(Th,wait=1);
  cout<<t<<"...."<<eh[.min]<<" "<<eh[.max]<<" "<<eh[.sum/eh[.n
  <<" "<<int2d(Th)(eh)/Th.area<<" "<<Th.nt<<" "<<Th.nv<<endl;
};
plot(Th,ps="mailhessDF.eps");

```

FIG. 2.5 –

2.6. Résultats numériques

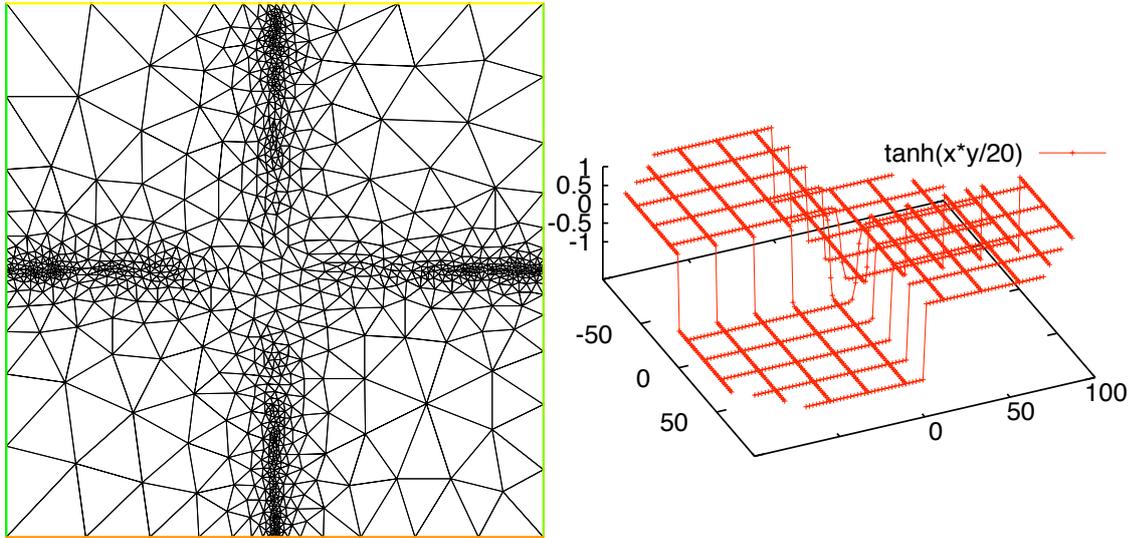


FIG. 2.6 – Maillage adapté, matrice hessienne approchée par la formule de Green.

Solution exacte. hes-

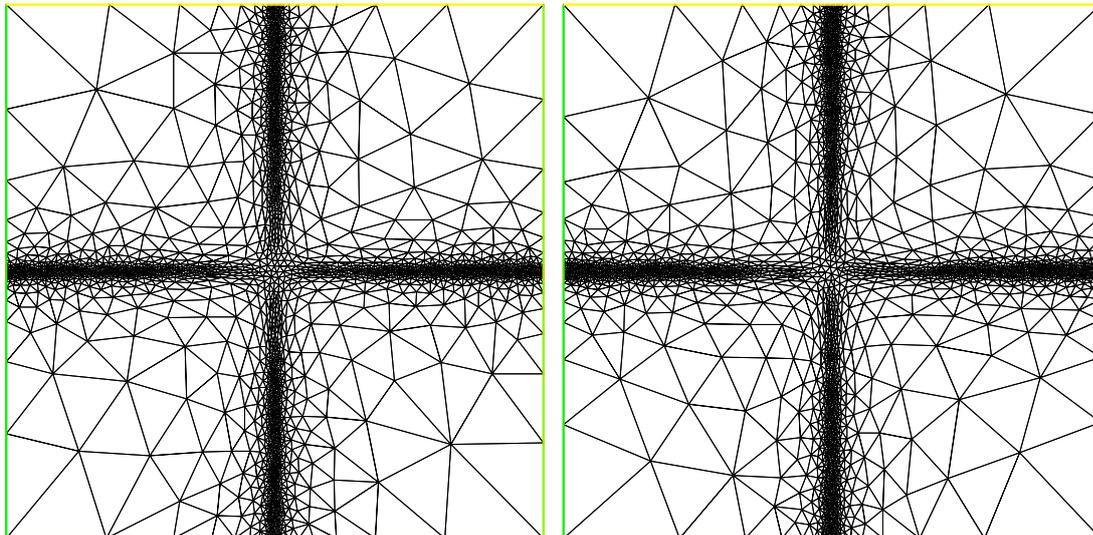


FIG. 2.7 – Maillages adaptés, matrice hessienne approchée : à gauche par moindres carrés, à droite par la nouvelle méthode.

2.6.2 En dimension trois d'espace

Nous avons réalisé des tests numériques sur quelques exemples. Globalement, les résultats ont la même tendance générale qu'en dimension deux pour la méthode des moindres carrés et la nouvelle méthode d'interpolation et différences finies locales.

Nous avons aussi fait des tests avec la méthode d'approximation polynomiale P_2 . Elle se comporte comme celle des moindres carrés mais avec des niveaux d'erreur un peu plus élevés. En effet le système obtenu pour les méthodes des moindres carrés et d'approximation P_2 est résolu de la même manière dans les deux cas. Cependant, la méthode d'approximation P_2 comporte une inconnue de plus que celle des moindres carrés. Dans la méthode des moindres carrés telle que nous l'avons implémentée, les inconnues sont les composantes du vecteur gradient et de la matrice hessienne. Ce nombre d'inconnues est égal au nombre de monômes de degré non nul d'un polynôme du second degré, auquel il faut rajouter le terme constant pour obtenir le nombre d'inconnues de la méthode d'approximation P_2 .

2.7 Conclusion

Nous avons présenté des propriétés de trois méthodes existantes et une nouvelle méthode d'approximation de la matrice hessienne d'une fonction supposée régulière, reconstruite à partir des valeurs nodales d'une fonction. Les valeurs nodales pouvant être la solution approchée d'une EDP par éléments finis. En négligeant l'écart entre la solution exacte et la solution approchée, le but de ces méthodes est d'approcher la matrice hessienne de la solution exacte. Il a été démontré [Les01, Ala03] que l'on obtient bon estimateur d'erreur d'interpolation P_1 Lagrange d'une fonction en se basant sur la matrice hessienne de cette fonction. La génération de métrique à partir de la matrice hessienne permet de construire des maillages adaptés au champ de métriques obtenu.

En dimension 2 d'espace, nous avons implémenté notre nouvelle méthode ainsi que celle des moindres carrés dans le logiciel freefem++. La nouvelle approche proposée est la plus précise en 2D lorsque l'interpolation polynomiale est de degré supérieur ou égale à deux.

Lorsque la fonction est reconstruite à partir de la solution P_1 éléments finis d'une EDP, la méthode des moindres carrés est très la plus fiable. Celle d'approximation et différences finies locales dans ce cas est limitée par la nature même de l'interpolée linéaire dont les dérivées de degré supérieur à un sont nulles ou fortement discontinues.

L'application à l'adaptation de maillage de ces deux méthodes montre qu'elles sont beaucoup plus précises que la méthode basée sur la formule de Green.

Chapitre 3

Généralisation de la construction de métriques pour d'autres estimations d'erreur d'interpolation

Sommaire

3.1	Introduction	52
3.2	Definitions	54
3.3	The problem description	57
3.4	Resolution	59
3.4.1	Algebraic resolution	59
3.4.2	Algorithm order	61
3.4.3	Convergence of the approximation	61
3.5	Validation	62
3.5.1	Some examples	62
3.5.2	Test with Freefem++	63
3.6	Conclusion	71

Résumé¹

Les métriques et indicateurs d'erreur [Hec03] sont d'importants outils utilisés dans un processus d'adaptation de maillage. Certains algorithmes utilisés dans la génération de maillages adaptés à la solution approchée d'une EDP se servent de ces outils pour prescrire la taille locale des mailles [Les01, Ala03, Les01, ADF06]. Dans le cadre d'une erreur d'interpolation éléments finis P_1 Lagrange d'une EDP, l'indicateur d'erreur basé sur la matrice hessienne [MVDG05, ZZ92, HK08a] est très utilisé. Les métriques générées à partir de la *valeur absolue* de la matrice hessienne sont ainsi utilisées pour faire de l'adaptation anisotrope où les mailles sont de longueur unité dans le champ de métriques obtenu.

Cependant l'utilisation de la matrice hessienne n'est justifiée formellement que pour des éléments finis affines. Il se pose donc le problème de générer des métriques pour l'interpolation polynomiale de degré supérieur [Hec08, CW71].

Nous proposons dans ce chapitre un algorithme numérique de complexité quasi-linéaire permettant de répondre à cette question en dimension deux, en considérant que l'erreur est localement décrite par une courbe fermée représentant une ligne de niveau de l'erreur locale. Cette courbe fermée est discrétisée en n points et le but de l'algorithme est de construire l'ellipse d'aire maximale contenue dans une courbe fermée. L'ellipse représente la boule unité de la métrique [Ala03].

Quelques exemples numériques illustrent graphiquement l'efficacité de cet algorithme. Il permet notamment de retrouver la métrique obtenue à partir de la *valeur absolue* de la matrice hessienne (solution analytique) [Ala03], dans le cas où l'on utilise la matrice hessienne comme indicateur d'erreur.

Nous avons procédé avec le logiciel Freefem++ à des tests avec une fonction pour laquelle on adapte un maillage, en nous servant de notre algorithme pour construire les métriques à partir de l'estimation d'erreur d'interpolation faite dans [Hec08].

Dans l'article [Hec08], il est proposé une majoration de l'erreur d'interpolation par une forme l -linéaire où intervient la dérivée l -ième de la fonction prise localement sur la boule unité. Cette forme l -linéaire est "approchée" par une norme dans une métrique locale.

Notre algorithme intervient au niveau de la forme l -linéaire et permet de générer une métrique locale à partir d'une ligne de niveau construite autour de chaque sommet. La construction de la ligne de niveau locale est facilitée par la nature de la forme.

En effet une forme l -linéaire étant un polynôme homogène de degré l , pour retrouver les coordonnées cartésiennes des points de discrétisation de la ligne de niveau \mathcal{E} d'un polynôme homogène E de degré l , il suffit de discrétiser l'intervalle $[0, 2\pi]$ en n

¹Ce travail fait en collaboration avec Frédéric Hecht, a été publié dans les proceedings of the 17th I.M.R.². Nous présentons en anglais, une version augmentée de la version originale.

² International Meshing Roundtable

morceaux. Pour tout X_k de coordonnées $r_k(\cos \theta_k, \sin \theta_k)$,

$$E(X_k) = (r_k)^l E(\cos \theta_k, \sin \theta_k) = \mathcal{E}.$$

Ce qui permet de trouver r_k et donc X_k .

Les résultats obtenus de ces tests comparés à l'adaptation de maillage basé sur des métriques issues de la matrice hessienne montrent que cette nouvelle approche est plus efficace pour la norme L^∞ lorsque l'on se sert de dérivées troisièmes comme estimateur d'erreur d'interpolation. On obtient nettement moins de mailles avec la nouvelle approche pour le même niveau d'erreur maximale dans les deux maillages adaptés. On constate qu'en prenant les dérivées quatrièmes comme estimateur d'erreur d'interpolation, on obtient plus d'informations sur la fonction et le maillage adapté est plus précis qu'avec les dérivées troisièmes.

Abstract

The mesh adaptation is a classical method for accelerating and improving the PDE finite element computation. Two tools are generally used: the metric [Hec03] to define the mesh size and the error indicator to know if the solution is accurate enough.

A lot of algorithms used to generate adapted meshes suitable for a PDE numerical solution for instance [Les01, Ala03] for discrete metrics, or [Les01, ADF06] for the continuous one, use those tools for the local specification of the mesh size.

Lot of PDE softwares like *Freefem++* [HP] use metrics to build meshes, the edges sizes of which are equal with respect to the metric field. The construction of metrics from the hessian matrix [MVDG05, ZZ92, HK08a] is only justify for the piecewise linear Lagrange finite element.

So there is the problem of metric generation when we have another interpolation error estimator [CW71, Hec08] that could be used for instance when the Lagrange interpolation needed is a k degree polynomial, $k > 1$.

To give an answer to that question, we propose in this paper an algorithm whose complexity is quasi-linear, in two spacial dimensions ; assuming that the error is locally described by a closed curve representing the error level set. Some efficient numerical examples are given. This algorithm allows us to obtain the analytical metric [Ala03], when the error indicator is based on the hessian matrix.

We have also done one comparison in the software *Freefem++* of mesh adaptation with metrics computed using this algorithm with respect to the interpolation error estimation described in [Hec08], and the method with metrics based on the hessian. The results seem to be better for the maximal error.

3.1 Introduction

We suppose once a metric field on a mesh is known, we can build an adapted mesh for that metric field [FG99, chap 21.4], [HG99, chap 20.3]. If we know the metric value on

3.1. Introduction

each vertex of the mesh for example, the method described in [HG99] modify the mesh by evaluating each edge length in the metric field (control space) using an interpolation of the metrics defined on the two vertices of the edge. When an edge length exceeds the "unity", a subdivision of that edge is done in the control space. This method is used in the software *Freefem++* with the mesh generator Bamg [Hec98]

Thanks to Cea lemma, the approximation error is upper bounded by the interpolation error. So our problem is posed for the interpolation error, we'll use the recent results described in [Hec08] which aim to bound the interpolation error of a function on a simplex with the norm of a vector inside a metric given by the $D^{(l)}$ derivative of the function.

We suppose that we know an estimation of the local interpolation error of a function on a 2D mesh around a vertex P in each direction ξ given by a function, and we want to dispose the points M of the triangulation around P such that the local interpolation error should be satisfy.

Let $E_p(\xi)$ be an estimation of the interpolation error in the direction of the vector ξ . If the mesh size is less than or equal to $\|\xi\|$ in the direction of ξ then the interpolation error will be less than $E_p(\xi)$. We want to have locally

$$|E_p(\xi)| \leq \mathcal{E}; \xi \in \mathbb{R}^2. \quad (3.1)$$

The previous inequality represents an area bounded by the level set

$$|E_p(\xi)| = \mathcal{E}.$$

Dispose the points M of the triangulation around the vertex P as close as possible to the level set while being inside the area delimited by that level set is equivalent to say that the interpolation error evaluated at each vertex of the triangulation going from the vertex P is less than or equal to its value on the level set. We want to have a mesh whose edges are equal to the "unity" with respect to a metric field, i.e all the points M are equi-distant from P in a local metric \mathcal{M} . So they belong to the unit ball of the metric \mathcal{M} , the biggest as possible that could be contained inside the closed line described by equation (3.1).

Let us find a metric prescribing the mesh size around that vertex P such as the triangles vertices should be close as possible to the level set while being inside the area delimited by that level set. How to build that metric?

In the following, after introducing shortly the results of [Hec08] and the metric notion, [Les01, Hec03, Ala03], we formulate the optimization problem that goes with and its resolution algorithm. Then we'll explain the algebraic consequences of the obtained equations in the third section. The fourth section talk about our algorithm convergence and complexity and some illustrating figures. The last section before concluding explains shortly the analytic metric obtainability from the hessian matrix, that our method allows to approach. We also give in that section an example of mesh adaptation for a

function with metrics generated by our algorithm with respect to the local interpolation error of [Hec08], and we compare the results obtained with mesh adaptation using metrics based on the hessian matrix, both of them done with the software *Freefem++*.

3.2 Definitions

We use the notations [BMR04, Chap. VII], which are introduced in the books [Cia02] [CL91, chap II].

- $x = (x_1, \dots, x_d) \in \mathbb{R}^d$, Sphere $S_d = \{x \in \mathbb{R}^d; \|x\| = 1\}$,
- $D^{(\ell)}u$ is the the derivative of u of order ℓ so if u is a real function, we have $D^{(0)}u = u$.
- $B^{\otimes \ell} : (\xi_1, \dots, \xi_\ell) \mapsto (B\xi_1, \dots, B\xi_\ell)$
- $W^{\ell,p}(K)$ is the set of functions of $L^p(K)$ such that all the partial derivatives of order $\leq \ell$ are in $L^p(K)$.
- $\|u\|_{W^{\ell,p}(K)} = \left(\int_K \sum_{\alpha \in [1..d]^\ell} |\partial_\alpha u|^p \right)^{\frac{1}{p}}$
- Let F be an affine application of \mathbb{R}^d with values in \mathbb{R}^d ,

$$\|D^{(k)}(v \circ F)\|_{L^p(K)} \leq \|D^{(1)}F\|^k \|D^{(k)}v\|_{L^p(F(K))}$$

d is the space dimension , K is a d -simplex (triangle if $d = 2$, or tetrahedron if $d = 3$), h_K the diameter of K and ρ_K the diameter of its inscribed ball, $|K|$ the measure of K and $|\partial K|$ the measure the border of K .

Definition 1 (d -simplex finite element of degree k). *A finite element (K, P_K, Σ_K) will be called d -simplex of degree k , if K is a d -simplex and if $P_k(K) \subset P_K$ where $P_k(K)$ is the set of polynomials $P[\mathbb{R}^d]$ restricted to K of degree less than or equal to k . Let \mathcal{I}_K^k be the interpolation operator with values in P_K and which keep unchanged the polynomials of $P_k(K)$, i.e if $u \in P_k(K)$, then $u = \mathcal{I}_K^k u$.*

Definition 2 (reference element). *The reference element is a regular d -simplex denoted \hat{K} , chosen with the size 1.*

Let F_K be the affine transformation such that $K = F_K(\hat{K})$, we denote: B_K the linear part of F_K which corresponds to the derivate of F_K ; and $\det(B_K)$ the determinant of B_K which is the Jacobian of F_K .

The size $h_{K,\xi}$ of an element K in the direction ξ , the size of the edges in the direction ξ of that edge. $\|B_K^{-1}\|^{-1}$ is the smallest size of the element denoted $h_K^- = \inf_{\xi \in S_d} h_{K,\xi}$. This element size can be represented by an ellipse associated to the ‘‘natural’’ metric of the element introduced in [Pic03, Cao05].

3.2. Definitions

Let u be a real function of K , we define its corresponding function $\hat{u} = u \circ F_K$ on \hat{K} . We have

$$x = F_K(\hat{x}), \quad \hat{u}(\hat{x}) = u(x), \quad u = \hat{u} \circ F_K^{-1}.$$

A finite element K is affine-equivalent if it has the following property

$$\widehat{\mathcal{I}}_K^k u = \mathcal{I}_{\hat{K}}^k \hat{u}.$$

Main Result

For any finite element (K, P_K, Σ_K) of definition 1 satisfying the previous property, with an associated metric \mathcal{M}_K ; let u be a function. For all integer $\ell \in [0..k+1]$ and for all $(p, q) \in [1, \infty]^2$ such that $W^{\ell,p}(K)$ be included in $\mathcal{C}^0(K)$ and $u \in W^{\ell,p}(K)$. If it exists a real constant $\kappa \in \mathbb{R}$ such that

$$\|(D^{(\ell)}u)(\xi, \dots, \xi)\|_{L^p(K)} \leq \kappa \|\xi\|_{\mathcal{M}_K}^\ell (h_K^-)^\ell = \kappa (\xi, \mathcal{M}_K \xi)^{\frac{\ell}{2}} (h_K^-)^\ell, \quad (3.2)$$

then we have

$$\|u - \mathcal{I}_K^k u\|_{L^q(K)} \leq \kappa C |K|^{\frac{1}{q} - \frac{1}{p}} (h_K^-)^\ell,$$

where C is a real positive constant depending only on d, ℓ, p, q .

And if $W^{\ell,p}(K) \subset W^{1,q}(K)$ then we have

$$\|u - \mathcal{I}_K^k u\|_{W^{1,q}(K)} \leq \kappa C |K|^{\frac{1}{q} - \frac{1}{p}} (h_K^-)^{\ell-1},$$

with C positive constant depending only on d, ℓ, p, q .

Proof. See [Hec08] for the proof in details.

This proof is based on a re-definition of the semi-norm $W^{\ell,p}$ of Sobolev

$$|u|_{W^{\ell,p}(\Omega)}^* = \left(\int_{\Omega} (\|D^\ell u(x)\|_{p, \mathcal{L}_\ell^s}^*)^p dx \right)^{\frac{1}{p}},$$

where there is a norm of an l -linear form given by

$$\|f\|_{p, \mathcal{L}_\ell^s} = \left(\sum_{(i_1, \dots, i_\ell) \in [1..d]^\ell} |f(e_{i_1}, \dots, e_{i_\ell})|^p \right)^{\frac{1}{p}}.$$

The relationship 3.2 is used with some consequences of the previous norms definitions to obtain the results. \square

Definition 3. A constant metric \mathcal{M} of \mathbb{R}^2 is a symmetric matrix positively definite that allows to define a distance in the euclidian metric space \mathbb{R}^2 .

Chapitre 3. Métriques pour d'autres estimations d'erreur d'interpolation

In fact the scalar product of two vectors \vec{X} and \vec{Y} under the metric space \mathbb{R}^2 is defined as: [FG99]

$$\langle \vec{X}, \vec{Y} \rangle_{\mathcal{M}} = {}^t \vec{X} \mathcal{M} \vec{Y} \in \mathbb{R}.$$

The euclidian norm of a vector \vec{AB} or the distance between the points A and B for the metric \mathcal{M} is defined by:

$$d_{\mathcal{M}}(A, B) = \|\vec{AB}\|_{\mathcal{M}} = \sqrt{{}^t \vec{AB} \mathcal{M} \vec{AB}}.$$

There is the situation for which the metric is non constant but continuous. In this case we have a *metric field* $\mathcal{M}(X)$ defined in each point X of the space. In this case, the norm of a vector \vec{AB} is given by

$$d_{\mathcal{M}}(A, B) = \|\vec{AB}\|_{\mathcal{M}} = \int_0^1 \sqrt{{}^t \vec{AB} \mathcal{M}(A + t\vec{AB}) \vec{AB}} dt.$$

A metric \mathcal{M} can be represented by its unit ball [Ala03], The unit ball under the metric \mathcal{M} defined at the vertex P is the set of points M that satisfies:

$$\|\vec{PM}\|_{\mathcal{M}} = \sqrt{{}^t \vec{PM} \mathcal{M} \vec{PM}} = 1.$$

Let us consider $\mathcal{M} = \begin{pmatrix} a & \frac{c}{2} \\ \frac{c}{2} & b \end{pmatrix}$ $a > 0, b > 0, 4ab - c^2 > 0; P(x_p, y_p); M(x, y).$

$$\|\vec{PM}\|_{\mathcal{M}}^2 = 1 \quad \iff \quad a(x - x_p)^2 + c(x - x_p)(y - y_p) + b(y - y_p)^2 = 1.$$

By writing

$$a = \frac{\cos^2 \theta}{\alpha^2} + \frac{\sin^2 \theta}{\beta^2}; \quad b = \frac{\cos^2 \theta}{\beta^2} + \frac{\sin^2 \theta}{\alpha^2}; \quad c = \sin 2\theta \left(\frac{1}{\alpha^2} - \frac{1}{\beta^2} \right); \quad (3.3)$$

which are bounded by:

$$\frac{1}{\alpha^2} \leq a \leq \frac{1}{\beta^2}; \quad \frac{1}{\alpha^2} \leq b \leq \frac{1}{\beta^2}; \quad \frac{1}{\alpha^2} - \frac{1}{\beta^2} \leq c \leq \frac{1}{\beta^2} - \frac{1}{\alpha^2}; \quad (3.4)$$

we obtain:

$$\frac{((x - x_p) \cos \theta + (y - y_p) \sin \theta)^2}{\alpha^2} + \frac{((y - y_p) \cos \theta - (x - x_p) \sin \theta)^2}{\beta^2} = 1,$$

which is an ellipse equation centered at P with semi-axes of length $\alpha > 0$ and $\beta > 0$; $\alpha \geq \beta$; where θ is the angle between the major axis and the abscises axis of the \mathbb{R}^2 canonic base.

3.3. The problem description

3.3 The problem description

We do not take care of the different norms used and the different constants of equation (3.2). We consider that

$$|E_p(\xi)| = \|(D^{(\ell)}u)(\xi, \dots, \xi)\|_{(K)}. \quad (3.5)$$

We want to find a local metric \mathcal{M} such that the right member of (3.2) should be closed to \mathcal{E} in (3.1).

Let $F(x, y)$ be $E_p(\xi)$. Our problem becomes drawing an ellipse that have the maximum area centered at P contained inside that given error curve or finding the parameters α , β and θ of that ellipse.

Let us consider $\alpha_1 = \frac{1}{\alpha^2}$ and $\alpha_2 = \frac{1}{\beta^2}$, we obtain from (3.3)

$$\alpha_2 = \frac{\sqrt{(a-b)^2 + c^2} + (a+b)}{2}; \quad \alpha_1 = \frac{-\sqrt{(a-b)^2 + c^2} + (a+b)}{2}.$$

Maximizing the ellipse area, the parameters of which are α ; β ; θ is the same as maximizing $\alpha\beta$ or minimizing $\alpha_1\alpha_2$ which is equivalent to minimize $(4ab - c^2)$.

We look at the problem in a numerical point of view and suppose that the vertex P is at the origin.

Let us consider a discretization of our curve with n points M_i of position (x_i, y_i) . We have to find three reals a, b and c that minimize $(4ab - c^2)$ under the constraints

$$\begin{cases} a > 0, b > 0, \\ ax_i^2 + by_i^2 + cx_iy_i \geq 1, 0 \leq i \leq n-1, \\ 4ab > c^2. \end{cases}$$

Without "good" properties of the minimization function (convexity, quasi-convexity), we didn't find any algorithm that guarantees a global minimum; although it exists because the linear constraints of the second line of the previous system form a close set. The resolution of this problem in this form need the construction of the constraints polyhedron where we'll find the minimum. As $(a, b, c) \in \mathbb{R}^3$ the classical resolution algorithm will be $\mathcal{O}(n^3)$ complexity and can be an expensive part of a mesh adaptation process. To reduce that cost we propose to solve an approximated problem whose algorithm will be $\mathcal{O}(n^k)$; $k \leq 2$ complexity.

Let us consider two real non negative numbers ϵ_0 and ϵ close to zero, let us call M_0 the point of the error curve the most closed to the origin P of our ellipse, and M_i another point of that error curve. Then we find an ellipse that have the maximal area. Let ϵ_0 be the distance between that ellipse and M_0 , and let ϵ be the distance between that ellipse and M_i (figure 3.1). The distance between the ellipse and a point M_j of the error curve

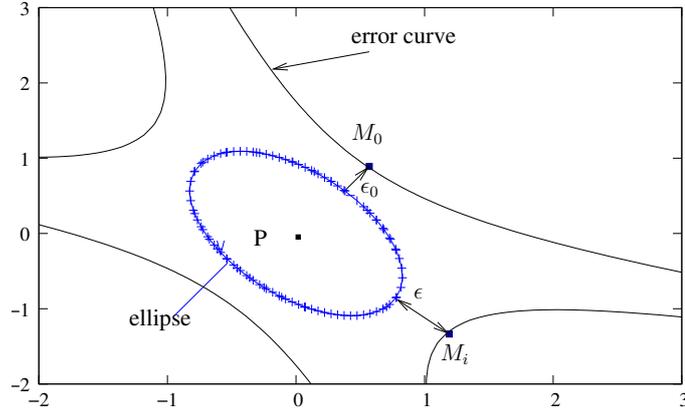


Figure 3.1: Parameters

will be consider as the distance between M_j and the intersection point of the vector $\overrightarrow{M_j P}$ and the ellipse. Let us consider a point X of the ellipse on the segment $[P, M_i]$ such that $\|\overrightarrow{M_i X}\| = \epsilon$, the value of X is $(1 - \frac{\epsilon}{\|X_i\|})X_i$. let us consider $r_i = \|X_i\|$.

Our problem becomes:

Find three real numbers a, b and c that minimize $(4ab - c^2)$ under the constraints

$$\left\{ \begin{array}{l} a > 0, b > 0, \\ ax_0^2 + by_0^2 + cx_0y_0 = \left(\frac{r_0}{r_0 - \epsilon_0}\right)^2, \\ ax_i^2 + by_i^2 + cx_iy_i = \left(\frac{r_i}{r_i - \epsilon}\right)^2, \quad 1 \leq i \leq n-1, \\ ax_k^2 + by_k^2 + cx_ky_k \geq 1, \quad 1 \leq k \leq n-1, k \neq i, \\ 4ab > c^2. \end{array} \right. \quad (3.6)$$

Numerically, the constraint $4ab > c^2$ need a threshold $\mathcal{T} > 0$ for which a solution of $4ab - c^2 - \mathcal{T}$ will be consider as a minimizer of $4ab - c^2$.

Minimization of $4ab - c^2$.

$4ab - c^2$ is four times the product of the eigenvalues of the matrix \mathcal{M} . Let us call R_{max} the euclidian norm of the error point of the curve the most far away from its center P . As $\alpha \leq R_{max}$ and $\beta \leq r_0 - \epsilon_0$, we obtain:

$$\mathcal{T} = \left(\frac{2}{R_{max}(r_0 - \epsilon_0)} \right)^2$$

3.4. Resolution

3.4 Resolution

The algorithm consists in:

- Discretizing the error curve around the vertex P into n points, determining the point M_0 of the curve which is the most closed to the origin P and the point M_{max} of the curve which is the most far away from P ;
- moving out the points on the axes and also the point which is eventually aligned with M_0 and the origin;
- for all fixed M_i , switching the constraints for all the M_k ($k \neq 0$; $k \neq i$) and determining the optimal values of a , b and c .

But the problem does not always have solution if the numbers ϵ_0 and ϵ are chosen arbitrary. We have to take care of the algebraic consequences of the system (3.6).

3.4.1 Algebraic resolution

Let us examine the two equations of system (3.6)

If $x_0 = 0$, then $b = \frac{1}{(|y_0| - \epsilon_0)^2}$.

- If $x_i = 0$, then $b = \frac{1}{(|y_i| - \epsilon)^2}$ so we must have

$$\epsilon = |y_i| - |y_0| + \epsilon_0. \quad (3.7)$$

- If $y_i = 0$ and $y_k = 0$, we must have

$$\epsilon \geq |x_i| - |x_k|. \quad (3.8)$$

- If $x_i y_0 - y_i x_0 = 0$ and $x_i \neq 0$, we must have in this case

$$\epsilon = r_i \left(1 - \frac{x_0(r_0 - \epsilon_0)}{x_i r_0} \right). \quad (3.9)$$

Remark. We observe that if one coefficient of system (3.6) equal zero or if the points M_i , M_0 and the origin P are aligned, the choice of the parameters ϵ (or ϵ_0 in some cases) is not arbitrary. Those parameters should satisfy (3.7), (3.8) or (3.9) for the previous cases, but it will add new constraints to the problem and will not allow the precision we want.

The points representing those coefficients, when they equal zero, are almost four (the four half-axes). They will be turn out of the axes with a small angle and also the eventually point on the axe (P , M_0). Doing that will not sensitively modify the problem

neither its solution. We will consider that $x_0, x_i, x_k, y_0, y_i, y_k$ are all not zero for all i and for all k , and that $x_i y_0 - y_i x_0$ is not zero for all i . From both two equations of system (3.6), we extract c and a as a function of b .

Let us write:

$$\begin{aligned}\delta &= \frac{x_i}{x_0(x_i y_0 - x_0 y_i)} \left(\frac{r_0}{r_0 - \epsilon_0} \right)^2 - \frac{x_0}{x_i(x_i y_0 - x_0 y_i)} \left(\frac{r_i}{r_i - \epsilon} \right)^2; \\ \gamma &= -\frac{y_i}{x_0(x_i y_0 - x_0 y_i)} \left(\frac{r_0}{r_0 - \epsilon_0} \right)^2 + \frac{y_0}{x_i(x_i y_0 - x_0 y_i)} \left(\frac{r_i}{r_i - \epsilon} \right)^2; \\ \tau &= \frac{y_i y_0}{x_i x_0}; \quad \lambda = \frac{x_0 y_i + y_0 x_i}{x_i x_0}; \quad \beta_k = y_k^2 + x_k^2 \tau - x_k y_k \lambda; \\ C_k &= 1 - \frac{x_k(y_k x_i - y_i x_k)}{x_0(x_i y_0 - x_0 y_i)} \left(\frac{r_0}{r_0 - \epsilon_0} \right)^2 + \frac{x_k(y_k x_0 - x_k y_0)}{x_i(x_i y_0 - x_0 y_i)} \left(\frac{r_i}{r_i - \epsilon} \right)^2;\end{aligned}$$

then,

$$c = \delta - \lambda b; \quad a = \gamma + \tau b.$$

The inequality before the last one of (3.6) becomes

$$\beta_k b \geq C_k, \quad 1 \leq k \leq n-1; \quad k \neq i. \quad (3.10)$$

So the function to minimize becomes

$$G(b) = (4\tau - \lambda^2)b^2 + 2(2\gamma + \lambda\delta)b - \delta^2 - \mathcal{T},$$

the roots of which are

$$\begin{aligned}b_1 &= \left(\frac{1}{x_i y_0 - x_0 y_i} \right)^2 \left[\left(\frac{x_0 r_i}{r_i - \epsilon} \right)^2 + \left(\frac{x_i r_0}{r_0 - \epsilon_0} \right)^2 + \mathcal{D} \right]; \\ b_2 &= \left(\frac{1}{x_i y_0 - x_0 y_i} \right)^2 \left[\left(\frac{x_0 r_i}{r_i - \epsilon} \right)^2 + \left(\frac{x_i r_0}{r_0 - \epsilon_0} \right)^2 - \mathcal{D} \right];\end{aligned}$$

where

$$\mathcal{D} = \frac{2|x_i x_0|}{(r_0 - \epsilon_0)} \sqrt{\left(\frac{r_i r_0}{r_i - \epsilon} \right)^2 + \left(\frac{x_0 y_i - y_0 x_i}{R_{max}} \right)^2}.$$

The inequalities (3.4), (3.10) and the following bounds

$$\frac{(r_0 - \epsilon_0)^2}{R_{max}} \leq \beta \leq r_0 - \epsilon_0 \leq \alpha \leq R_{max},$$

gives b_{min} and b_{max} such that $b \in [b_{min}, b_{max}]$. So, we will compare $G(b_{min})$ and $G(b_{max})$ to determine the value of b that minimize G .

3.4. Resolution

3.4.2 Algorithm order

This algorithm is globally quasi-linear because for each fixed M_i only one (the first) unsatisfied constraint on the M_k implies an interruption of the M_k 's loop and switch to the next M_{i+1} (when the distance between a point of the error curve and the ellipse is greater than ϵ , that point will not satisfy any constraints). The points that satisfy the constraints are only those in the regions where the ellipse is tangent to the error curve, and their number is few. The only case where for each fixed M_i we go through all the M_k is the case where the error curve is already an ellipse and in this case the algorithm order is $\mathcal{O}(n^2)$. But if the error curve is already an ellipse, we don't need this algorithm.

3.4.3 Convergence of the approximation

It is natural to think that M_0 will not be the point of the error curve that is the most far away from the ellipse. So we can find ϵ_0 for which the solution of our approach problem converges to the optimal solution.

We can have an upper bound of ϵ_0 :

The disc area of radius r_0 is less than the ellipse area of parameters $r_0 - \epsilon_0$ and R_{max} so, $\epsilon_0 < r_0 \left(1 - \frac{r_0}{R_{max}}\right)$. Although we don't have any absolute criteria of choosing ϵ_0 , when changing its values within a few iterations (one dozen) inside the code between 10^{-5} and its upper bound, we optimize the approximation (see figures 3.2, 3.3).

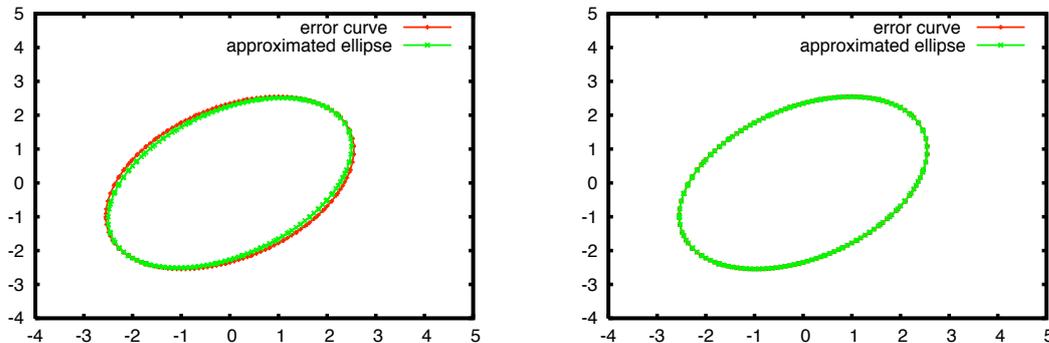


Figure 3.2: An ellipse of parameters $\theta = \frac{\pi}{4}$, $\alpha = 3$, $\beta = 2$, $n = 159$; left: $\epsilon_0 = 10^{-1}$; right: $\epsilon_0 = 10^{-4}$.

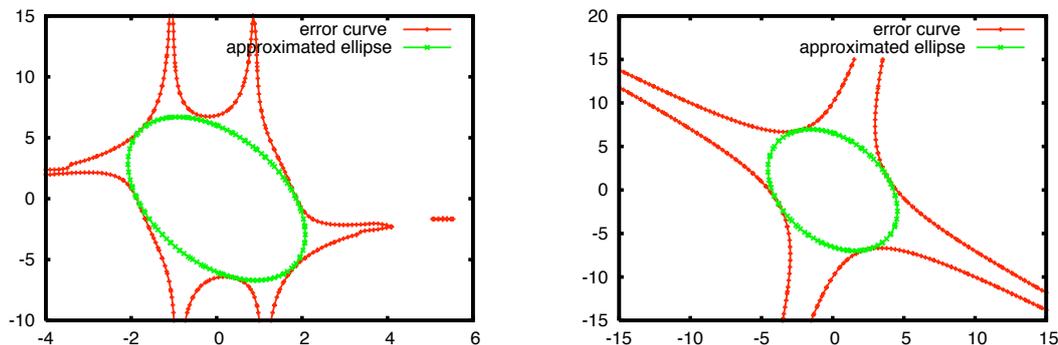


Figure 3.3: left: $\mathcal{E} = 59$, $\epsilon_0 \text{ opt.} = 10^{-5}$, $n = 285$, $F(x, y) = -0.2y^3x^2 - yx^4 + 0.2y^3 - 9x^3 - 0.5xy^2 + 0.005x^2 - 0.1y^2$, right: $F(x, y) = 0.05x^2 - 0.01y^2 + 0.05xy$, $\mathcal{E} = 1$, $\epsilon_0 \text{ opt.} = 0.001$, $n = 304$.

3.5 Validation

When solving numerically a partial differential equation with piece wise linear Lagrange finite element, one can use the hessian matrix of the function to approach as error estimator to generate adapted meshes [Ala03].

As the hessian matrix \mathcal{H} is a symmetric matrix, its absolute value define bellow when invertible is positive semi definite so it can be used to define a metric.

$$|\mathcal{H}| = \mathcal{R}|\Lambda|\mathcal{R}^{-1},$$

where $|\Lambda|$ is the diagonal matrix formed by the absolute value of the eigenvalues and \mathcal{R} the matrix of the eigenvectors of \mathcal{H} . When \mathcal{H} is not invertible, the zero eigenvalue is replaced by $\frac{1}{h_{max}^2}$, where h_{max} is the maximal authorized edge size in the mesh.

3.5.1 Some examples

When applying our algorithm in some cases with

$$F(x, y) = \langle (x, y), \mathcal{H} \cdot (x, y) \rangle,$$

we obtain comparative results with the metric given by the absolute value of \mathcal{H} (analytical) figures 3.4 and 3.5.

In the example of figure 3.4 for the case \mathcal{H} invertible, one can observe that the obtained ellipse is closed to the analytical one when the number n of discretization points is enough, which equation in that example is

$$x^2 + y^2 + xy = 1.$$

3.5. Validation

The example of figure 3.5 show the case \mathcal{H} non invertible where h_{max} have been arbitrary chosen in the analytical case which equation in that example is

$$0.5 \left(\left(\frac{1}{h_{max}^2} + 2 \right) (x^2 + y^2) + 2 \left(\frac{1}{h_{max}^2} - 2 \right) xy \right) = 1.$$

We just need to variate the value of h_{max} to coincide with the approached solution.

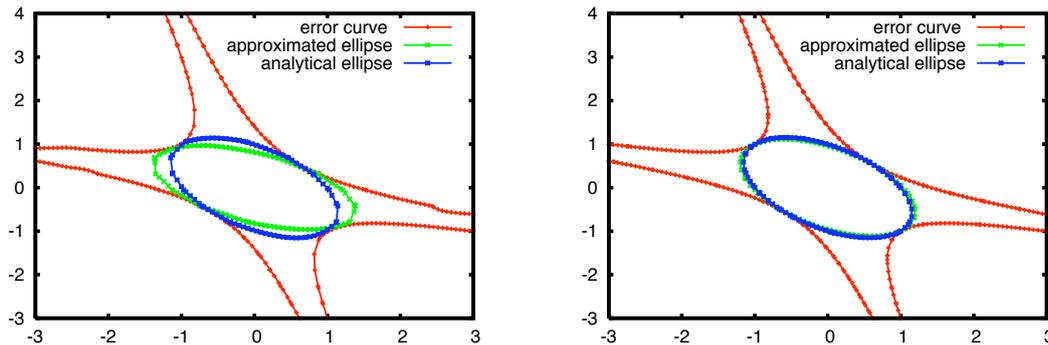


Figure 3.4: $\mathcal{E} = 1$; $F(x, y) = 0.5x^2 + 0.5y^2 + 2xy$; left: $n = 228$; right: $n = 288$.

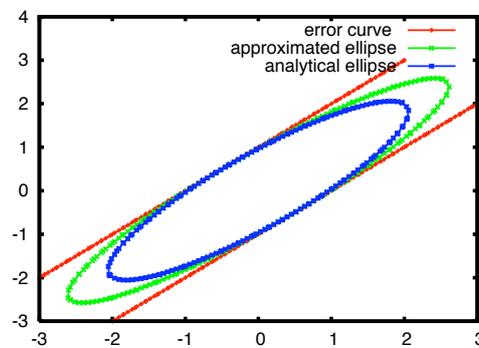


Figure 3.5: $\mathcal{E} = 1$; $n = 234$ $F(x, y) = x^2 + y^2 - 2xy$.

3.5.2 Test with Freefem++

This algorithm have been implemented into Freefem++ and we present the obtained results when doing mesh adaptation for a function, in the following code.

```

load "MetricKuate"
include"fonction.edp"
mesh Th=square(5,5,[(x-0.5)*2,(y-0.5)*2]);
real x0,y0;
real coef =10;
fespace Vh(Th,P1);
fespace Wh(Th,P2);
fespace Ph(Th,P0);

func f = tanh(c*(sin((5*y))-(2 * x)))+(y*x*x)+ pow(y,3);
func err=(fxxx*x0*x0*x0+3*fxxxy*x0*x0*y0+3*fxyyy*x0*y0*y0
+fyyyy*y0*y0*y0)*coef;
//fxxx,fxxy,fxyy,fyyy derivatives of f and the constant c
//are defined in file fonction.edp

for(int i=1;i<10;i++)
{
  Vh m11,m12,m22;
  Wh f2=f;
  MetricKuate(Th,150,0.0001,3,err,[m11[],m12[],m22[]],[x0,y0]);
  real cc=10;
  Th=adaptmesh(Th,cc*m11,cc*m12,cc*m22,IsMetric=1,
               hmin=0.00001,nbvx=1000000);
  cout<<m11[].max<<" "<< m12[].max <<" "<< m22[].max <<endl;
  plot(Th,wait=0,ps="Th.eps");
  plot(f2,wait=0);
  Ph eh = (abs(f2-f));
  Ph leh= log10(eh);
  real[int] viso=[-9,-8,-7,-6,-5,-4,-3,-2,-1,0,1];
  plot(leh,fill=1,wait=0,viso=viso,value=1,ps="leh.eps");
  cout<<i<<"...."<<eh[].min<<" "<<eh[].max<<" "<<eh[].sum/eh[].n
  <<" "<<int2d(Th)(eh)/Th.area<<" "<<Th.nt<<" "<<Th.nv<<endl;
}
Th=square(5,5,[(x-0.5)*2,(y-0.5)*2]);

real cerr=(0.005*8.02579e-05)^0.5 ;
for(int i=1;i<10;i++)
{
  Vh m11,m12,m22;
  Wh f2=f;
  Th=adaptmesh(Th,f,err=cerr,hmin=0.00001,nbvx=1000000);
  cout<< m11[].max <<" "<< m12[].max <<" "<< m22[].max <<endl;
  plot(Th,wait=0,ps="Th2.eps");
  plot(f2,wait=0);
  Ph eh = (abs(f2-f));
  Ph leh= log10(eh);
  real[int] viso=[-9,-8,-7,-6,-5,-4,-3,-2,-1,0,1];
  plot(leh,fill=1,wait=0,viso=viso,value=1,ps="leh2.eps");
  cout<<i<<"...."<<eh[].min<<" "<<eh[].max<<" "<<eh[].sum/eh[].n
  <<" "<<int2d(Th)(eh)/Th.area<<" "<<Th.nt<<" "<<Th.nv<<endl;
}

```

3.5. Validation

In that code, the error function is given by the third derivatives of the function f . That error function is written as an homogeneous third degree polynomial of the coordinates of the local unit ball, as it's shown in [Hec08]. We use our algorithm with $\mathcal{E} = 1$ and 150 points of discretization of the local error curve, we can observe on figure 3.6 that a "good" discretization of the local error curve is important for our algorithm. We compute the metric on each vertex of the mesh, and the mesh is adapted with the obtained metric in the first loop. In the code, the parameters cc and $coef$ are used to change the value of the error. cc is applied on the metric, and $coef$ on the local error function.

Let err be the maximal error, and let Ct be a constant. err is given by

$$err = \frac{Ct}{coef \cdot cc^{l/2}}.$$

Using the second loop and the result of the first loop, we computed backward the real $cerr$ useful to have the same error level on each final mesh.

In the second loop, we made the usual mesh adaptation of Freefem++ for the same function f , based on metrics given by the hessian matrix.

Comments In our example $l = 3$. According to the results of the second table of figure 3.8, if we take $Ct \simeq 2.6e-5$, we obtain $\frac{Ct}{10^{3/2}} = 8.22e-5$. It corresponds to the level of the maximal error in the first table.

We can observe on figures 3.7, 3.10, 3.9 and 3.8 that for the same maximal error level around 10^{-3} or 10^{-5} , the error estimator described in [Hec08] when using the third derivatives and our algorithm uses much less elements than the classical mesh adaptation method with metrics based on the hessian matrix. We see that the convergence is obtained after five iterations, see figure 3.8. For the hessian based error built mesh, if we suppose that the function is a polynomial of degree 3, then the adaptation will be accurate. As our function is not a polynomial of degree three, we can observe that on figure 3.10, there is two thin mesh layers bounding the middle layer, and the corners of the domain are meshed with small size elements for the hessian based method. Those wrong effects are not observed with our new approach.

The figure 3.11 shows the results when we take the fourth derivatives as error estimation, instead of the third derivatives as in figure 3.10. One can observe in figure 3.11 that around the areas where there is no significant variation of the function, the edges are biggest but smallest in the areas of important variation of the function than they are in figure 3.10. So the using of fourth derivatives is more accurate than the using of third derivatives for error estimations.

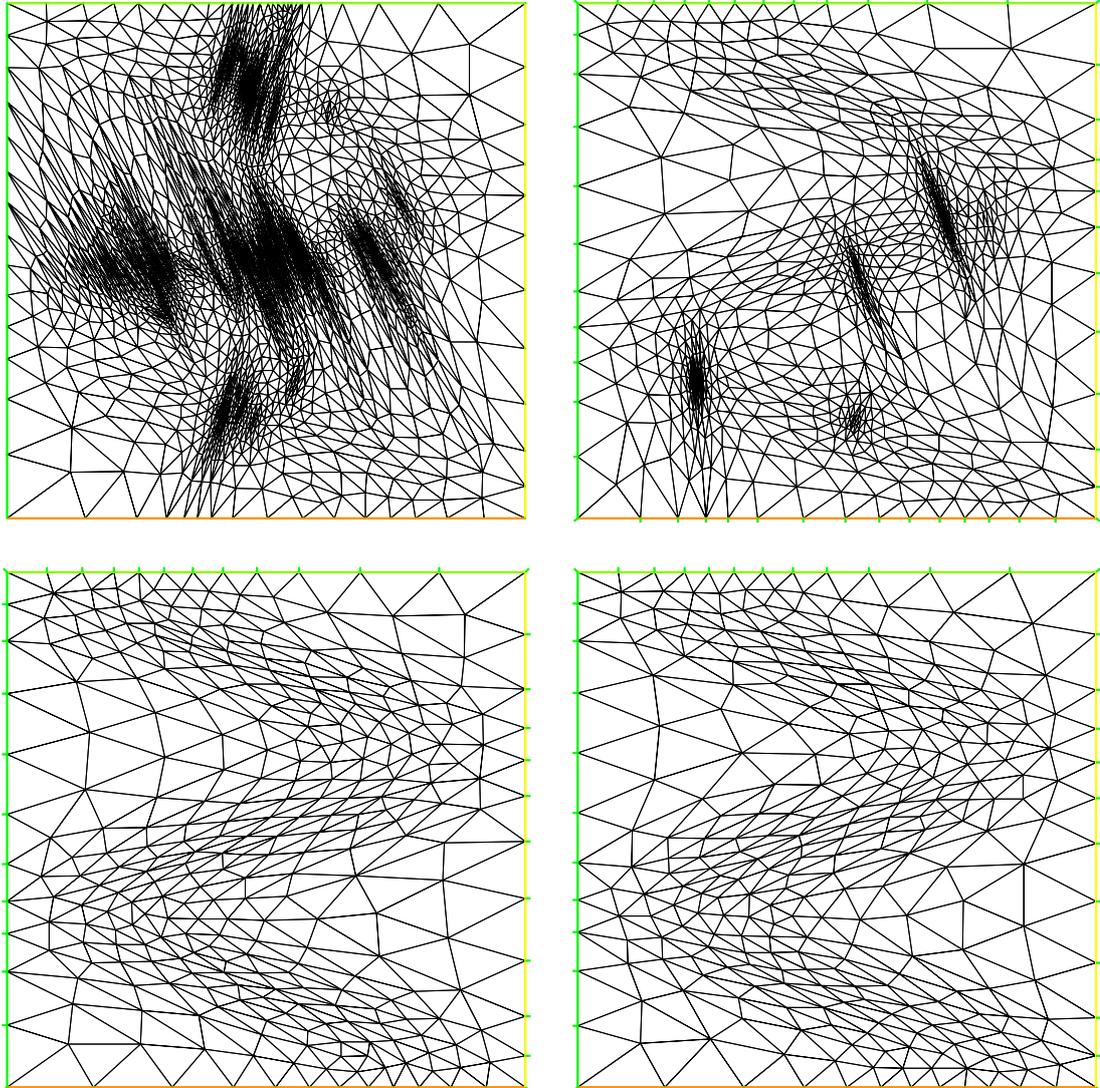


Figure 3.6: The effect of the number n of points used to discretize the local error curve on the adapted meshes. Top left: $n = 50$, top right $n = 80$, down left $n = 100$, down right $n = 150$.

3.5. Validation

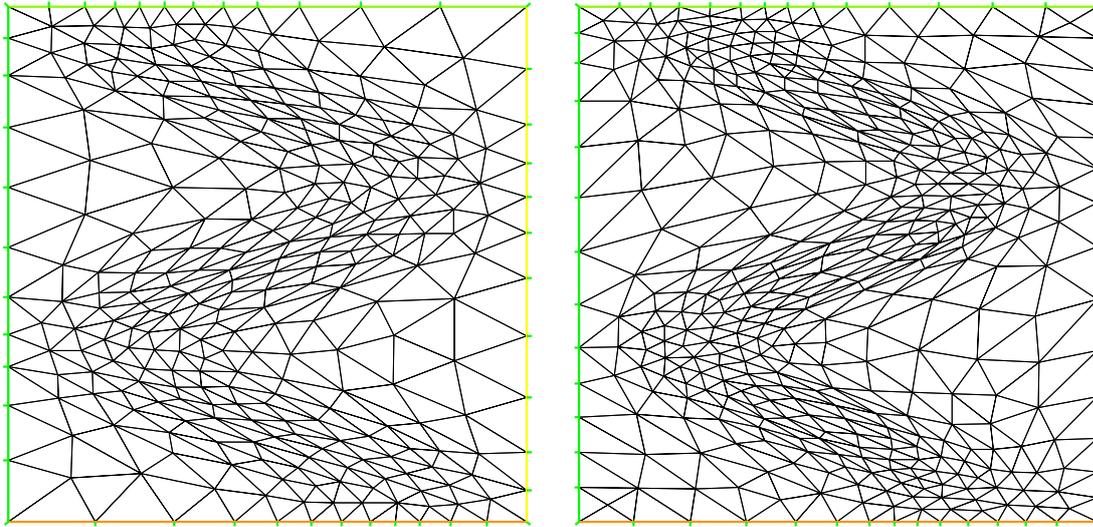


Figure 3.7: Adapted meshes for the same maximal error level around 10^{-3} , $cc=1$, $coef=10$. Left: metrics computed with this algorithm for the (3.5) error estimator. Right: method based on the hessian.

iterations	error min 1	error min 2	error max 1	error max 2	vertices1	vertices2
1	1.20059e-05	4.22866e-06	0.356521	0.358384	2050	3923
2	3.11655e-09	2.48466e-09	0.0043082	0.00437699	5194	17235
3	3.62071e-09	1.52523e-11	9.67516e-05	9.9182e-05	5198	15381
4	3.69877e-09	2.19181e-10	7.95773e-05	0.000103307	5194	15210
5	1.10912e-09	4.76638e-10	7.79361e-05	0.000106652	5264	15188
6	7.05385e-09	3.61698e-10	7.77929e-05	8.02886e-05	5200	15190
7	1.89551e-09	9.00541e-12	8.01738e-05	7.80091e-05	5200	15186
8	5.05435e-10	1.42422e-10	7.75686e-05	8.22038e-05	5200	15186
9	9.78865e-10	9.68075e-10	8.02579e-05	7.7833e-05	5218	15180
1	1.55839e-07	1.00832e-05	0.358347	0.35043	425	460
2	9.65766e-07	3.80745e-08	0.0134088	0.064436	536	743
3	3.58336e-06	2.93163e-08	0.00281739	0.00536942	536	733
4	2.34807e-07	1.97044e-07	0.0027611	0.00278402	540	733
5	1.10585e-06	9.35475e-08	0.00291751	0.0025183	540	732
6	7.26946e-08	3.9567e-07	0.00264979	0.00275217	540	733
7	1.49178e-06	7.63447e-08	0.00266049	0.00270342	540	733
8	8.80737e-08	5.55839e-08	0.00267491	0.00271847	540	733
9	1.04068e-06	2.8896e-07	0.00269423	0.00285419	540	733

Figure 3.8:

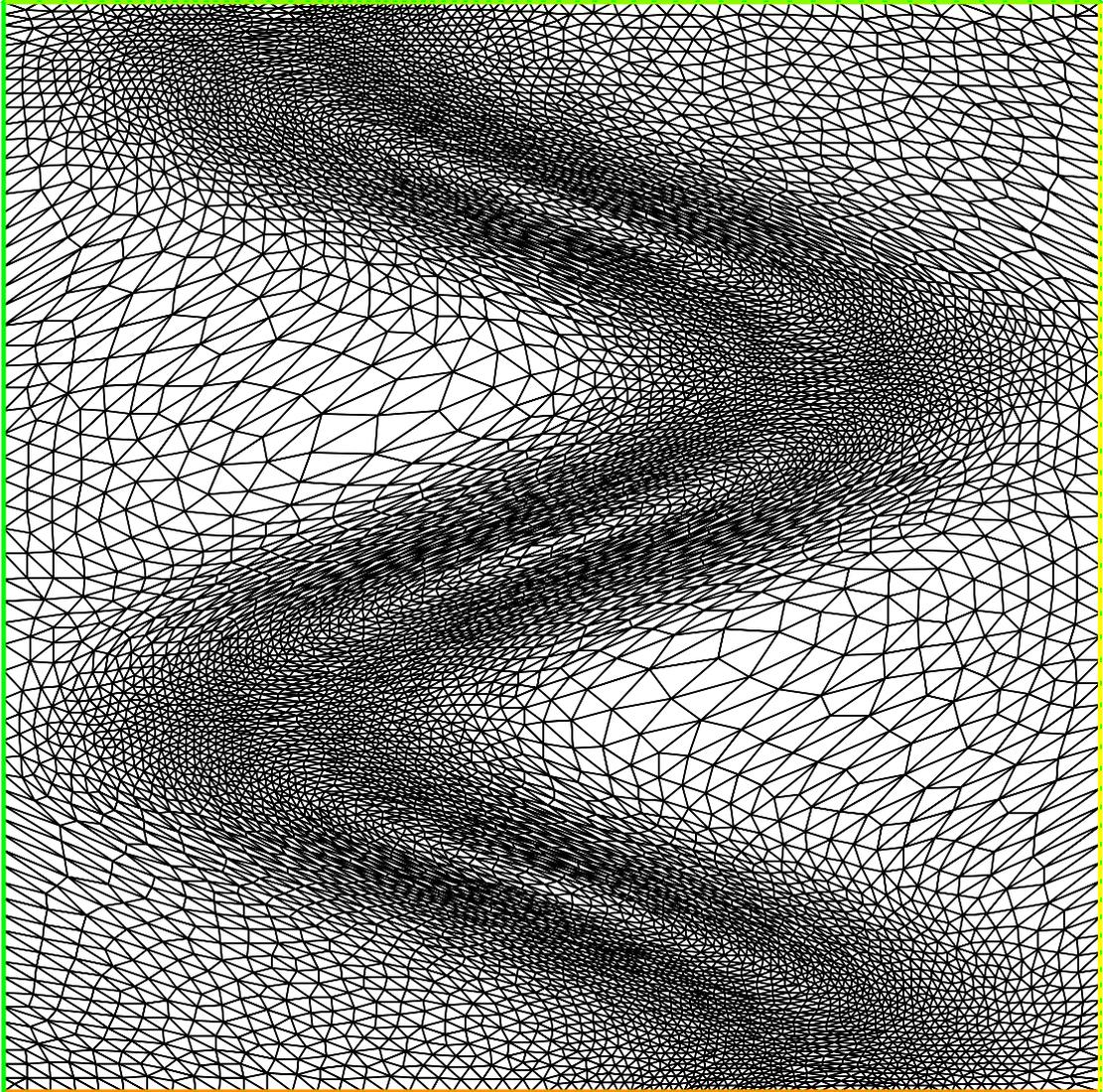


Figure 3.9: Adapted meshes for the maximal error level around 10^{-5} , $cc=10$, $coef=10$, method based on the hessian.

3.5. Validation

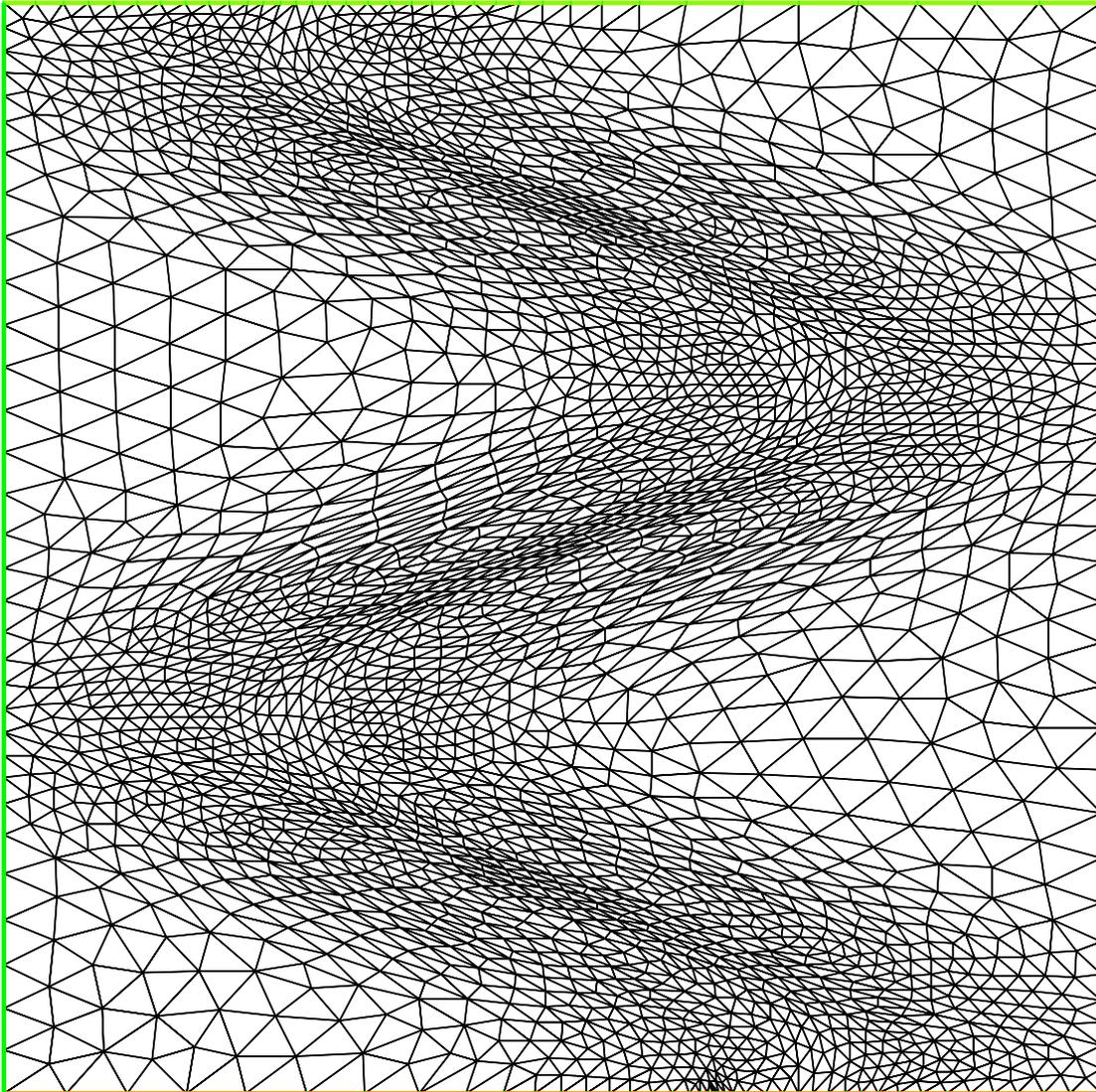


Figure 3.10: Adapted meshes for the maximal error level around 10^{-5} , $cc=10$, $coef=10$, metrics computed with this algorithm for the (3.5) error estimator, using the third derivatives.

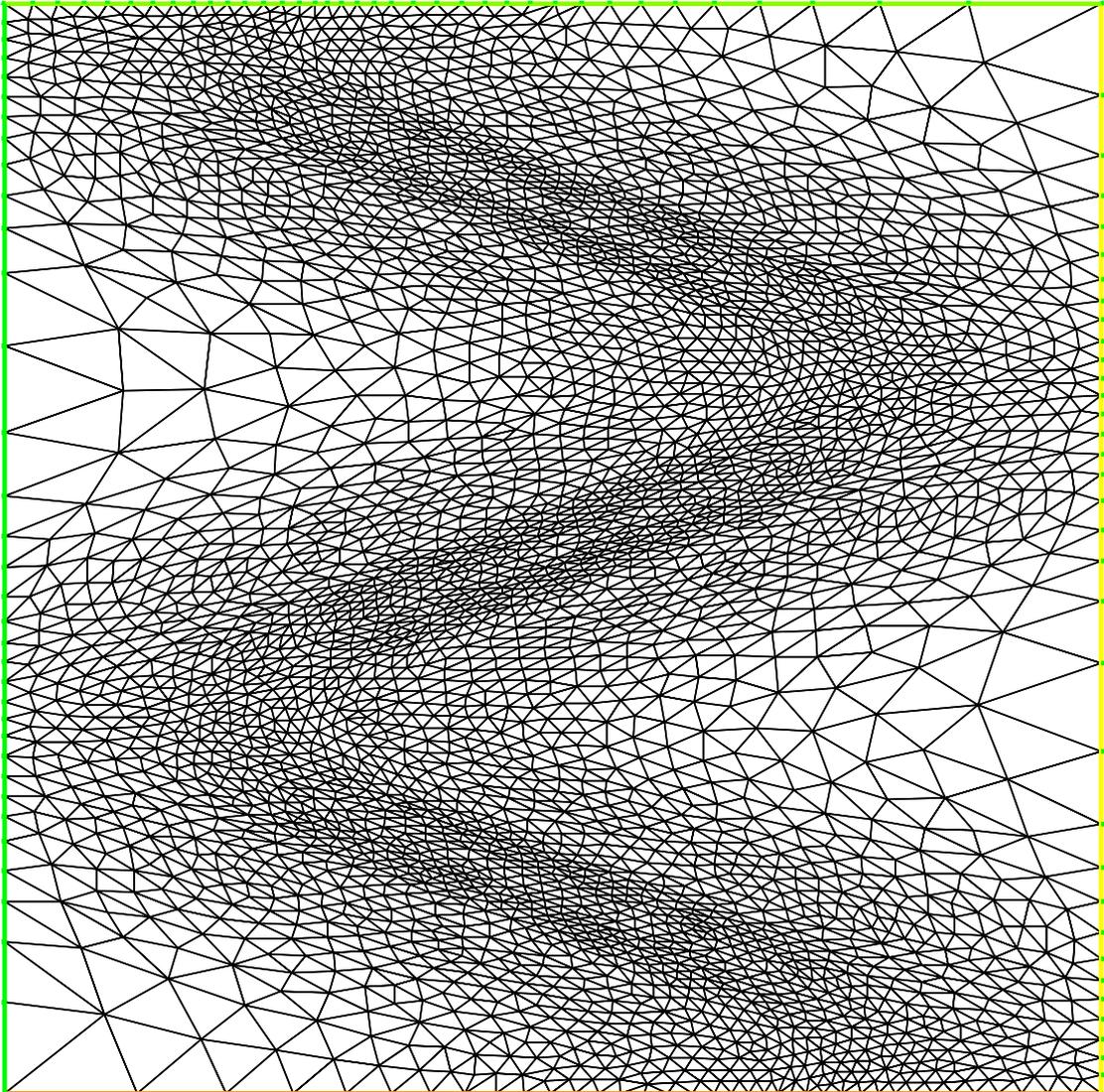


Figure 3.11: Adapted meshes. $cc=10$, $coef=10$, metrics computed with this algorithm for the (3.5) error estimator, using the fourth derivatives.

3.6 Conclusion

We have proposed a quasi-linear complexity algorithm in two spacial dimension useful to build numerically metrics for any given error estimation represented by a closed curve around a mesh vertex. As a metric can be represented by an ellipse, this algorithm is based on the optimization of an ellipse area. The main purpose of this work is to adapt mesh when doing numerical simulations where the interpolation error estimator is not based on the hessian matrix.

The obtained numerical results of our tests are encouraging. We have presented an example of mesh adaptation using metrics computed with this algorithm with respect to the new interpolation error estimation [Hec08], done in Freefem++. That example seems to give better results than the usual adaptation procedure of Freefem++ with metrics based on the hessian, according the maximal error. We hope that we can expect "good" performances of the future new mesh adaptation routine of the software Freefem++ [HP] where this algorithm could be used for the Lagrange finite element interpolation of higher order.

A future work on the local representation of other types of error estimators like residual estimators could be interesting. Then we will see how this algorithm could used or not on those cases. Its development into dimension three is a future challenge in so far as the software Freefem++ is now moving from dimension two to dimension three.

We thank the reviewers for their comments which helped to improve the quality of this paper. We also thank Pascal Ventura who help us for the achievement of this work.

Chapitre 4

Reconstruction de dérivées troisièmes

Sommaire

4.1	Introduction	75
4.2	Approximation de dérivées troisièmes par la méthode des moindres carrés	75
4.2.1	Exemple	77
4.2.2	Application à l'adaptation de maillage	84
4.3	Conclusion	87

4.1 Introduction

Les différentes techniques d'adaptation de maillage actuellement mises en oeuvre sont pour la plus part basées sur l'utilisation d'estimateurs [Hec03, Ala03, ZZ92], permettant de contrôler l'erreur locale sur le maillage en la majorant suivant une norme choisie. Ces travaux portent essentiellement sur l'interpolation linéaire [DS91b], [DS91a, Les01, Ala03, LH06].

Les récents développements effectués dans [Hec08] nous permettent de disposer d'estimations d'erreur qui peuvent s'utiliser pour de l'interpolation polynomiale généralisée. En particulier lorsque l'interpolation polynomiale est P_2 Lagrange, l'estimation d'erreur est majorée par ses termes de dérivée troisième. Nous avons eu besoin au chapitre 3 de dérivées troisièmes pour approcher une fonction, les résultats ont montré que l'on obtenait une meilleure approximation qu'avec la matrice hessienne. Dans le cadre de résolution d'une EDP par éléments finis P_2 , les procédures d'adaptation de maillage basée sur la matrice hessienne reconstruite à partir des valeurs de la solution calculée ne sont formellement pas optimales. Habituellement, cette situation est gérée par une adaptation de maillage basée sur les dérivées de la solution approchée.

Dans ce chapitre, nous proposons une étude de la reconstruction des dérivées troisième par la méthode des moindres carrés en dimension deux. Une implémentation numérique est faite et des exemples obtenus avec le logiciel Freefem++ sont proposés.

4.2 Approximation de dérivées troisièmes par la méthode des moindres carrés

Nous rappelons le principe de cette méthode, appliquée au calcul de toutes les dérivées jusqu'à l'ordre 3.

Soit Ω_h un maillage. Sur chaque noeud de Ω_h , on dispose de la solution approchée u_h d'une EDP, dans une base d'éléments finis. Les dérivées de u_h ne sont en général pas régulières. Soit u^* une fonction régulière reconstruite à partir des valeurs de u_h aux noeuds de la triangulation. On veut déterminer es dérivées troisièmes de u^* .

Pour estimer toutes les dérivées troisièmes de u^* au noeud x_n , on effectue un développement de Taylor de u^* en un point x à partir du point x_n :

$$u^*(x) = u^*(x_n) + \overrightarrow{x_n x} \cdot \nabla u^*(x_n) + \frac{1}{2} \langle \overrightarrow{x_n x}, H_{u^*}(x_n) \overrightarrow{x_n x} \rangle + \frac{1}{6} D^3 u^*(x_n) \cdot (\overrightarrow{x_n x})^3 + O(\|\overrightarrow{x_n x}\|^4), \quad (4.1)$$

où \langle, \rangle désigne le produit scalaire de \mathbb{R}^d ; $d = 2, 3$.

Pour obtenir toutes les dérivées jusqu'à l'ordre 3 de u^* au point x_n , l'équation (4.1) doit être écrite en autant de points x_i que le membre de droite de cette équation comporte d'inconnues (9 en dimension 2 et 19 en dimension 3), à partir du point x_n . Cependant le

nombre de noeuds connectés à x_n (boule de x_n dans un maillage) est en général différent de 9 en dimension 2 ou de 19 en dimension 3, lorsque ce nombre est insuffisant (inférieur à 9 ou 19 selon la dimension), on prend la réunion des boules de chacun des noeuds de la boule de x_n . On est amené donc à résoudre un système sur-déterminé de la forme

$$AX = b$$

où X est le vecteur des inconnues des dérivées jusqu'à l'ordre 3, A la matrice rectangulaire des coefficients des composantes de X dans l'équation (4.1) et b le vecteur second membre résultant. Dans ces conditions on résout ce système par une approximation au sens des moindres carrés, en minimisant l'écart entre AX et b par une minimisation du carré de la norme euclidienne de leur différence. Et on montre que la solution de ce problème n'est autre que la solution du système linéaire suivant :

$${}^t A.AX = {}^t A.b \quad (4.2)$$

Théorème 4.2.1.

Soit u une fonction suffisamment régulière sur Ω_h et $b \neq \vec{0}$, alors le calcul de toutes les dérivées jusqu'à l'ordre 3 de u à partir des valeurs discrètes de u par la méthode précédente en résolvant le système $AX = b$ par moindres carrés converge vers le vecteur des dérivées jusqu'à l'ordre 3 de u lorsque le pas du maillage tend vers zéro sur des stencils homothétiques.

Démonstration.

Pour établir ce résultat nous allons montrer que le résidu

$$R = A\tilde{X} - b$$

tend vers zéro en norme lorsque le pas du maillage tend vers zéro, où \tilde{X} est la solution analytique de l'équation (4.2), c'est à dire ${}^t A.A$ est inversible (ce qui en pratique est le cas quand le système est sur-déterminé).

Considérons (M_k) , $k \in \mathbb{N}$ une suite de stencils centrés au point x_n tel que le stencil M_{k+1} soit l'image de M_k par une homothétie de rapport α ; $0 < \alpha < 1$. Soient la suite de résidus $R_k = A_k \tilde{X}_k - b_k$ et I la matrice identité.

Sans nuire à la généralité nous prenons α constant.

Sinon on impose que $\sup_k \alpha_k < 1$

Le système $A_k X_k = b_k$ correspond aux équations

$$u^*(x_k^i) - u^*(x_n) = \overrightarrow{x_n x_k^i} \cdot \nabla u^*(x_n) + \frac{1}{2} \langle \overrightarrow{x_n x_k^i}, H_{u^*}(x_n) \overrightarrow{x_n x_k^i} \rangle + \frac{1}{6} D^3 u^*(x_n) \cdot (\overrightarrow{x_n x_k^i})^3, 1 \leq i \leq m;$$

où m est le nombre de noeuds utilisés autour de x_n .

Sur M_{k+1} ,

$$\overrightarrow{x_n x_{k+1}^i} = \alpha \overrightarrow{x_n x_k^i}. \quad (4.3)$$

Décomposons la matrice A_{k+1} en somme de trois matrices :

4.2. Approximation de dérivées troisièmes par la méthode des moindres carrés

- $A_{k+1,1}$ qui contient les termes linéaires de A_{k+1} à leur position dans A_{k+1} et zéro ailleurs.
- $A_{k+1,2}$ qui contient les termes quadratiques de A_{k+1} à leur position dans A_{k+1} et zéro ailleurs.
- $A_{k+1,3}$ qui contient les termes cubiques de A_{k+1} à leur position dans A_{k+1} et zéro ailleurs.

Ainsi, $A_{k+1,1} = \alpha A_{k,1}$, $A_{k+1,2} = \alpha^2 A_{k,2}$, $A_{k+1,3} = \alpha^3 A_{k,3}$.

$$\begin{aligned} R_k &= A_k \tilde{X}_k - b_k \\ &= [A_k \cdot ({}^t A_k \cdot A_k)^{-1} \cdot {}^t A_k - I] b_k \\ &= [(\alpha A_{k-1,1} + \alpha^2 A_{k-1,2} + \alpha^3 A_{k-1,3}) \cdot ({}^t A_{k-1} \cdot A_{k-1})^{-1} \cdot {}^t A_{k-1} - I] b_k. \end{aligned}$$

$$A_k = (\alpha^k A_{0,1} + \alpha^{2k} A_{0,2} + \alpha^{3k} A_{0,3})$$

Posons $A_{k'} = \frac{A_k}{\alpha^k}$. On a

$$R_k = [A_{k'} \cdot ({}^t A_{k'} \cdot A_{k'})^{-1} \cdot {}^t A_{k'} - I] b_k$$

ainsi

$$\|R_k\| \leq \|A_{k'} \cdot ({}^t A_{k'} \cdot A_{k'})^{-1} \cdot {}^t A_{k'} - I\| \|b_k\|$$

comme $\alpha < 1$, chacune des composantes b_k^i de b_k , $b_k^i = u^*(x_k^i) - u^*(x_n)$ tend vers zéro lorsque k tend vers l'infini car $x_k^i \rightarrow x_n$ lorsque $k \rightarrow \infty$. De plus $A_{k'}$ tend vers $A_{0,1}$ lorsque k tend vers l'infini. Donc

$$\|b_k\|_{k \rightarrow \infty} \rightarrow 0 \implies \|R_k\|_{k \rightarrow \infty} \rightarrow 0.$$

4.2.1 Exemple

Nous avons codé cette méthode en dimension 2 et effectué des calculs avec le logiciel *Freefem++*.

Soit $F(x, y) = x^3 - 15y^3 - 2xy^2 - 10x^2y + 10x^4 - 5x^2y^2 + xy^3 + y^4$.

Les tableaux suivants présentent les résultats obtenus sur le carré unité ($\Omega = [0, 1] \times [0, 1]$). Soit h la plus grande taille d'arête du maillage. Le nombre de sommets sur le bord du maillage par itération est fonction de n , ($n = 2, 3, \dots, 7$). $\partial\Omega$ désigne le bord du maillage et $\hat{\Omega}$ son intérieur.

A : Valeurs prises aux sommets du maillage

cas 1A Maillages isotropes uniformes. Le nombre de sommets sur $\partial\Omega$ par itération est n^2 dans les directions Oy et Ox .

Chapitre 4. Reconstruction de dérivées troisièmes

$\frac{\partial^3 F}{\partial x^3}$				$\frac{\partial^3 F}{\partial y^3}$			
h	$L^\infty(\partial\Omega)$	$L^\infty(\dot{\Omega})$	$L^2(\dot{\Omega})$	h	$L^\infty(\partial\Omega)$	$L^\infty(\dot{\Omega})$	$L^2(\dot{\Omega})$
0.353553	123.893	57.4939	19.8725	0.353553	23.3326	20.2414	5.36912
0.157135	55.0637	25.5528	5.90832	0.157135	9.15152	8.99618	2.7606
0.0883883	30.9733	14.3735	2.5207	0.0883883	5.14773	5.06035	1.3415
0.0565685	19.8229	9.19902	1.31112	0.0565685	3.29455	3.23862	0.749554
0.0392837	13.7659	6.38821	0.773506	0.0392837	2.28788	2.24904	0.466301
0.0288615	10.1137	4.69338	0.498002	0.0288615	1.68089	1.65236	0.313939

$\frac{\partial^3 F}{\partial x^2 \partial y}$				$\frac{\partial^3 F}{\partial x \partial y^2}$			
h	$L^\infty(\partial\Omega)$	$L^\infty(\dot{\Omega})$	$L^2(\dot{\Omega})$	h	$L^\infty(\partial\Omega)$	$L^\infty(\dot{\Omega})$	$L^2(\dot{\Omega})$
0.353553	7.22006	3.45629	1.54595	0.353553	6.49644	6.46139	1.92236
0.157135	3.20892	1.53613	0.578317	0.157135	6.24297	2.87173	0.865122
0.0883883	1.80502	0.864073	0.259545	0.0883883	3.51167	1.61535	0.399616
0.0565685	1.15521	0.553007	0.136498	0.0565685	2.24747	1.03382	0.212363
0.0392837	0.802229	0.384033	0.080152	0.0392837	1.56074	0.717933	0.125298
0.0288615	0.589393	0.282146	0.0509413	0.0288615	1.14667	0.527461	0.0798228

Cas 2A Maillages anisotropes uniformes. Le nombre de sommets sur $\partial\Omega$ par itération est n^2 dans la direction Oy et n^3 dans la direction Ox .

$\frac{\partial^3 F}{\partial x^3}$				$\frac{\partial^3 F}{\partial y^3}$			
h	$L^\infty(\partial\Omega)$	$L^\infty(\dot{\Omega})$	$L^2(\dot{\Omega})$	h	$L^\infty(\partial\Omega)$	$L^\infty(\dot{\Omega})$	$L^2(\dot{\Omega})$
0.279508	62.4792	30.1545	8.58593	0.279508	12.1172	6.021	2.50633
0.117121	24.9582	23.795	4.86204	0.117121	5.45973	2.59661	0.62957
0.0644235	37.9768	26.2181	5.31545	0.0644235	3.08386	1.4394	0.253587
0.0407922	53.7736	30.6144	6.41457	0.0407922	1.97758	0.91416	0.129891
0.0281609	67.4932	35.6804	7.65604	0.0281609	1.37492	0.631977	0.0767255
0.0206154	80.3048	41.0363	8.92954	0.0206154	1.01093	0.462978	0.0498247

$\frac{\partial^3 F}{\partial x^2 \partial y}$				$\frac{\partial^3 F}{\partial x \partial y^2}$			
h	$L^\infty(\partial\Omega)$	$L^\infty(\dot{\Omega})$	$L^2(\dot{\Omega})$	h	$L^\infty(\partial\Omega)$	$L^\infty(\dot{\Omega})$	$L^2(\dot{\Omega})$
0.279508	7.23424	4.76803	1.07679	0.279508	3.71048	1.63938	0.613915
0.117121	7.6381	3.25147	0.561631	0.117121	1.48243	0.742529	0.101087
0.0644235	6.39501	2.70316	0.328639	0.0644235	0.783526	0.448322	0.0440488
0.0407922	5.78742	2.44137	0.219813	0.0407922	0.484424	0.311204	0.0266583
0.0281609	5.43998	2.29484	0.160705	0.0281609	0.338262	0.234424	0.0177456
0.0206154	5.22003	2.20389	0.124931	0.0206154	0.302263	0.187418	0.0125486

4.2. Approximation de dérivées troisièmes par la méthode des moindres carrés

Cas 3A Maillages anisotropes uniformes. Le nombre de sommets sur $\partial\Omega$ par itération est n^2 dans la direction Ox et n^3 dans la direction Oy .

$\frac{\partial^3 F}{\partial x^3}$				$\frac{\partial^3 F}{\partial y^3}$			
h	$L^\infty(\partial\Omega)$	$L^\infty(\dot{\Omega})$	$L^2(\dot{\Omega})$	h	$L^\infty(\partial\Omega)$	$L^\infty(\dot{\Omega})$	$L^2(\dot{\Omega})$
0.279508	124.25	56.5569	18.8063	0.279508	72.5363	122.441	21.8362
0.117121	55.2421	25.0381	5.46612	0.117121	329.602	177.473	39.3343
0.0644235	31.0772	14.0634	2.33719	0.0644235	447.519	234.238	50.0694
0.0407922	19.8904	8.99432	1.22766	0.0407922	563.706	291.526	61.2958
0.0281609	13.8131	6.24366	0.733767	0.0281609	679.138	349.039	73.0012
0.0206154	10.1486	4.58611	0.479345	0.0206154	794.171	406.671	84.9774

$\frac{\partial^3 F}{\partial x^2 \partial y}$				$\frac{\partial^3 F}{\partial x \partial y^2}$			
h	$L^\infty(\partial\Omega)$	$L^\infty(\dot{\Omega})$	$L^2(\dot{\Omega})$	h	$L^\infty(\partial\Omega)$	$L^\infty(\dot{\Omega})$	$L^2(\dot{\Omega})$
0.279508	7.74363	5.50053	1.37962	0.279508	13.9192	21.0994	3.73456
0.117121	6.56211	3.75801	0.650427	0.117121	45.9312	19.9823	3.23705
0.0644235	5.15303	2.8406	0.346015	0.0644235	45.1049	19.5612	2.28531
0.0407922	4.20812	2.28032	0.208717	0.0407922	44.703	19.3589	1.69614
0.0281609	3.54556	1.90371	0.138283	0.0281609	44.4781	19.2466	1.32253
0.0206154	3.0591	1.6335	0.0983762	0.0206154	44.3399	19.1778	1.07296

B : Valeurs prises aux sommets du maillage et aux milieux des arêtes

Nous reprenons les mêmes maillages que précédemment.

cas 1B Maillages isotropes uniformes.

$\frac{\partial^3 F}{\partial x^3}$				$\frac{\partial^3 F}{\partial y^3}$			
h	$L^\infty(\partial\Omega)$	$L^\infty(\dot{\Omega})$	$L^2(\dot{\Omega})$	h	$L^\infty(\partial\Omega)$	$L^\infty(\dot{\Omega})$	$L^2(\dot{\Omega})$
0.353553	85.4273	0.578847	0.219761	0.353553	12.9709	0.411141	0.142797
0.157135	37.9677	0.257265	0.0989783	0.157135	5.76485	0.182729	0.0782007
0.0883883	21.3568	0.144712	0.054222	0.0883883	3.24273	0.102785	0.0469905
0.0565685	13.6684	0.0926155	0.034065	0.0565685	2.07535	0.0657825	0.0309717
0.0392837	9.49192	0.0643163	0.0233755	0.0392837	1.44121	0.0456823	0.0218482
0.0288615	6.97366	0.0472528	0.0170389	0.0288615	1.05885	0.0335625	0.0162027

Chapitre 4. Reconstruction de dérivées troisièmes

$\frac{\partial^3 F}{\partial x^2 \partial y}$				$\frac{\partial^3 F}{\partial x \partial y^2}$			
h	$L^\infty(\partial\Omega)$	$L^\infty(\dot{\Omega})$	$L^2(\dot{\Omega})$	h	$L^\infty(\partial\Omega)$	$L^\infty(\dot{\Omega})$	$L^2(\dot{\Omega})$
0.353553	8.42093	1.14186	0.352305	0.353553	10.4112	1.46154	0.525949
0.157135	3.74263	0.507492	0.133668	0.157135	4.6272	0.649573	0.187507
0.0883883	2.10523	0.285464	0.0644855	0.0883883	2.6028	0.365385	0.0864814
0.0565685	1.34735	0.182697	0.0369502	0.0565685	1.66579	0.233846	0.0475953
0.0392837	0.935659	0.126873	0.0237259	0.0392837	1.1568	0.162393	0.0294906
0.0288615	0.687423	0.0932129	0.0164768	0.0288615	0.849894	0.119309	0.0198601

Interpolée linéaire de la fonction Nous prenons l'interpolée linéaire de la fonction dans chaque triangle.

$\frac{\partial^3 F}{\partial x^3}$				$\frac{\partial^3 F}{\partial y^3}$			
h	$L^\infty(\partial\Omega)$	$L^\infty(\dot{\Omega})$	$L^2(\dot{\Omega})$	h	$L^\infty(\partial\Omega)$	$L^\infty(\dot{\Omega})$	$L^2(\dot{\Omega})$
0.353553	210.587	191.312	74.3146	0.353553	178.911	166.185	80.1455
0.157135	306.049	308.276	106.1	0.157135	359.446	296.017	107.244
0.0883883	444.767	446.907	126.777	0.0883883	639.678	476.225	126.433
0.0565685	624.51	629.44	152.029	0.0565685	999.428	707.495	152.102
0.0392837	868.032	846.062	187.407	0.0392837	1438.91	989.995	188.574
0.0288615	1203.88	1099.07	234.151	0.0288615	1958.21	1323.78	236.451

$\frac{\partial^3 F}{\partial x^2 \partial y}$				$\frac{\partial^3 F}{\partial x \partial y^2}$			
h	$L^\infty(\partial\Omega)$	$L^\infty(\dot{\Omega})$	$L^2(\dot{\Omega})$	h	$L^\infty(\partial\Omega)$	$L^\infty(\dot{\Omega})$	$L^2(\dot{\Omega})$
0.353553	46.3407	154.29	49.128	0.353553	69.0502	207.832	59.2098
0.157135	110.174	454.626	120.919	0.157135	147.443	554.222	118.996
0.0883883	223.514	892.331	189.981	0.0883883	278.624	1042.29	176.171
0.0565685	378.828	1458.46	258.183	0.0565685	446.16	1670.67	234.134
0.0392837	568.819	2151.84	327.423	0.0392837	650.496	2439.02	294.451
0.0288615	793.428	2971.96	398.962	0.0288615	891.785	3347.22	358.114

Cas 2B Maillages anisotropes uniformes. Le nombre de sommets sur $\partial\Omega$ par itération est n^2 dans la direction Oy et n^3 dans la direction Ox .

4.2. Approximation de dérivées troisièmes par la méthode des moindres carrés

$\frac{\partial^3 F}{\partial x^3}$				$\frac{\partial^3 F}{\partial y^3}$			
h	$L^\infty(\partial\Omega)$	$L^\infty(\dot{\Omega})$	$L^2(\dot{\Omega})$	h	$L^\infty(\partial\Omega)$	$L^\infty(\dot{\Omega})$	$L^2(\dot{\Omega})$
0.279508	45.0904	0.702077	0.338347	0.279508	8.54044	0.1367	0.0491241
0.117121	15.9248	0.641207	0.18097	0.117121	3.77677	0.0278607	0.00696564
0.0644235	23.6821	1.18438	0.377819	0.0644235	2.12593	0.0142078	0.00503408
0.0407922	33.9172	1.67568	0.605569	0.0407922	1.36196	0.00976929	0.00443961
0.0281609	42.9084	2.10884	0.812455	0.0281609	0.946598	0.00694541	0.003563
0.0206154	51.3726	2.50869	1.00233	0.0206154	0.695919	0.0051339	0.00281567

$\frac{\partial^3 F}{\partial x^2 \partial y}$				$\frac{\partial^3 F}{\partial x \partial y^2}$			
h	$L^\infty(\partial\Omega)$	$L^\infty(\dot{\Omega})$	$L^2(\dot{\Omega})$	h	$L^\infty(\partial\Omega)$	$L^\infty(\dot{\Omega})$	$L^2(\dot{\Omega})$
0.279508	6.26198	1.17708	0.329289	0.279508	5.07297	0.426249	0.130961
0.117121	4.09674	0.843551	0.187506	0.117121	2.01636	0.263953	0.0732515
0.0644235	3.28733	0.801319	0.1369	0.0644235	1.1547	0.210395	0.0476476
0.0407922	2.89486	0.795544	0.12502	0.0407922	0.782497	0.174967	0.0343756
0.0281609	2.67187	0.782995	0.123156	0.0281609	0.582839	0.146857	0.026652
0.0206154	2.53148	0.770262	0.123343	0.0206154	0.460778	0.125464	0.0216946

Interpolée linéaire de la fonction

$\frac{\partial^3 \mathbf{F}}{\partial \mathbf{x}^3}$				$\frac{\partial^3 \mathbf{F}}{\partial \mathbf{y}^3}$			
h	$L^\infty(\partial\Omega)$	$L^\infty(\dot{\Omega})$	$L^2(\dot{\Omega})$	h	$L^\infty(\partial\Omega)$	$L^\infty(\dot{\Omega})$	$L^2(\dot{\Omega})$
0.279508	352.131	536.787	191.345	0.279508	142.057	104.108	58.0755
0.117121	4985.4	4052.23	1281.25	0.117121	269.212	107.962	48.8452
0.0644235	22658.8	17793.9	5166.66	0.0644235	488.726	107.455	36.2961
0.0407922	70573.1	55429.2	15317.8	0.0407922	769.997	106.919	51.6861
0.0281609	176779	139374	37373.7	0.0281609	1113.31	194.355	93.9223
0.0206154	382835	302966	79681.9	0.0206154	1518.77	296.731	149.927

$\frac{\partial^3 \mathbf{F}}{\partial \mathbf{x}^2 \partial \mathbf{y}}$				$\frac{\partial^3 \mathbf{F}}{\partial \mathbf{x} \partial \mathbf{y}^2}$			
h	$L^\infty(\partial\Omega)$	$L^\infty(\dot{\Omega})$	$L^2(\dot{\Omega})$	h	$L^\infty(\partial\Omega)$	$L^\infty(\dot{\Omega})$	$L^2(\dot{\Omega})$
0.279508	137.655	357.653	108.25	0.279508	90.1059	323.565	105.233
0.117121	817.608	1696.86	420.869	0.117121	338.002	1153.91	287.824
0.0644235	2684.1	5146.98	1145.02	0.0644235	823.647	2755.97	553.766
0.0407922	6651.44	12350.5	2586.45	0.0407922	1627.3	5386.39	918.283
0.0281609	13895.2	26226.2	5134.95	0.0281609	2828.61	9300.21	1398.27
0.0206154	25852.3	49265	9267.16	0.0206154	4507.16	14752.1	2012.24

Chapitre 4. Reconstruction de dérivées troisièmes

Cas 3B Maillages anisotropes uniformes. Le nombre de sommets sur $\partial\Omega$ par itération est n^2 dans la direction Ox et n^3 dans la direction Oy .

$\frac{\partial^3 F}{\partial x^3}$				$\frac{\partial^3 F}{\partial y^3}$			
h	$L^\infty(\partial\Omega)$	$L^\infty(\dot{\Omega})$	$L^2(\dot{\Omega})$	h	$L^\infty(\partial\Omega)$	$L^\infty(\dot{\Omega})$	$L^2(\dot{\Omega})$
0.279508	84.9705	0.426841	0.175695	0.279508	174.171	4.64074	2.04016
0.117121	37.7445	0.21776	0.111202	0.117121	271.551	8.35115	3.64212
0.0644235	21.2282	0.128012	0.0717334	0.0644235	365.924	11.7942	5.10657
0.0407922	13.5853	0.0835647	0.0488606	0.0407922	459.42	15.1273	6.52879
0.0281609	9.43396	0.058649	0.0350759	0.0281609	552.546	18.4048	7.92984
0.0206154	6.93096	0.043363	0.0262833	0.0206154	645.481	21.6502	9.31855

$\frac{\partial^3 F}{\partial x^2 \partial y}$				$\frac{\partial^3 F}{\partial x \partial y^2}$			
h	$L^\infty(\partial\Omega)$	$L^\infty(\dot{\Omega})$	$L^2(\dot{\Omega})$	h	$L^\infty(\partial\Omega)$	$L^\infty(\dot{\Omega})$	$L^2(\dot{\Omega})$
0.279508	10.4062	3.0727	1.23444	0.279508	22.6584	5.78087	1.8012
0.117121	6.1947	2.28319	0.685601	0.117121	22.5791	6.1354	1.39767
0.0644235	4.45366	1.77284	0.435374	0.0644235	22.0308	6.24967	1.235
0.0407922	3.49203	1.44047	0.309615	0.0407922	21.7645	6.30043	1.16672
0.0281609	2.87799	1.2104	0.237648	0.0281609	21.6156	6.32735	1.13432
0.0206154	2.45032	1.04264	0.192151	0.0206154	21.5241	6.34332	1.1172

Interpolée linéaire de la fonction

$\frac{\partial^3 \mathbf{F}}{\partial \mathbf{x}^3}$				$\frac{\partial^3 \mathbf{F}}{\partial \mathbf{y}^3}$			
h	$L^\infty(\partial\Omega)$	$L^\infty(\dot{\Omega})$	$L^2(\dot{\Omega})$	h	$L^\infty(\partial\Omega)$	$L^\infty(\dot{\Omega})$	$L^2(\dot{\Omega})$
0.279508	274.719	177.387	84.5132	0.279508	636.518	658.211	268.215
0.117121	414.271	210.908	97.4155	0.117121	5110.19	5342.89	1541.62
0.0644235	606.714	221.592	84.7486	0.0644235	23686	24172.8	5853.91
0.0407922	987.174	231.517	66.8175	0.0407922	76163.8	76701.3	16701.8
0.0281609	1465.4	234.327	66.1484	0.0281609	195573	195216	39677.3
0.0206154	2036.59	280.625	98.1106	0.0206154	431474	427932	83005.1

4.2. Approximation de dérivées troisièmes par la méthode des moindres carrés

$\frac{\partial^3 F}{\partial x^2 \partial y}$				$\frac{\partial^3 F}{\partial x \partial y^2}$			
h	$L^\infty(\partial\Omega)$	$L^\infty(\overset{\circ}{\Omega})$	$L^2(\overset{\circ}{\Omega})$	h	$L^\infty(\partial\Omega)$	$L^\infty(\overset{\circ}{\Omega})$	$L^2(\overset{\circ}{\Omega})$
0.279508	80.0152	272.473	91.0198	0.279508	159.716	392.471	96.858
0.117121	419.491	1302.78	319.655	0.117121	1054.64	1883.89	397.048
0.0644235	1123.95	3449.84	660.833	0.0644235	3677.93	6799.99	1136.84
0.0407922	2315.92	7079.59	1119.68	0.0407922	9388.99	18330.1	2601.95
0.0281609	4117.54	12562	1707.88	0.0281609	19937.8	40008.5	5168.25
0.0206154	6650.96	20267.9	2439.77	0.0206154	37462.3	76380.5	9298.24

Commentaires : On peut constater que sur des maillages isotropes, l'approximation numérique est consistante. Cependant, sur des cas de maillages anisotropes, on perd numériquement la consistance dans certaines directions suivant l'orientation de l'anisotropie. La matrice du système normal (4.2) à inverser contient à la fois des coefficients de l'ordre de h^6 et de l'ordre de h^2 . Ce qui peut conduire à un très mauvais conditionnement lorsque les mailles sont très aplaties.

En effet, la perte de consistance dans les deux normes est constatée dans les cas suivants :

-Cas 2) les mailles sont très aplaties dans la direction Ox . Ce phénomène a un effet sur la consistance de l'approximation de $\frac{\partial^3 F}{\partial x^3} = 6 + 240x$. Cette dérivée troisième ne varie que dans la direction Ox . Elle ne subit donc pas l'effet de l'aplatissement des mailles dans la direction Oy

-Cas 3) les mailles sont très aplaties dans la direction Oy . Cela a un effet sur la consistance de l'approximation de $\frac{\partial^3 F}{\partial y^3} = -90 + 24y + 6x$. Celle-ci a une variation dans la direction Oy plus forte que dans la direction Ox .

Le nombre de noeuds dont on a besoin pour résoudre le système normal (4.2) étant important, la recherche de ceux-ci conduit à un décentrement important autour des sommets frontaliers. Les résultats obtenus sont donc plus précis pour les sommets internes au maillage.

On constate aussi que globalement, les résultats sont nettement plus précis à l'intérieur du maillage lorsque les valeurs de la fonction sont prises aux sommets du maillage et aux milieux des arêtes. Le décentrement autour des sommets frontaliers est moins important dans ce cas et la précision sur le bord est aussi améliorée. Mais la tendance générale reste la même que lorsque les valeurs de la fonction sont prises aux sommets du maillage uniquement.

Cependant, la méthode diverge lorsque les valeurs de l'interpolée linéaire par triangle de fonction sont prises aux sommets et aux milieux des arêtes.

4.2.2 Application à l'adaptation de maillage

Approximation d'une fonction

Nous reprenons l'exemple du chapitre précédent paragraphe 3.5.2, page 63. Le maillage est adapté à une fonction à l'aide de métriques obtenues en utilisant l'estimation d'erreur [Hec08] présenté au chapitre 3 pour les dérivées d'ordre trois. Les dérivées troisièmes sont approchées par la méthode des moindres carrés et les métriques sont construites à l'aide de l'algorithme décrit au chapitre 3.

```

load "MetricKuate"
load "deriveestroisieme"
mesh Th=square(5,5,[(x-0.5)*2,(y-0.5)*2]);
real x0,y0,c=2.,coef=10,cc=10;
fespace Vh(Th,P1);
fespace Wh(Th,P2);
fespace Ph(Th,P0);
func f = tanh(c*(sin((5*y))-(2 * x)))+(y*x*x)+pow(y,3);
for(int i=1;i<10;i++)
{
  Vh fxxx,fxxy,fxyy,fyyy;
  derivee3MC(Th,f,[fxxx[],fxxy[],fxyy[],fyyy[]]);
  Vh m11,m12,m22;   Wh f2=f;
  func err=(fxxx*x0*x0*x0+3*fxxy*x0*x0*y0
            +3*fxxy*x0*y0*y0+fyyy*y0*y0*y0)*coef;
  MetricKuate(Th,150,0.0001,3,err,[m11[],m12[],m22[]],[x0,y0]);
  Th=adaptmesh(Th,cc*m11,cc*m12,cc*m22,IsMetric=1,
              hmin=0.00001,nbvx=1000000);
  cout<<m11[].max<<" "<< m12[].max <<" "<< m22[].max <<endl;
  plot(Th,wait=0,ps="Th.eps");
  plot(f2,wait=0,ps="isoD3cal.eps");
  Ph eh = (abs(f2-f));
  Ph leh= log10(eh);
  real[int] viso=[-9,-8,-7,-6,-5,-4,-3,-2,-1,0,1];
  plot(leh,fill=1,wait=0,viso=viso,value=1,ps="lehD3cal.eps");
  cout<<i<<"..."<<eh[].min<<" "<<eh[].max<<" "<<eh[].sum/eh[].n
    <<" "<<int2d(Th)(eh)/Th.area<<" "<<Th.nt<<" "<<Th.nv<<endl;
}

```

Les figures 4.1 et 4.3 montrent que les résultats sont comparables à ceux obtenus en utilisant les dérivées troisièmes exactes (figure 4.2). Malgré l'instabilité numérique constatée dans l'exemple précédent, ces résultats peuvent se justifier par le fait que le schéma est beaucoup plus précis à l'intérieur du domaine que sur la frontière. La différence entre les deux manières de prendre les valeurs de la fonction n'est pas très perceptible sur les figures 4.1 et 4.3 car la tendance générale est la même dans les deux cas, comme l'a montré l'exemple précédent.

Cependant, lorsque l'on se restreint à l'interpolée P_1 éléments finis de la fonction et que l'on prend les valeurs aux sommets et aux milieux des arêtes, le résultat est très peu précis comme le montre la figure 4.4. Ce qui est en conformité avec les résultats observés lors du calcul des dérivées.

4.2. Approximation de dérivées troisièmes par la méthode des moindres carrés

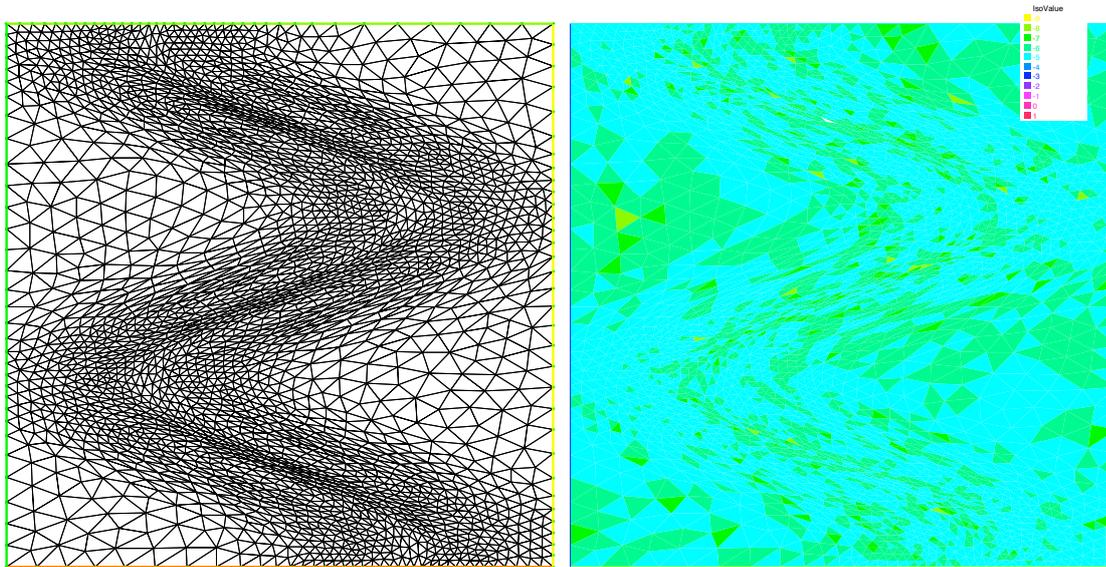


FIG. 4.1 – Maillages adaptés en utilisant les dérivées troisièmes approchées par moindres carrés avec valeurs prises aux sommets et iso-valeurs de l'erreur .

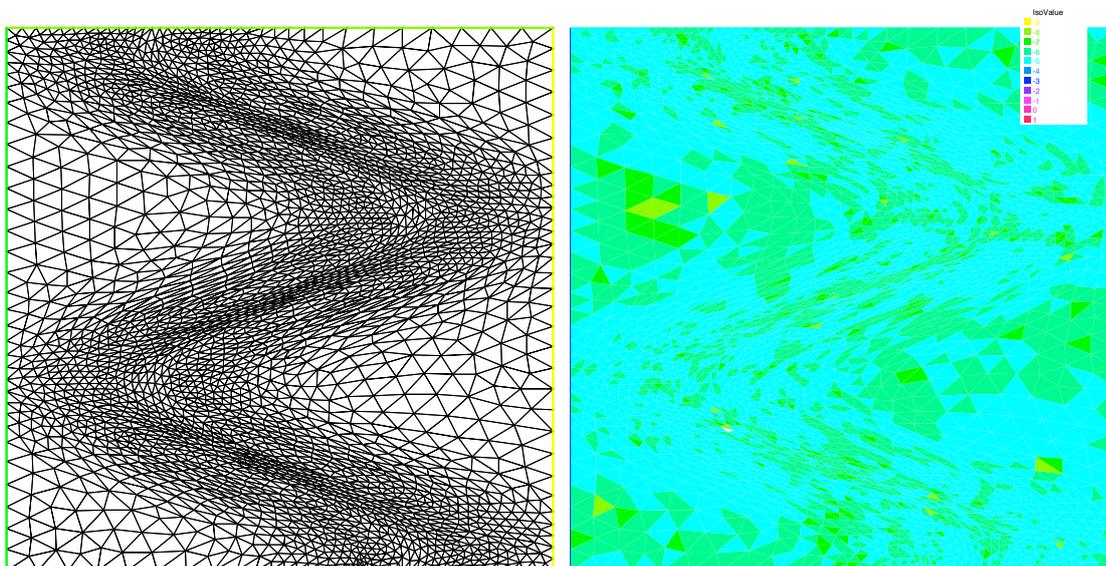


FIG. 4.2 – Maillages adaptés en utilisant les dérivées troisièmes exactes et iso-valeurs de l'erreur.

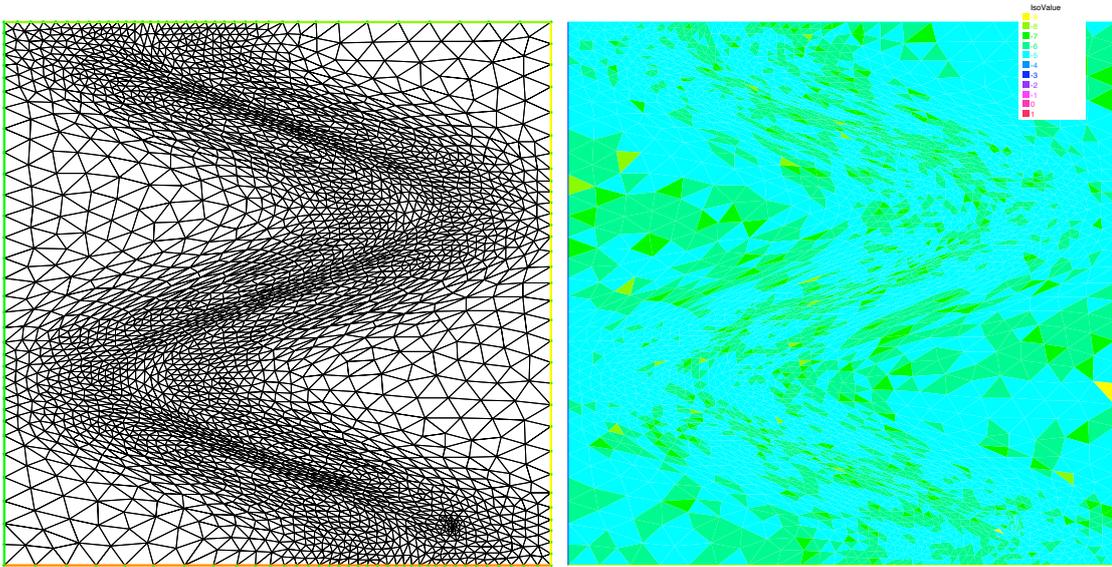


FIG. 4.3 – Maillages adaptés en utilisant les dérivées troisièmes approchées avec valeurs prises aux sommets et aux milieux des arêtes et iso-valeurs de l'erreur.

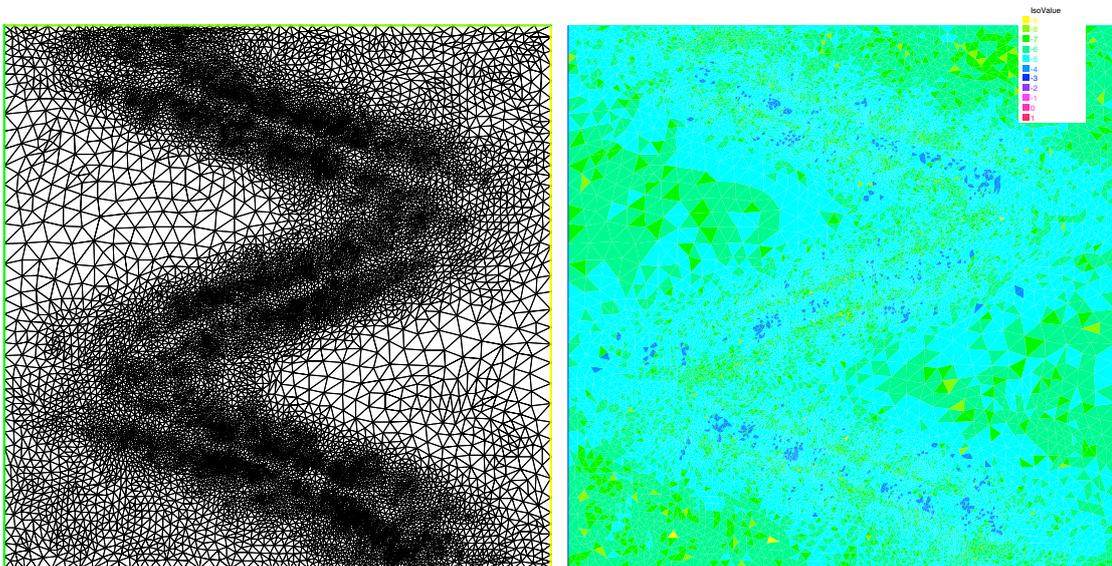


FIG. 4.4 – Maillages adaptés en utilisant les dérivées troisièmes avec valeurs prises aux sommets et aux milieux des arêtes pour l'interpolée linéaire de la fonction et iso-valeurs de l'erreur .

Nous n'avons pas étendu la méthode d'interpolation et différences finies locales à la reconstruction de dérivées troisièmes. La consistance de cette méthode ne serait théoriquement garantie que pour l'interpolation polynomiale de degré supérieur ou égale à trois. La résolution numérique d'EDP par éléments finis P_3 n'est pas très courante. Il ne nous paraît donc pas primordial d'implémenter cette méthode pour la reconstruction de dérivées troisièmes.

4.3 Conclusion

Nous avons étudié la reconstruction de dérivées troisièmes par la méthode des moindres carrés. Sur l'exemple présenté, on a constaté un effet de l'anisotropie du maillage sur certaines dérivées troisièmes quant-à la consistance du schéma numérique. Les résultats numériques obtenus montrent que la méthode est moins stable pour le calcul des dérivées troisièmes que pour celui de la matrice hessienne, lorsque les ordres de grandeur du pas de maillage sont les mêmes. Ce comportement nous semble lié aux ordres de grandeur des composantes de la matrice du système résolu par moindres carrés dans chacun des cas. Il reste à trouver des moyens de résoudre ces problèmes numériques.

Chapitre 5

Estimations d'erreur d'interpolation de Lagrange

Sommaire

5.1	Introduction	91
5.2	Interpolation P_{n-1} Lagrange d'un polynôme de degré n	91
5.2.1	En dimension deux d'espace	95
5.2.2	En dimension trois d'espace	96
5.3	Estimation de l'erreur d'interpolation de Lagrange sur un simplexe	97
5.3.1	Evaluation de l'estimateur	100
5.4	Conclusion	104

5.1 Introduction

Les calculs effectués au chapitre précédent pour trouver une reconstruction des dérivées troisièmes par la méthode des moindres carrés ont soulevé des problèmes de convergence numérique de cette technique. Notamment sur des séquences de maillages anisotropes ayant un coefficient d'anisotropie variable. Des pertes de consistance ont été observées suivant l'anisotropie du maillage en corrélation avec l'anisotropie de la fonction.

Nous n'avons trouvé aucune référence dans la littérature en matière de reconstruction des dérivées troisièmes pour comparer. Les problèmes soulevés par ces calculs suggèrent d'étudier davantage les estimateurs d'erreur d'interpolation de troisième ordre. Nous proposons dans ce chapitre une étude encore à l'état théorique des estimations d'erreur d'interpolation.

Nous présentons une caractérisation des normes L^p et H^1 de l'erreur d'interpolation de Lagrange d'un polynôme de degré n par un polynôme de degré $n - 1$ sur des d -simplexes non dégénérés en dimension d quelconque.

En suite, nous proposons une estimation de l'erreur d'interpolation pour les éléments finis de Lagrange sur un simplexe. Estimation obtenue avec un développement de Taylor à l'ordre 3 sans calcul direct des dérivées troisièmes, en particulier pour l'interpolation de degré deux.

Cette nouvelle estimation d'erreur d'interpolation est faite dans le but d'améliorer la précision de l'estimateur d'erreur d'interpolation basée sur la matrice hessienne [Ala03] obtenue par un développement de Taylor à l'ordre deux. Cette dernière n'étant justifiée formellement que pour l'interpolation linéaire, notre nouvel estimateur est destiné à traiter directement les cas d'adaptation de maillage où la solution approchée de l'EDP est obtenue par éléments finis de Lagrange de degré deux, en se servant d'un calcul de matrice hessienne, moins coûteux et moins instable numériquement que le calcul des dérivées troisièmes présenté au chapitre précédent. Surtout en dimension trois où l'on passe d'un système linéaire à 9 inconnues pour la matrice hessienne à un système linéaire à 19 inconnues pour les dérivées troisièmes.

5.2 Interpolation P_{n-1} Lagrange d'un polynôme de degré n

Soit F une fonction interpolée par un polynôme de degré k . Lorsque la dérivée d'ordre $k + 1$ de F est constante, on se trouve dans une situation particulière. Nous présentons dans cette section des résultats dont nous n'avons trouvé aucune référence dans la littérature.

En dimension un d'espace, interpolons une droite par des fonctions en escalier ou un polynôme du second degré par des segments de droite sur un intervalle en espaçant uniformément les noeuds. Calculons l'aire comprise entre les deux graphes (la fonction

et son interpolée). Nous constatons que cette aire est exactement la même sur chaque maille (voir figures 5.1).

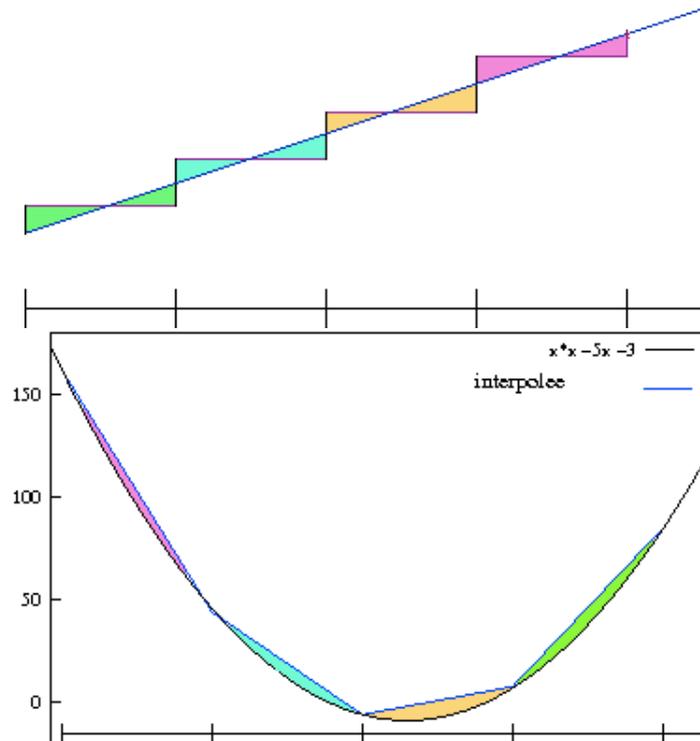


FIG. 5.1 –

Cette observation peut se généraliser à tout polynôme de degré n interpolée par un polynôme de degré $n - 1$ en dimension quelconque.

Notations.

- I_d désigne la matrice identité de taille d .
- $M_{d \times d}$ est l'ensemble des matrices carrées d'ordre d .
- $[X, Y]$ désigne le segment ayant pour extrémités le point X et le point Y .

$$D^k u(a) \cdot (\xi)^k = \sum_{\alpha_1 + \dots + \alpha_d = k} \frac{\partial^k u}{\partial x_1^{\alpha_1} \dots \partial x_d^{\alpha_d}}(a) \xi_1^{\alpha_1} \dots \xi_d^{\alpha_d}; \quad \xi = \begin{pmatrix} \xi_1 \\ \vdots \\ \xi_d \end{pmatrix}, a \in \mathbb{R}^d.$$

Théorème 5.2.1.

Soient $x \in \Omega \subset \mathbb{R}^d$, $\Phi(x)$ un polynôme de degré n , $n \in \mathbb{N}$ $n \geq 1$; à valeurs dans \mathbb{R}

5.2. Interpolation P_{n-1} Lagrange d'un polynôme de degré n

et $\tilde{\Phi}_{n-1}(x)$ son interpolée de degré $n - 1$ sur un d -simplexe non dégénéré T de Ω . Soit T' l'image de T par une transformation affine définie par :

$\forall x \in T, \exists x' \in T' : x' = Rx + t, t \in \mathbb{R}^d, R \in M_{d \times d},$ Soit $\nu \in \mathbb{R}^*$.

Si $R = \nu I_d,$ alors

1.

$$\|\Phi - \tilde{\Phi}_{n-1}\|_{L^p(T)} = |\nu|^{-(n+d/p)} \|\Phi - \tilde{\Phi}_{n-1}\|_{L^p(T')}, \quad 1 \leq p < \infty, \quad (5.1)$$

2.

$$|\Phi - \tilde{\Phi}_{n-1}|_{H^1(T)} = |\nu|^{-(n-1+d/2)} |\Phi - \tilde{\Phi}_{n-1}|_{H^1(T')}. \quad (5.2)$$

Démonstration.

La formule magique Taylor multi-point [CR72, CW71] nous permet d'écrire :

$$D^m \Phi(x) - D^m \tilde{\Phi}_{n-1}(x) = \frac{1}{n!} \sum_{i=1}^N \{D^n \Phi(\xi_i) \cdot (x - a_i)^n\} D^m \lambda_i(x), \quad \forall x \in T. \quad (5.3)$$

où

- λ_i est un polynôme de degré $n - 1$ à d variables et à N degrés de liberté tel que $\lambda_i(a_j) = \delta_{ij},$
- les a_i étant les points d'interpolation sur $T,$
- $\xi_i \in]x, a_i [,$
- D désigne l'opérateur de dérivation par rapport à la variable $x,$ tel que dans [CW71], avec les notations de [Die60] ou [Die72] :
Pour toute fonction $u : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R},$ sa k -ième dérivée en un point a de \mathbb{R}^d (lorsqu'elle est définie) est un élément de $\mathcal{L}_k(\mathbb{R}^d; \mathbb{R}),$ symétrique c'est-à-dire :

$$D^k u(a) \cdot (\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_k) = D^k u(a) \cdot (\xi_{\sigma_1}, \xi_{\sigma_2}, \dots, \xi_{\sigma_k}) \quad (5.4)$$

pour toute permutation $\sigma : i \rightarrow \sigma_i$ de l'ensemble $\{1, 2, \dots, k\}.$ Lorsque $\xi_i = \xi$ pour tout $i, 1 \leq i \leq k,$ on écrira

$$D^k u(a) \cdot (\xi, \xi, \dots, \xi) = D^k u(a) \cdot (\xi)^k,$$

si $\xi_i = \xi$ pour tout $i, 2 \leq i \leq k,$

$$D^k u(a) \cdot (\xi_1, \xi, \xi, \dots, \xi) = D^k u(a) \cdot (\xi_1, (\xi)^{k-1}).$$

• Montrons que l'équation (5.1) est vérifiée. Pour cela nous écrivons (5.1) sur le d -simplexe $T.$

Il faut montrer que

$$\int_T |\Phi(x) - \tilde{\Phi}_{n-1}(x)|^p dx = |\nu|^{-(np+d)} \int_{T'} |\Phi(x') - \tilde{\Phi}_{n-1}(x')|^p dx'$$

équivalent à

$$\int_T \left| \sum_{i=1}^N \{D^n \Phi \cdot (x - a_i)^n\} \lambda_i(x) \right|^p dx = |\nu|^{-(np+d)} |\nu|^d \int_T \left| \sum_{i=1}^N \{D^n \Phi \cdot (R(x - a_i))^n\} \lambda_i(x) \right|^p dx, \quad (5.5)$$

grâce à (5.3) et étant donné que $\lambda'_i(x') = \lambda_i(x)$ et que $D^n \Phi$ est constant car Φ est de degré n .

La fonction $\xi \mapsto D^n \Phi \cdot (\xi)^n$ est un polynôme homogène de degré n .

Si $R = |\nu|I_d$, on a

$$D^n \Phi \cdot (R(x - a_i))^n = |\nu|^n D^n \Phi \cdot (x - a_i)^n \quad \forall i, i = 0, 1, \dots, N.$$

Si $R = -|\nu|I_d$ on aura :

si n est pair,

$$D^n \Phi \cdot (R(x - a_i))^n = \nu^n D^n \Phi \cdot (x - a_i)^n \quad \forall i, i = 0, 1, \dots, N.$$

si n est impair,

$$D^n \Phi \cdot (R(x - a_i))^n = -|\nu|^n D^n \Phi \cdot (x - a_i)^n \quad \forall i, i = 0, 1, \dots, N.$$

Donc en passant aux valeurs absolues et en élevant à la puissance p , on a le résultat.

• Pour l'équation (5.2), il suffit de vérifier que pour $R = \pm|\nu|I_d$ on a

$$\left\| \sum_{i=1}^N \{D^n \Phi \cdot (x - a_i)^n\} D\lambda_i(x) \right\|^2 = \nu^{-2(n-1)} \left\| \sum_{i=1}^N \{D^n \Phi \cdot (R(x - a_i))^n\} D'\lambda'_i(x') \right\|^2 \quad (5.6)$$

D' désigne la dérivation sur le triangle T' .

comme $\lambda_i(x) = \lambda'_i(x')$, on a $D'\lambda_i(x) = {}^t R^{-1} D\lambda_i(x)$.

Il suffit d'avoir $\forall i, j$ dans l'équation (5.6)

$$\begin{aligned} \nu^{(2n-2)} \langle D^n \Phi \cdot (x - a_i)^n D\lambda_i, D^n \Phi \cdot (x - a_j)^n D\lambda_j \rangle \\ = \langle D^n \Phi \cdot (R(x - a_i))^n {}^t R^{-1} \cdot D\lambda_i, D^n \Phi \cdot (R(x - a_j))^n {}^t R^{-1} \cdot D\lambda_j \rangle \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle D^n \Phi \cdot (R(x - a_i))^n {}^t R^{-1} \cdot D\lambda_i, D^n \Phi \cdot (R(x - a_j))^n {}^t R^{-1} \cdot D\lambda_j \rangle \\ = \langle {}^t R^{-1} \cdot D\lambda_i D^n \Phi \cdot (R(x - a_i))^n, {}^t R^{-1} \cdot D\lambda_j D^n \Phi \cdot (R(x - a_j))^n \rangle \\ = \langle R^{-1} {}^t R^{-1} \cdot D\lambda_i D^n \Phi \cdot (R(x - a_i))^n, D\lambda_j D^n \Phi \cdot (R(x - a_j))^n \rangle \\ = \nu^{2n-2} \langle D\lambda_i D^n \Phi \cdot (x - a_i)^n, D\lambda_j D^n \Phi \cdot (x - a_j)^n \rangle \end{aligned}$$

D'où le résultat.

5.2. Interpolation P_{n-1} Lagrange d'un polynôme de degré n

Remarque 5.2.2.

Tout changement de base permettant d'obtenir une expression de R conforme au résultat précédent reste valide. Un changement de base aura pour effet de modifier les expressions ou les valeurs des fonctions et des dérivées. Cependant il n'a pas été tenu compte de ces valeurs pour établir les expressions de R .

5.2.1 En dimension deux d'espace

Nous présentons les conséquences de ce résultat sur les triangulations du plan.

Corollaire 5.2.3.

1. Tout maillage uniforme de triangles équilatéraux équi-répartit (identique sur chaque maille) les normes L^p , $1 \leq p < \infty$ et H^1 de l'erreur d'interpolation P_{n-1} Lagrange d'un polynôme de degré n .

2. Tout maillage obtenu par translation et symétrie centrale d'un même motif équi-répartit dans chaque motif les normes L^p , $1 \leq p < \infty$ et H^1 de l'erreur d'interpolation P_{n-1} Lagrange d'un polynôme de degré n . Si de plus le motif est un parallélogramme formé de deux triangles, alors ces erreurs sont équi-réparties.

Démonstration.

1. Dans un maillage uniforme constitué de triangles équilatéraux (exemple figure 5.2), deux triangles voisins partageant la même arête forment un parallélogramme. Ces deux triangles sont donc symétriques l'un de l'autre par la symétrie centrée au milieu de l'arête commune. Ce qui correspond à $R = -I_2$. Les coordonnées de t sont la somme des coordonnées des sommets communs aux deux triangles.

2. Existence :

Les maillages constitués par translation et symétrie centrale d'un même motif appartiennent au groupe des pavages du plan [Ber90]. Parmi les quatorze façons de paver le plan avec le même triangle (voir [Grü87]), il en existe huit possibles avec des triangles conformes. Excepté P_{3-12} les sept autres sont composées de translation et de symétrie centrale d'un même motif. Les quatre suivantes (P_{3-9} , P_{3-11} , P_{3-13} et P_{3-14}) sont générés par un parallélogramme formé de deux triangles.

Il est évident que toute translation d'un même motif correspond à la transformation de chacune des mailles du motif et une des mailles du motif image par la translation ($R = I_2$). L'erreur dans un motif étant la somme des erreurs sur chacune des mailles le composant, on a bien les mêmes valeurs dans le motif image. Si un motif est obtenu par symétrie centrale d'un autre motif on est dans le cas $R = -I_2$ et on retourne au cas 1. Si de plus le motif est constitué d'un seul parallélogramme, on retourne au cas 1.

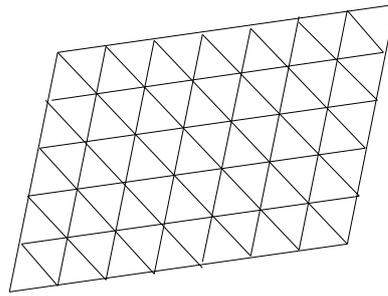


FIG. 5.2 – maillage de triangles équilatéraux

Exemple avec Freefem++

Nous avons fait de l'adaptation de maillage P_1 pour une erreur quadratique donnée avec la métrique correspondante. On peut observer sur la figure 5.3 qu'en dehors de quelques triangles frontaliers, le maillage adapté obtenu présente des mailles isométriques avec $R = -I_2$. Ce que prévoit le résultat 5.2.1.

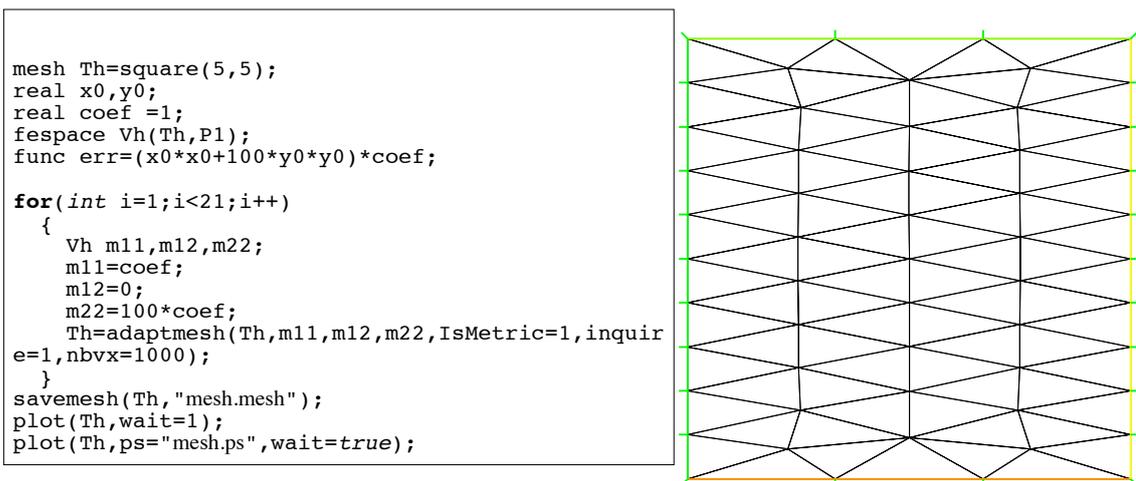


FIG. 5.3 –

5.2.2 En dimension trois d'espace

En dimension trois d'espace, nous montrons qu'il existe au moins un pavage de l'espace par des tétraèdres isométriques sur lequel on a une symétrie centrale par blocs.

Corollaire 5.2.4.

Tout domaine Ω_{\square} pouvant être découpé en cubes admet au moins un maillage en tétra-

5.3. Estimation de l'erreur d'interpolation de Lagrange sur un simplexe

èdres isométriques ayant un centre de symétrie dans chaque cube. Sur un tel maillage, les normes L^p , $1 \leq p < \infty$ et H^1 de l'erreur d'interpolation P_{n-1} Lagrange d'un polynôme de degré n sont équi-réparties par demi-cube.

Démonstration.

Il suffit de découper chaque cube en 6 tétraèdres isométriques en procédant comme suit :

Soit ABCDEFGH un cube, ABCDEF un demi-cube issu de ce cube. En découplant le demi-cube en trois comme l'indique la figure 5.4, de façon à ne pas avoir de tétraèdre régulier, on obtient trois tétraèdres isométriques CDEF, CDEB, CABE. On vérifie facilement que chacun de ces trois tétraèdres est l'image de l'un des tétraèdres de l'autre moitié du cube par la symétrie centrée au barycentre du cube. CDEF est l'image de EGCA, CDEB est l'image de EGCH, CABE est l'image de EFHC.

Chaque diagonale servant d'arête sur une face quelconque de notre cube est parallèle et coplanaire à la diagonale qui joue le même rôle sur la face opposée. Ce qui permet un empilement par translation de cubes pour générer notre maillage Ω_{\square} .

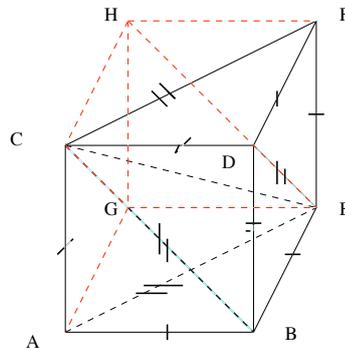


FIG. 5.4 – Découpage d'un cube en tétraèdres isométriques.

5.3 Estimation de l'erreur d'interpolation de Lagrange sur un simplexe

Nous utilisons les notations (5.4). Dans ce paragraphe, nous proposons une réécriture de l'estimation d'erreur d'interpolation déjà proposée dans [Les01, Ala03], basée sur la matrice hessienne. Cette estimation d'erreur est l'un des principaux outils de base de l'adaptation de maillage pour les éléments finis P_1 . Notre nouvelle estimation reste basée sur la matrice hessienne. Cependant, notre calcul utilise l'ordre trois du développement de Taylor rendant le résultat utile pour faire de l'adaptation de maillage pour les éléments finis P_2 . Les termes de dérivée troisième sont masqués grâce au lemme suivant :

Lemme 5.3.1.

Soit φ une fonction de classe \mathcal{C}^3 sur un ensemble $\Omega \subset \mathbb{R}^d$, soit $X \in \Omega$ et soit $Y \in \Omega$. Soit $H_{(\overline{XY} \cdot \nabla \varphi + 2\varphi)(X)}$ la matrice hessienne de la fonction $\overline{XY} \cdot \nabla \varphi + 2\varphi$ au point X . Alors,

$$D^3\varphi(X) \cdot (\overline{XY})^3 = H_{(\overline{XY} \cdot \nabla \varphi + 2\varphi)(X)} \cdot (\overline{XY})^2. \quad (5.7)$$

Démonstration.

$$D^3\varphi(X) \cdot (\overline{XY})^3 = \left[\sum_{i=1}^d \left(\frac{\partial(H_{\varphi(X)})}{\partial x_i} \right) (y_i - x_i) \right] \cdot (\overline{XY})^2$$

or

$$\frac{\partial(H_{\varphi(X)})}{\partial x_i} (y_i - x_i) = (y_i - x_i) H \frac{\partial \varphi(X)}{\partial x_i}.$$

Alors,

$$\sum_i (y_i - x_i) \frac{\partial^2(\frac{\partial \varphi}{\partial x_i})}{\partial x_j \partial x_k} = \sum_i \frac{\partial}{\partial x_j} \left[(y_i - x_i) \frac{\partial(\frac{\partial \varphi}{\partial x_i})}{\partial x_k} \right] - \sum_i \frac{\partial}{\partial x_j} (y_i - x_i) \frac{\partial(\frac{\partial \varphi}{\partial x_i})}{\partial x_k}.$$

Comme $\frac{\partial}{\partial x_j} (y_i - x_i) = -\delta_{ij}$, on a donc

$$\begin{aligned} \sum_i (y_i - x_i) \frac{\partial^2(\frac{\partial \varphi}{\partial x_i})}{\partial x_j \partial x_k} &= \sum_i \frac{\partial}{\partial x_j} \left[(y_i - x_i) \frac{\partial(\frac{\partial \varphi}{\partial x_i})}{\partial x_k} \right] + \frac{\partial(\frac{\partial \varphi}{\partial x_j})}{\partial x_k} \\ &= \sum_i \frac{\partial^2}{\partial x_j \partial x_k} \left[(y_i - x_i) \frac{\partial \varphi}{\partial x_i} \right] + \frac{\partial(\frac{\partial \varphi}{\partial x_j})}{\partial x_k} + \frac{\partial(\frac{\partial \varphi}{\partial x_j})}{\partial x_k} \\ &= \frac{\partial^2}{\partial x_j \partial x_k} \left[\overline{XY} \cdot \nabla \varphi \right] + 2 \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_j \partial x_k} \\ &= \frac{\partial^2}{\partial x_j \partial x_k} \left[\overline{XY} \cdot \nabla \varphi + 2\varphi \right]. \end{aligned}$$

$$\text{D'où } D^3\varphi(X) \cdot (\overline{XY})^3 = H_{(\overline{XY} \cdot \nabla \varphi + 2\varphi)(X)} \cdot (\overline{XY})^2.$$

Théorème 5.3.2.

Soit φ une fonction suffisamment régulière (de classe 1. \mathcal{C}^4 ou 2. \mathcal{C}^3) sur un simplexe $T \subset \mathbb{R}^d$, $\tilde{\varphi}_k$ son interpolée de Lagrange de degré k . Soit Y un sommet de T et soit $X \in T$. Alors,

5.3. Estimation de l'erreur d'interpolation de Lagrange sur un simplexe

1. $|(\varphi - \tilde{\varphi}_2)(X)| \leq \frac{5}{6} |\langle \overrightarrow{XY}, H_{(\varphi - \tilde{\varphi}_2)(X)} \cdot \overrightarrow{XY} \rangle| + \frac{1}{24} \max_{Z \in [X, Y]} |D^4 \varphi(Z) \cdot (\overrightarrow{XY})^4|.$
2. $|(\varphi - \tilde{\varphi}_k)(X)| \leq \frac{1}{6} \max_{Z \in [Y, X]} |\langle \overrightarrow{XY}, H_{(\overrightarrow{XY} \cdot \nabla \varphi + 5\varphi - 3\tilde{\varphi}_k)(Z)} \cdot \overrightarrow{XY} \rangle|.$

Démonstration.

Nous cherchons à majorer l'erreur d'interpolation en un point $X \in T$ où cette erreur est maximale, c'est à dire que son gradient est nul ($\nabla \mathcal{E}(X) = \vec{0}$).

1• Faisons un développement de Taylor à l'ordre quatre avec reste intégral en X à partir d'un sommet Y du simplexe T .

$$\begin{aligned} \mathcal{E}(Y) &= \mathcal{E}(X) + \overrightarrow{XY} \cdot \nabla \mathcal{E}(X) + \frac{1}{2} \langle \overrightarrow{XY}, H_{\mathcal{E}(X)} \cdot \overrightarrow{XY} \rangle + \frac{1}{6} D^3 \varphi(X) \cdot (\overrightarrow{XY})^3 \\ &\quad + \int_0^1 \frac{(1-t)^3}{6} D^4 \varphi(Y + t\overrightarrow{XY}) \cdot (\overrightarrow{XY})^4 dt \end{aligned}$$

Or $\nabla \mathcal{E}(X) = \vec{0}$ et $\mathcal{E}(Y) = 0$ car Y est un sommet de T . Donc,

$$\begin{aligned} -\mathcal{E}(X) &= \frac{1}{2} \langle \overrightarrow{XY}, H_{\mathcal{E}(X)} \cdot \overrightarrow{XY} \rangle + \frac{1}{6} H_{(\overrightarrow{XY} \cdot \nabla \tilde{\varphi}_2 + 2\varphi)(X)} \cdot (\overrightarrow{XY})^2 \\ &\quad + \int_0^1 \frac{(1-t)^3}{6} D^4 \varphi(Y + t\overrightarrow{XY}) \cdot (\overrightarrow{XY})^4 dt, \end{aligned}$$

grâce au lemme précédent.

$\tilde{\varphi}_2$ étant un polynôme du second degré, nous avons

$$H_{(\overrightarrow{XY} \cdot \nabla \tilde{\varphi}_2 + 2\tilde{\varphi}_2)} \equiv 0.$$

En effet,

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 (\overrightarrow{XY} \cdot \nabla \tilde{\varphi}_2)}{\partial x_i \partial x_j} &= \frac{\partial \left(-\frac{\partial \tilde{\varphi}_2}{\partial x_j} + \overrightarrow{XY} \cdot \frac{\partial (\nabla \tilde{\varphi}_2)}{\partial x_j} \right)}{\partial x_i} \\ &= -\frac{\partial^2 \tilde{\varphi}_2}{\partial x_i \partial x_j} + \frac{\partial \left(+ \sum_k (y_k - x_k) \frac{\partial^2 \tilde{\varphi}_2}{\partial x_j \partial x_k} \right)}{\partial x_i} \\ &= -2 \frac{\partial^2 \tilde{\varphi}_2}{\partial x_i \partial x_j}. \end{aligned}$$

Donc,

$$\begin{aligned} -\mathcal{E}(X) &= \frac{1}{2} \langle \overrightarrow{XY}, H_{\mathcal{E}(X)} \cdot \overrightarrow{XY} \rangle + \frac{1}{6} H_{(-2\tilde{\varphi}_2 + 2\varphi)(X)} \cdot (\overrightarrow{XY})^2 \\ &\quad + \int_0^1 \frac{(1-t)^3}{6} D^4 \varphi(Y + t\overrightarrow{XY}) \cdot (\overrightarrow{XY})^4 dt. \end{aligned}$$

D'où

$$|\mathcal{E}(X)| \leq \frac{5}{6} |\langle \overrightarrow{XY}, H_{\mathcal{E}(X)} \cdot \overrightarrow{XY} \rangle| + \frac{1}{24} \max_{Z \in [Y, X]} |D^4 \varphi(Z) \cdot (\overrightarrow{XY})^4|.$$

En négligeant les termes de dérivée d'ordre quatre, on a une estimation d'erreur d'interpolation P_2 de Lagrange simple à évaluer numériquement.

2• Faisons un développement de Taylor à l'ordre trois avec reste intégral en X à partir d'un sommet Y du simplexe T .

$$\mathcal{E}(Y) = \mathcal{E}(X) + \overrightarrow{XY} \cdot \nabla \mathcal{E}(X) + \frac{1}{2} \langle \overrightarrow{XY}, H_{\mathcal{E}(X)} \cdot \overrightarrow{XY} \rangle + \int_0^1 \frac{(1-t)^2}{2} D^3 \varphi(Y + t \overrightarrow{XY}) \cdot (\overrightarrow{XY})^3 dt$$

Or $\nabla \mathcal{E}(X) = \vec{0}$ et $\mathcal{E}(Y) = 0$ car Y est un sommet de T . Donc,

$$\begin{aligned} -\mathcal{E}(X) &= \frac{1}{2} \langle \overrightarrow{XY}, H_{\mathcal{E}(X)} \cdot \overrightarrow{XY} \rangle + \int_0^1 \frac{(1-t)^2}{2} D^3 \varphi(Y + t \overrightarrow{XY}) \cdot (\overrightarrow{XY})^3 dt \\ &= \frac{1}{2} \langle \overrightarrow{XY}, H_{\mathcal{E}(X)} \cdot \overrightarrow{XY} \rangle \int_0^1 3(1-t)^2 dt \\ &\quad + \int_0^1 \frac{(1-t)^2}{2} H_{(\overrightarrow{XY} \cdot \nabla \varphi + 2\varphi)(Y + t \overrightarrow{XY})} \cdot (\overrightarrow{XY})^2 dt \\ &\quad \left(\text{grâce au lemme précédent et au fait que } \int_0^1 3(1-t)^2 dt = 1 \right) \\ &= \int_0^1 \frac{(1-t)^2}{2} \left[H_{(\overrightarrow{XY} \cdot \nabla \varphi + 2\varphi)(Y + t \overrightarrow{XY})} + 3H_{\mathcal{E}(X)} \right] \cdot (\overrightarrow{XY})^2 dt. \end{aligned}$$

D'où

$$|\mathcal{E}(X)| \leq \frac{1}{6} \max_{Z \in [Y, X]} |\langle \overrightarrow{XY}, H_{(\overrightarrow{XY} \cdot \nabla \varphi + 5\varphi - 3\varphi_k)(Z)} \cdot \overrightarrow{XY} \rangle|.$$

5.3.1 Evaluation de l'estimateur

Nous proposons des stratégies de calcul de la matrice hessienne contenue dans cette nouvelle estimation d'erreur, à l'aide des outils de reconstruction de la matrice hessienne [HK08a], (cf. chapitre 2, page 19). Pour cela nous privilégions deux méthodes qui sont parmi les plus efficaces :

- la méthode des moindres carrés (cf. paragraphe 2.2, page 22),
- la méthode d'interpolation et différences finies locales (cf. paragraphe 2.5 page 28).

5.3. Estimation de l'erreur d'interpolation de Lagrange sur un simplexe

Par la méthode des moindres carrés

Le code que nous proposons pour évaluer la matrice hessienne d'une fonction φ par ce moyen (notamment dans Freefem++ cf. paragraphe 2.6.1, page 32), permet d'obtenir à la fois le gradient et la matrice de la fonction φ considérée aux sommets du maillage. En l'appliquant une première fois à la fonction φ , on obtient son gradient et une seconde fois à $\overrightarrow{XY} \cdot \nabla\varphi + 5\varphi$ on récupère la matrice hessienne de cette dernière expression en chaque sommet Y du maillage pour tout X pris dans le maillage.

Par interpolation et différences finies locales

Cette technique nous permet de calculer dans un premier temps l'interpolée d'une fonction φ au voisinage d'un point où l'on veut l'évaluer. Ce voisinage (mailles autour du point considéré) étant choisi de manière à contenir une grille locale qui permettra de définir un schéma aux différences fines pour obtenir la matrice hessienne de φ . La même grille considérée contient nécessairement une grille suffisante pour déterminer le gradient de φ en chaque sommet du maillage. L'on a plus qu'à reprendre le code depuis le début avec $\overrightarrow{XY} \cdot \nabla\varphi + 5\varphi$ pour obtenir la matrice hessienne de cette dernière expression.

Remarque 5.3.3.

Le terme $\overrightarrow{XY} \cdot \nabla\varphi$ désigne la dérivée directionnelle de la fonction φ dans la direction \overrightarrow{XY} . L'évaluation numérique de cette expression peut donc être faite simplement par une formule aux différences finies suivant la direction choisie.

En effet,

$$\overrightarrow{XY} \cdot \nabla\varphi(Z) = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{\varphi(Z + t\overrightarrow{XY}) - \varphi(Z)}{t}.$$

En dimension deux

Nous donnons le résultat du calcul de la matrice hessienne de l'interpolée P_2 d'une fonction φ , obtenu à l'aide du logiciel maple.

Soient X_0, X_1, X_2 les trois sommets de T et X_{01}, X_{02}, X_{12} les milieux respectifs des arêtes $[X_0, X_1], [X_0, X_2], [X_1, X_2]$.

$$\text{Posons } |T| = \frac{|y_0x_2 + y_2x_1 + x_0y_1 - y_0x_1 - x_0y_2 - x_2y_1|}{2}, \quad \varphi_k = \varphi(X_k),$$

$$\tilde{h}_{11} = \frac{(y_1 - y_2)^2\varphi_0 + (y_0 - y_2)^2\varphi_1 + (y_0 - y_1)^2\varphi_2}{|T|^2} - 2 \frac{(y_1 - y_2)(y_0 - y_2)\varphi_{01} + (y_1 - y_2)(y_1 - y_0)\varphi_{02} + (y_0 - y_2)(y_0 - y_1)\varphi_{12}}{|T|^2},$$

$$\begin{aligned} \tilde{h}_{12} = & -\frac{(x_1 - x_2)(y_1 - y_2)\varphi_0 + (x_0 - x_2)(-y_2 + y_0)\varphi_1 + (x_0 - x_1)(y_0 - y_1)\varphi_2}{|T|^2} \\ & + \frac{(x_1 - x_2)(-y_2 + y_0)\varphi_{01} + (y_1 - y_2)(x_0 - x_2)\varphi_{01} - (x_1 - x_2)(y_0 - y_1)\varphi_{02}}{|T|^2}, \\ & + \frac{-(y_1 - y_2)(x_0 - x_1)\varphi_{02} + (x_0 - x_2)(y_0 - y_1)\varphi_{12} + (-y_2 + y_0)(x_0 - x_1)\varphi_{12}}{|T|^2} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \tilde{h}_{22} = & \frac{(x_1 - x_2)^2\varphi_0 + (x_0 - x_2)^2\varphi_1 + (x_0 - x_1)^2\varphi_2}{|T|^2} \\ & - 2\frac{(x_1 - x_2)(x_0 - x_2)\varphi_{01} + (x_1 - x_2)(x_1 - x_0)\varphi_{02} + (x_0 - x_2)(x_0 - x_1)\varphi_{12}}{|T|^2}. \end{aligned}$$

Alors, on a $H_{\tilde{\varphi}_2} = \begin{bmatrix} \tilde{h}_{11} & \tilde{h}_{12} \\ \tilde{h}_{12} & \tilde{h}_{22} \end{bmatrix}$.

Nous rappelons l'obtention de métriques à partir de la matrice hessienne (cf. paragraphes 3,3.5 pages 55, 62).

Définition.

Une métrique \mathcal{M} de \mathbb{R}^2 est une matrice symétrique définie positive qui permet de définir une distance dans l'espace métrique euclidien \mathbb{R}^2 .

En effet le produit scalaire de deux vecteurs \vec{X} et \vec{Y} dans l'espace métrique \mathbb{R}^2 se définit comme suit [FG99] :

$$\langle \vec{X}, \vec{Y} \rangle_{\mathcal{M}} = {}^t\vec{X}\mathcal{M}\vec{Y} \in \mathbb{R}.$$

La norme euclidienne d'un vecteur \vec{AB} ou distance entre les points A et B pour la métrique \mathcal{M} est définie par :

$$d_{\mathcal{M}}(A, B) = \|\vec{AB}\|_{\mathcal{M}} = \sqrt{{}^t\vec{AB}\mathcal{M}\vec{AB}}.$$

Il existe des situations où la métrique n'est pas constante mais continue. Dans ce cas, on a un *champ de métriques* $\mathcal{M}(X)$ défini en chaque point X de l'espace. La norme d'un vecteur \vec{AB} est alors donnée par :

$$d_{\mathcal{M}}(A, B) = \|\vec{AB}\|_{\mathcal{M}} = \int_0^1 \sqrt{{}^t\vec{AB}\mathcal{M}(A + t\vec{AB})\vec{AB}} dt.$$

Une métrique \mathcal{M} peut être représentée par sa boule unité [Ala03]. La boule unité dans la métrique \mathcal{M} définie au point P est l'ensemble des points M qui satisfont la relation

$$\|\vec{PM}\|_{\mathcal{M}} = \sqrt{{}^t\vec{PM}\mathcal{M}\vec{PM}} = 1.$$

5.3. Estimation de l'erreur d'interpolation de Lagrange sur un simplexe

La matrice hessienne \mathcal{H} étant symétrique, sa valeur absolue (définie ci-dessous) lorsqu'elle est inversible est définie positive. Cette valeur absolue de la matrice hessienne permet donc de définir une métrique.

$$|\mathcal{H}| = \mathcal{R}|\Lambda|\mathcal{R}^{-1}.$$

\mathcal{R} désigne la matrice des vecteurs propres de \mathcal{H} . $|\Lambda|$ désigne la matrice diagonale définie par :

$$\tilde{\lambda}_i = \min \left(\max \left(\frac{C|\lambda_i|}{\epsilon}, \frac{1}{h_{max}^2} \right), \frac{1}{h_{min}^2} \right).$$

Où λ_i est la valeur propre correspondant au $i^{\text{ème}}$ vecteur propre de la matrice hessienne. h_{max} désigne la taille de l'arête maximale autorisée dans le maillage, et h_{min} la taille de l'arête minimale autorisée.

Lorsque l'on dispose d'un champ de métriques aux sommets d'un maillage, le processus d'adaptation consiste à trouver un maillage unité dans ce champ de métriques. La stratégie d'évaluation de l'estimateur proposée au paragraphe 5.3.1, page 100 suppose que l'on obtient la matrice hessienne en un sommet Y donné dans chaque direction \overrightarrow{XY} choisie. Il se pose le problème d'en faire une métrique et une seule au point Y .

La matrice hessienne obtenue pour une direction \overrightarrow{XY} nous permet de prescrire la taille de l'arête optimale dans cette direction. On obtient en chaque direction autour de Y un sommet optimal. Il suffit de relier ces sommets deux à deux par une courbe discrète pour en faire une courbe fermée qui les interpole. Sur la figure 5.5 nous proposons de relier deux points X_i et X_{i+1} en passant par un sommet aussi éloigné de Y que le sommet X_i le plus éloigné de Y . On peut donc se servir de l'algorithme proposé au chapitre précédent [HK08b] pour construire une métrique en Y qui respecte toutes les tailles directionnelles.

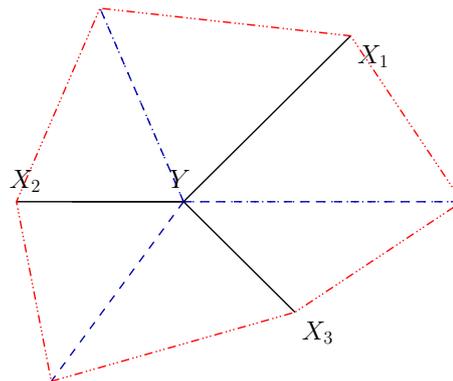


FIG. 5.5 –

5.4 Conclusion

Nous avons abordé la question de l'équi-répartition de l'erreur d'interpolation sur une triangulation en caractérisant cette notion lorsque l'interpolée est un polynôme d'un degré inférieur à la fonction à interpoler. Dans le cas général, il reste à définir les stratégies permettant d'atteindre cet objectif.

Nous avons montré qu'un calcul de dérivées secondes pouvait suffire à estimer l'erreur d'interpolation pour les éléments finis de Lagrange via un développement de Taylor à l'ordre trois en particulier pour de l'interpolation P_2 .

Un objectif de ce travail est de palier au coût et à l'instabilité numérique constatée de la méthode des moindres carrés pour la reconstruction des dérivées troisièmes. Il demeure donc important d'appliquer numériquement ces résultats pour faire de l'adaptation de maillage lorsque l'on résout une EDP par éléments finis P_2 . Ce qui permettrait de mieux apprécier son utilité pratique.

Chapitre 6

Tests numériques et comparaisons

Sommaire

6.1	Introduction	107
6.2	Génération de métriques et calcul de la matrice hessienne	107
6.2.1	Exemple	108
6.3	Dérivées secondes et troisièmes	113
6.4	Conclusion	117

6.1 Introduction

Nous avons implémenté au cours de ce travail des fonctions dans le logiciel Freefem++ permettant d'effectuer un certain nombre de calculs.

Nous avons proposé cinq fonctions utilisables dans le ce logiciel, permettant de :

- Calculer la matrice hessienne en chaque sommet d'un maillage par la nouvelle méthode d'interpolation et différences finies locales avec interpolation P_2 ou P_3 , proposée au chapitre 2.
- Calculer la matrice hessienne en chaque sommet d'un maillage par la méthode des moindres carrés avec prise en compte des valeurs aux sommets du maillage ou aux sommets du maillage et aux milieux des arêtes.
- Calculer le vecteur gradient en chaque sommet d'un maillage par la méthode des moindres carrés en prenant en compte des valeurs aux sommets du maillage. Cette fonction, récupère les composantes du vecteur gradient obtenu par la fonction qui évalue la matrice hessienne.
- Déterminer en chaque sommet d'un maillage les coefficients de la métrique locale associée à une courbe décrivant l'erreur, de type polynomiale homogène.
- Calculer les dérivées troisièmes sur un maillage par la méthode des moindres carrés avec prise en compte des valeurs aux sommets du maillage ou aux sommets du maillage et aux milieux des arêtes.

Nous proposons dans ce chapitre des tests numériques effectués avec Freefem++ sur des exemples simples. Ces tests ont pour but de faire une étude des comparative des résultats obtenus avec les différentes fonctions proposées ainsi que celles existantes dans ce logiciel.

6.2 Génération de métriques et calcul de la matrice hessienne

L'objectif principal de l'algorithme de génération de métrique proposée au chapitre 3 est de trouver les coefficients de la métrique associée à une représentation locale de l'erreur par une courbe fermée. Le but étant de traiter les cas où l'estimation d'erreur d'interpolation n'est pas donnée par la matrice hessienne. Car la métrique dans le cas de la matrice hessienne est donnée par la *valeur absolue* de la matrice hessienne.

Nous calculons la matrice hessienne H en chaque sommet d'un maillage par les deux fonctions proposées. Le résultat obtenu est utilisé pour décrire localement la courbe d'erreur par l'équation suivante :

$$\left| \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}^t H \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \right| = 1. \quad (6.1)$$

Nous appliquons notre algorithme à cette équation et les métriques obtenues sont utilisées pour adapter le maillage d'une part. D'autre part, les valeurs de la matrice hes-

siennes obtenues sont utilisées par Freefem++ pour obtenir la *valeur absolue* de matrice hessienne qui servira de métrique pour adapter le maillage. Le code suivant illustre un des exemples traités.

```

load"hess2d"
load "MetricKuate"
func ue=5*x*x*x-2*y+1;
func g =-30*x;
real t0=-1,t1=1,z0=-1,z1=1,x0,y0 ,Hmin=0.00001;
mesh Th=square(10,10,[t0+(t1-t0)*x,z0+(z1-z0)*y]);
fespace Vh(Th,P2);
fespace Wh(Th,P1);
Wh u,v; int T =3,nvmax=1000000;
problem laplacien(u,v,solver=CG,eps=1e-6)=
  int2d(Th)(dx(u)*dx(v)+dy(u)*dy(v))-int2d(Th)(v*g)+on(1,2,3,4,u=ue);
laplacien;
for(int t=0;t<T;t++)
  { Wh fxx,fx,fyy,m11,m12,m22;    real cc=1;
    hessienMC(Th,u,1,[fxx[] ,fx[] ,fyy[]]);
    Th=adaptmesh(Th,u,cc*fxx,cc*fx,cc*fyy,hmin=Hmin,nbvx=nvmax);
    laplacien; plot(Th,wait=0,ps="mailhessMCnometric"+t+".eps");
  };
Th=square(10,10,[t0+(t1-t0)*x,z0+(z1-z0)*y]);
laplacien;
for(int t=0;t<T;t++)
  { Wh fxx,fx,fyy,m11,m12,m22;    real coef=20,cc=20;
    hessienMC(Th,u,1,[fxx[] ,fx[] ,fyy[]]);
    func Err=(fxx*x0*x0+2*fx*x0*y0+fyy*y0*y0)*coef;
    MetricKuate(Th,150,0.0001,3,Err,[m11[] ,m12[] ,m22[]],[x0,y0]);
    Th=adaptmesh(Th,cc*m11,cc*m12,cc*m22,IsMetric=1,
      hmin=Hmin,nbvx=nvmax);
    laplacien; plot(Th,wait=0,ps="mailhessMCmetric"+t+".eps");
  };

```

6.2.1 Exemple

Nous avons résolu l'équation simple suivante :

$$-\Delta u = -30x,$$

sur le carré $[-1, 1] \times [-1, 1]$ avec solution exacte $u_{ex} = 5x^3 - 2y + 1$, prise comme conditions aux limites de Dirichlet. Cette fonction est anisotrope. La solution numérique est calculée par la méthode des éléments finis P_1 et P_2 .

A) Matrice hessienne calculée par la méthode des moindres carrés

6.2. Génération de métriques et calcul de la matrice hessienne

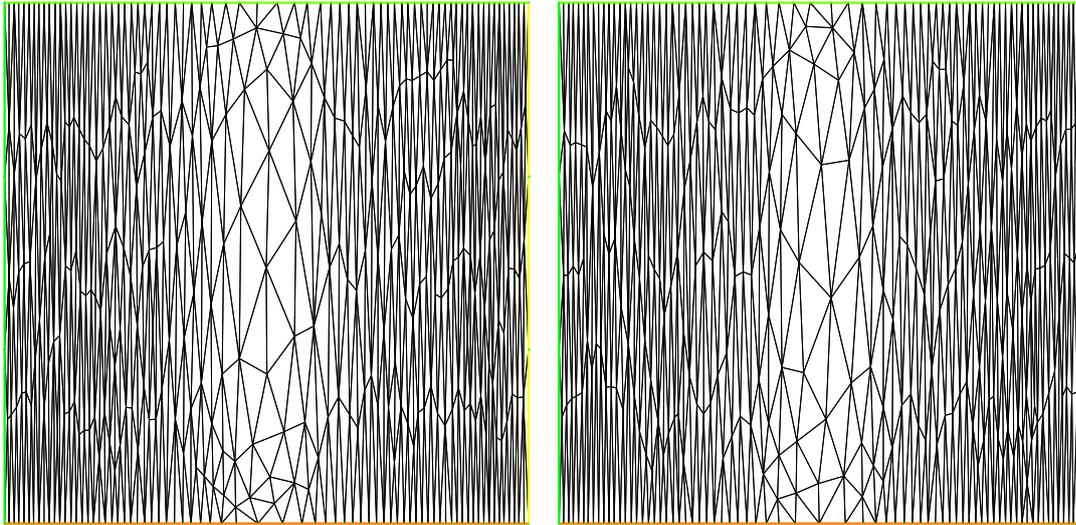


FIG. 6.1 – A) : Maillages adaptés avec résolution par EF P_1 à la seconde itération. A gauche métriques calculées par l’algorithme. A droite métrique donnée par la *valeur absolue* de la matrice hessienne.

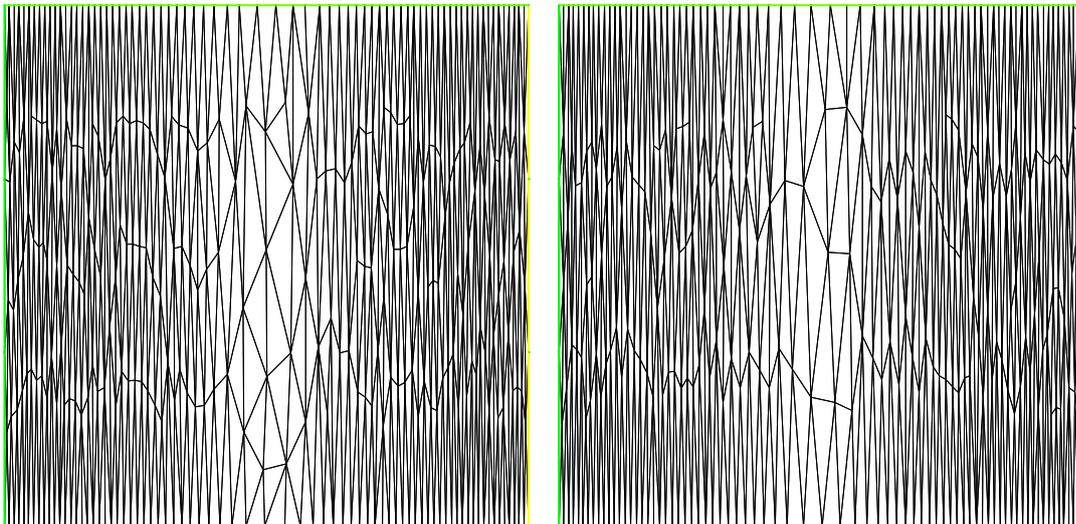


FIG. 6.2 – A) : Maillages adaptés avec résolution par EF P_2 à la seconde itération. A gauche métriques calculées par l’algorithme. A droite métrique donnée par la *valeur absolue* de la matrice hessienne.

Les figures 6.2 et 6.1 montrent que l'on obtient quasiment le même résultat en approchant les métriques par notre algorithme qu'en prenant les métriques données par la "valeur absolue" de la matrice hessienne. Dans la suite, nous ne présentons plus les résultats donnés par cette métrique analytique car ils sont similaires aux deux exemples sus-cités.

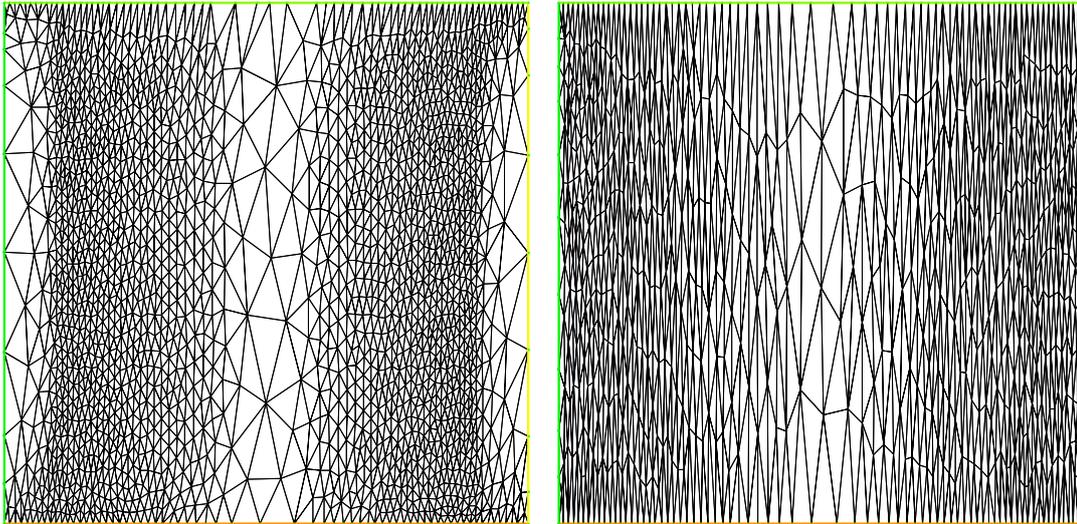


FIG. 6.3 – A) : Maillages adaptés avec résolution par EF P_1 et valeurs de la fonction prises aux sommets et aux milieux des arêtes. A gauche la première itération, à droite la troisième itération.

Lorsque les valeurs sont prises aux sommets et aux milieux des arêtes pour une fonction P_1 éléments finis (figure 6.3), le résultat sur la frontière du maillage s'améliore au fil des itérations. Au final la maillage est inutilement plus raffiné en ordonnées, traduisant la perte de consistance du calcul de la matrice hessienne.

6.2. Génération de métriques et calcul de la matrice hessienne

B) Matrice hessienne calculée par la méthode d'interpolation et différences finies locales.

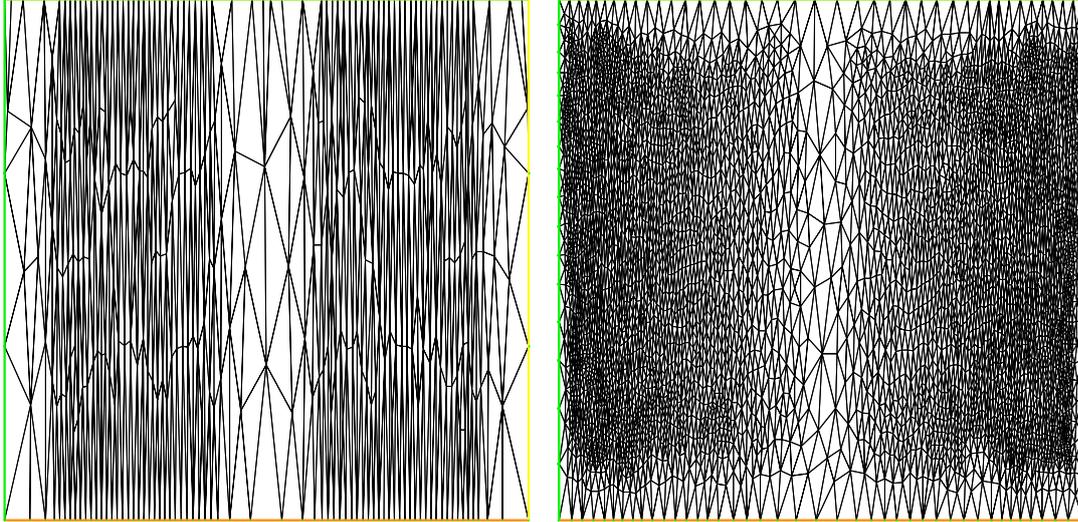


FIG. 6.4 – B) : Maillages adaptés avec résolution par EF P_1 . A gauche la première itération, à droite la troisième itération.

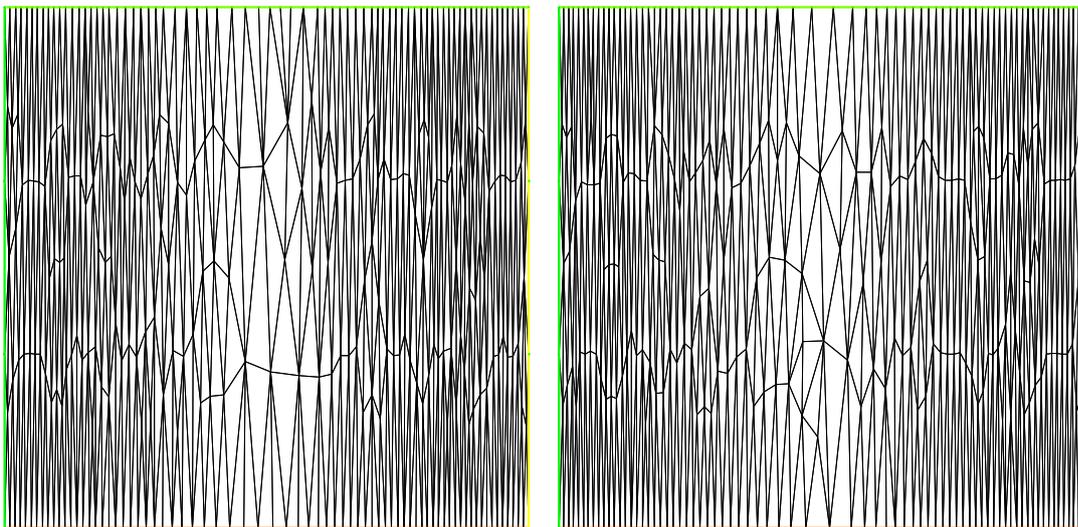


FIG. 6.5 – B) : Maillages adaptés avec résolution par EF P_2 . A gauche la première itération, à droite la troisième itération.

Lorsque le problème est résolu par éléments finis P_2 , les maillages obtenus sont identiques à ceux obtenus avec la méthode des moindres carrés.

Cependant, pour une résolution P_1 éléments finis, on observe le même comportement des maillages adaptés au fil des itérations qu'avec la méthode des moindres carrés lorsque les valeurs sont prises aux sommets et aux milieux des arêtes. Avec cependant un maillage beaucoup plus raffiné en ordonnées.

C) Matrice hessienne calculée par la méthode basée sur la formule de Green.

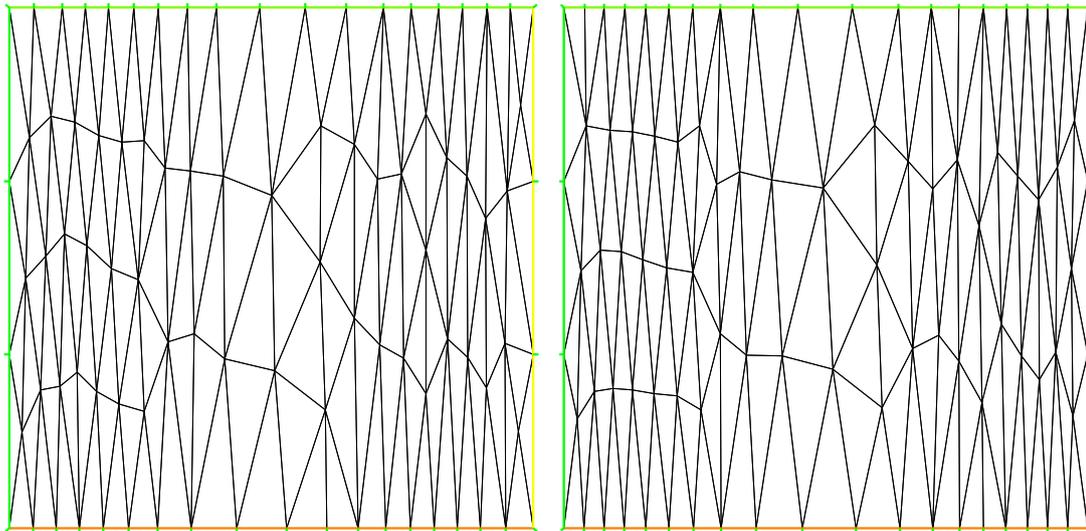


FIG. 6.6 – C) : Maillages adaptés avec résolution par EF P_1 . A gauche la première itération, à droite la troisième itération.

On constate que les maillages adaptés sont quasi-invariants, que l'on résolve le problème par éléments finis P_1 ou P_2 . Ce qui traduit le fait que la matrice hessienne calculée par cette méthode est constante dans les deux cas, pour cet exemple.

Ce résultat montre que cette méthode de reconstruction de la matrice hessienne est moins précise que les deux autres.

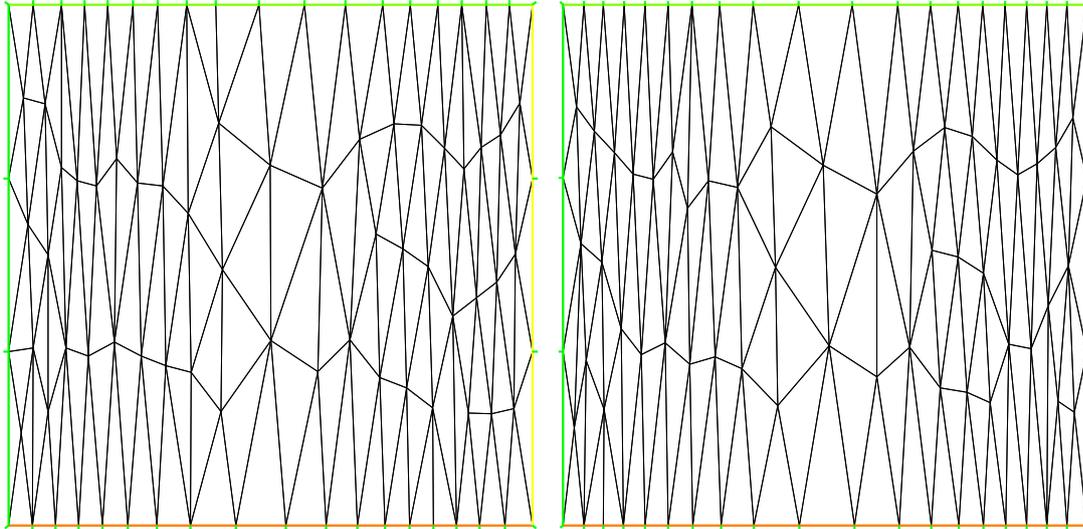


FIG. 6.7 – C) : Maillages adaptés avec résolution par EF P_2 . A gauche la première itération, à droite la troisième itération.

6.3 Dérivées secondes et troisièmes

Exemple 1

Nous reprenons l'exemple précédent et adaptons le maillage en nous servant de dérivées troisièmes comme estimateur d'erreur.

On observe sur la figure 6.8 que lorsque le problème est résolu par éléments finis P_1 , le maillage adapté évolue et se détériore (raffinement inutile en ordonnées) au fil des itérations, par rapport à celui obtenu en utilisant la matrice hessienne.

Cependant pour une résolution éléments finis P_2 , le maillage adapté obtenu est quasi-uniforme, la taille des mailles varie peu et dans une seule direction. Bien qu'il s'agisse d'approximation et non d'interpolation, ce résultat numérique est en accord avec les résultats théoriques du chapitre 5 sur l'interpolation d'un polynôme de degré n par un polynôme de degré $n - 1$.

On observe donc dans cet exemple que l'estimation d'erreur d'interpolation basé sur les dérivées d'ordre $k + 1$ de l'interpolée P_k éléments finis d'une fonction est plus précise que celle donné par les dérivées d'ordre k . Ce qui est bien en accord avec la formule de Taylor multi-point [CR72, CW71] sur l'erreur d'interpolation.

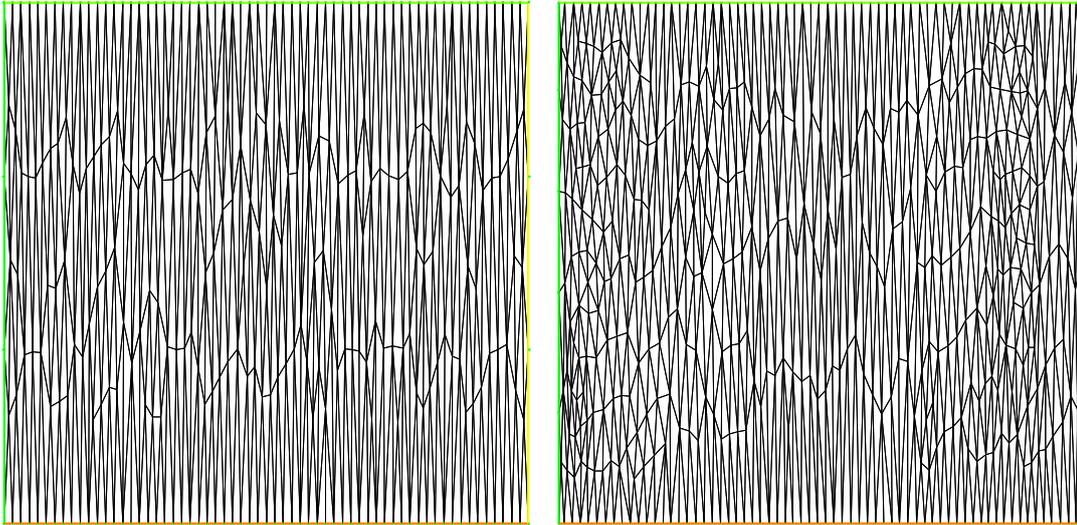


FIG. 6.8 – Maillages adaptés avec résolution par EF P_1 . A gauche la première itération, à droite la troisième itération.

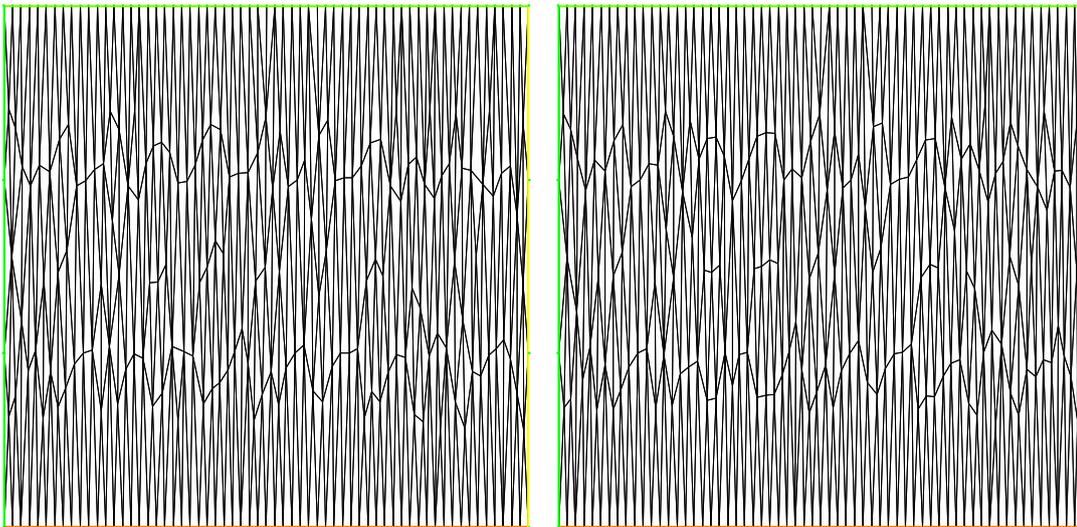


FIG. 6.9 – Maillages adaptés avec résolution par EF P_2 . A gauche la première itération, à droite la troisième itération.

Exemple 2

Nous adaptons le maillage à la fonction suivante :

$$G(x, y) = 0.5\text{erfc}\left(\log\left(\frac{y^2 + x^2}{25}\right) + \frac{y^2 + x^2}{25}\right)$$

6.3. Dérivées secondes et troisièmes

Le domaine est le cercle de rayon 5 centré à l'origine. Le maillage est adapté à la fonction G en utilisant les métriques générées par l'algorithme du chapitre 3, avec l'estimation d'erreur [Hec08] basé sur la dérivée l -ième, dans deux cas : $l = 2$ et $l = 3$. La fonction décrivant localement l'erreur ainsi que les métriques obtenues sont multipliées par un facteur 10 pour ajuster la taille des mailles de façon à mieux observer le comportement des estimateurs. Les résultats sont présentés à convergence de l'algorithme d'adaptation.

A) Matrice hessienne calculée par la méthode des moindres carrés

Les figures 6.10 et 6.11 montrent que le comportement global des dérivées secondes et troisièmes calculées par la méthode des moindres carrés sur un maillage est le même lorsque l'on prend les valeurs de la fonction aux sommets du maillage ou aux sommets et aux milieux des arêtes. Ces figures montrent aussi que l'utilisation des dérivées troisièmes permet de mieux capturer les fortes variations de la fonction par rapport aux dérivées secondes.

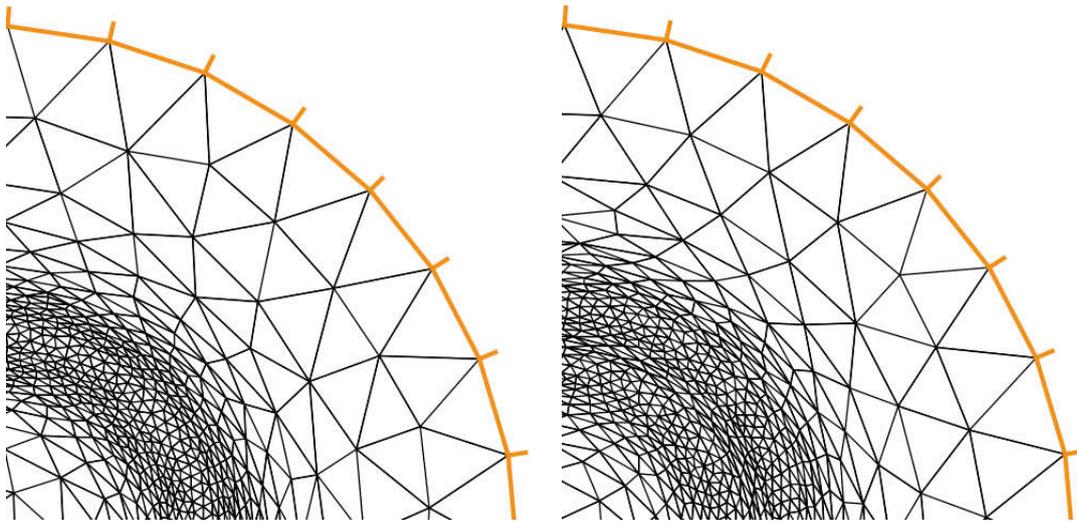


FIG. 6.10 – A) Zoom sur les maillages adaptés : à gauche métriques générées à partir de la matrice hessienne, à droite à partir des dérivées troisièmes. Valeurs de la fonction prises aux sommets des triangles et aux milieux des arêtes.

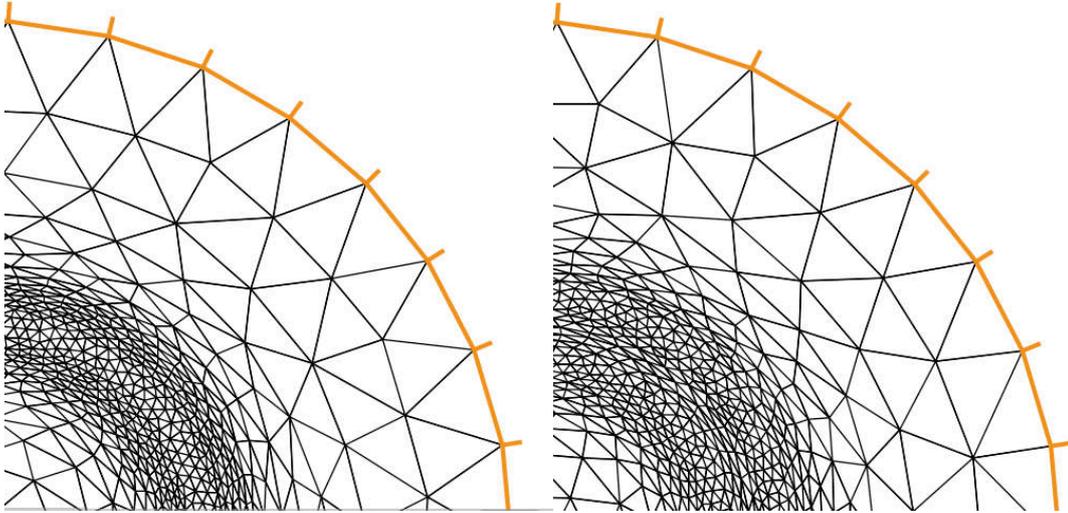


FIG. 6.11 – A) Zoom sur les maillages adaptés : à gauche métriques générées à partir de la matrice hessienne, à droite à partir des dérivées troisièmes. Valeurs de la fonction prise aux sommets des triangles.

B) Matrice hessienne calculée par la méthode d'interpolation et différences finies locales

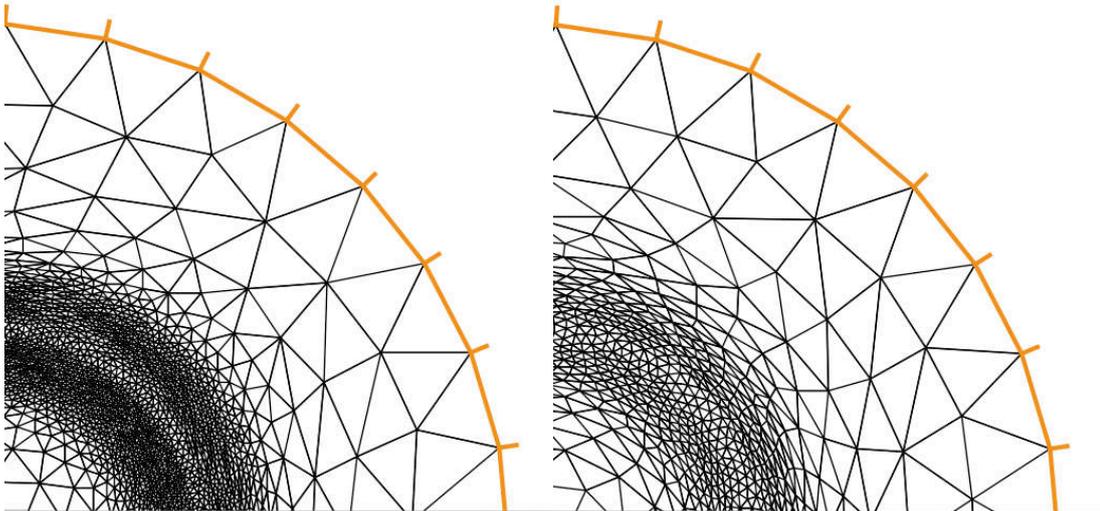


FIG. 6.12 – B) Zoom sur les maillages adaptés : A gauche valeurs prises aux sommets des triangles. A droite valeurs prises aux sommets des triangles et aux milieux des arêtes.

On constate que les résultats obtenus pour la méthode d'interpolation et différences finies locales ont la même tendance que dans l'exemple précédent. Cependant, les problèmes observés sur la frontière dans l'exemple 1 ne se perçoivent pas dans ce second exemple lorsqu'on fait de l'interpolation linéaire. Cela s'explique par le fait que les variations de la fonction sont nulles sur le bord, ce qui coïncide avec le résultat numérique que donne cette méthode dans ce cas.

6.4 Conclusion

Nous avons effectué des tests numériques à propos des estimateurs d'erreur d'interpolation étudiés ainsi que les différentes méthodes numériques permettant de les approcher.

Pour les méthodes de reconstruction de la matrice hessienne, les résultats déjà observés au chapitre 2 ont été confirmés en adaptation de maillage sur les exemples présentés.

Les maillages adaptés construits à partir de métriques obtenus par notre algorithme de construction de métriques proposé au chapitre 3, sont quasi-identiques à ceux obtenus en prenant la *valeur absolue* de la matrice hessienne.

On a pu constater une meilleure efficacité de l'utilisation de dérivées troisièmes en adaptation de maillage anisotrope par rapport aux dérivées secondes sur les deux exemples présentés, malgré les problèmes numériques observés au chapitre 4 lors de l'approximation de dérivées troisièmes par la méthode des moindres carrés.

Deuxième partie

Maillages hexaédriques et quadrilatéraux

Chapitre 7

Transformations Locales de Maillages Hexaédriques

Sommaire

7.1	Introduction	124
7.1.1	Definitions and notations	124
7.2	Quad mesh and local modifications	125
7.3	Hexahedral meshing and local modifications	128
7.3.1	Elementary hex meshes local modifications	129
7.4	Flipping quad and hex meshes	133
7.4.1	Definition	134
7.5	Some new hex mesh local modifications	139
7.6	Conclusion	140

Résumé¹

Les maillages hexaédriques et quadrangulaires offrent pour un même nombre de noeuds beaucoup moins d'éléments que les tétraèdres et les triangles ; ils sont très utilisés dans l'industrie. Cependant, les opérations de raffinement ou de déraffinement local en vue faire de l'adaptation sont très difficiles à effectuer sur des maillages hexaédriques et ce à cause de leur structure en couches. En dehors des méthodes ou algorithmes de génération de maillage hexaédriques, il existe très peu de travaux sur le sujet [BEE02, TK02]. Les opérations de transformation géométrique locale (i.e., modification d'un bloc d'hexaèdres sans en modifier les quadrangles frontaliers) qui existent sont celles proposées par Bern et al. [BEE02], appelées *hex flipping*. Ces opérations de *flipping* sont une extension en dimension 3 d'opérations de raffinement et dé-raffinement local proposées par Canann, Muthukrishnan et Phillips [CMP98].

Nous démontrons quelques propriétés de ces opérations de *hex flipping*, vus comme les seules transformations locales faisant intervenir des maillages où le nombre d'arêtes par sommet est inférieur à cinq et que nous appellerons *maillage hexaédrique élémentaire*. Ces résultats s'inscrivent dans la continuité d'un travail entamé au CEMRACS 2007 [JKL⁺07]. Nous donnons une caractérisation des transformations locales pour des maillages quadrangulaires.

Les travaux de Mitchell [Mit96] proposent des conditions nécessaires essentiellement topologiques pour que le volume d'une surface fermée maillée par des quadrangles admette un maillage compatible en hexaèdres. Nous en proposons une autre.

Nous avons étudié ces problèmes via une approche purement combinatoire et géométrique et proposons une base (dans la mesure où ces opérations sont libres au sens combinatoire) de transformations géométriques locales de maillages hexaédriques, formée de quatre opérations. Cette base permet de générer une infinité de nouvelles transformations locales pour des maillages ayant au plus cinq arêtes par sommet.

Abstract

The modification of hexahedral meshes is difficult to perform since their structure does not allow easy local refinement or un-refinement such that the modification does not go through the boundary. In this paper we prove that the set of hex flipping transformations of Bern et. al. [BEE02] is the only possible local modification on a geometrical hex mesh with less than 5 edges per vertex. We propose a new basis of local transformations that can generate an infinite number of transformations on hex meshes with less than 6 edges per vertex. Those results are a continuation of a previous work [JKL⁺07], on

¹Ce travail fait en collaboration avec Frédéric Hecht et Timoty Tautges, a été publié dans les proceedings of the 17th I.M.R.². Nous présentons en anglais, une version longue de la version originale.

² International Meshing Roundtable

topological modification of hexahedral meshes. We prove that one necessary condition for filling the enclosed volume of a surface quad mesh with compatible hexes is that the number of vertices of that quad mesh with 3 edges should be no less than 8. For quad meshes, we show the equivalence between modifying locally the number of quads on a mesh and the number of its internal vertices.

7.1 Introduction

The using of hexahedral or quadrilateral meshes has its advantages. For example, the smaller number of elements obtained for a given number of vertices than tetrahedral or triangle meshes. But one difficulty within hexahedral meshes is to transform it locally without touching a large region of the mesh, due to its structure as set of layers. In [BEE02] Bern et. al. propose the set of hex flipping transformations as local transformations of hex meshes i.e., the modifications does not change the boundary quads of the local domain where they are applied.

In the second section, we prove that modifying locally quad meshes is equivalent to modifying the number of its internal vertices. In the third section, we propose a necessary condition for meshing a volume with hexes from its boundary quad mesh. We study the problem of local transformations on hex meshes with less than 5 edges per vertex. That brings us to the next section where we look at the hex flipping transformations of Bern et. al. as the unique set of local transformations on that type of hex meshes. In the fifth section, we extend those local transformations to hex meshes with less than 6 edges per vertex and propose a new set of geometrical hex local transformations.

7.1.1 Definitions and notations

A *polyhedron* is a set of closed planar polygonal faces in \mathbb{R}^3 that intersect only at shared vertices and edges, and such that each edge is shared by exactly two faces and each vertex is shared by exactly one cycle of faces.³ A polyhedron divides \mathbb{R}^3 into a bounded *interior* and an unbounded *exterior*, each of which may contain more than one connected component. A *cuboid* in \mathbb{R}^d is a convex polytope, combinatorially equivalent to the unit cube $[0, 1]^d$. *Combinatorial equivalence* means that the faces (vertices, edges, and so forth) of the cuboid are in one-to-one correspondence with the faces of the unit cube, and that this correspondence preserves intersections. In \mathbb{R}^2 a cuboid is simply a convex quadrilateral, called a *quad* for short. In \mathbb{R}^3 a cuboid is a convex polyhedron called a *hex*.

A *quad surface mesh* is a polyhedron whose faces are all quads. A *hex mesh* is a quad surface mesh, along with interior quads that subdivide the polyhedron's interior into hexes. The intersection of any pair of hexes is either empty, a single vertex, a single edge, or a single quad. Quad surface meshes and hex meshes are both examples of

³ This definition of polyhedron allows multiple connected components (two cubes can be one polyhedron!), as well as voids and tunnels model objects made from two different materials.

7.2. Quad mesh and local modifications

cubical complexes [BB98, JZ00, MP02], the analogue of simplicial complexes in which each k -dimensional face is a k -dimensional cuboid.

We also consider *topological hex meshes*: cubical complexes homeomorphic to the input domain, with a boundary mesh combinatorially equivalent to that of the input.

In the following, if not mentioned, we'll consider only *non singular* simply connected meshes (without holes): simply connected meshes where each element (quad or hex) has at least one common facet (edge for quad mesh or quad for hex mesh) with the rest of the mesh.

We call *elementary hex mesh* a conformal hex mesh without holes where every vertex has at the most 4 edges.

We call *interior* of a hex mesh the rest of the hex mesh obtained without its boundary vertices (boundary quads).

On a mesh, let us denote:

P the number of Hexes (polyhedrons), F the number of faces (quads),

\bar{F} the number of boundary faces, $\overset{\circ}{F}$ the number of internal faces,

E the number of edges, \bar{E} the number of boundary edges,

$\overset{\circ}{E}$ the number of internal edges, V the number of vertices,

$\overset{\circ}{V}$ the number of internal vertices, \bar{V} the number of boundary vertices,

V_j^k the number of vertices with k boundary edges and j internal edges.

We will use Euler's and Cauchy's formulas [Ger29, BY95]:

$$F - E + V - P = 1, \tag{7.1}$$

for a complex of polyhedrons, and

$$F - E + V = 2, \tag{7.2}$$

for a single polyhedron.

7.2 Quad mesh and local modifications

In hexahedral and quadrilateral mesh generation, the existence of a mesh need some conditions such as an even number of facets on its boundary [Epp96]; we give a generalization of this property to any mesh whose elements have an even number of boundary facets even if they are of different type.

Theorem 7.2.1. *Any conformal mesh whose elements (of the same type or not) have each an even number of facets, has an even number of facets on its boundary.*

Proof. Let us consider a mesh with n elements. This is true for $n = 1$.

We suppose that this is the case for any mesh with n elements. For a mesh with $n + 1$ elements, we have to add one element to some previous n -element mesh. So the added element intersects the boundary of the previous mesh at m facets, $1 \leq m \leq k - 1$, if k is the number of facets of the added element. If b is the number of facets of the previous mesh, the boundary of the new mesh has $b - m + (k - m) = b + k - 2m$. Which is even. □

It is known that quad meshes give a smaller number of elements than triangle meshes for a given set of vertices. Knowing the number of boundary and internal vertices, we have exactly the number of quads and edges in a quad mesh.

Proposition 7.2.2. *In a 2D simply-connected mesh with h holes and k vertices per element ($k \geq 3$) the number F of elements, \bar{V} of boundary vertices, $\overset{\circ}{V}$ of internal vertices and E of edges satisfies the relations:*

$$F = \frac{\bar{V} + 2(\overset{\circ}{V} + h - 1)}{k - 2}.$$

$$E = \frac{(k - 1)\bar{V} + k(\overset{\circ}{V} + h - 1)}{k - 2}.$$

Proof. In a 2D mesh each internal edge $\overset{\circ}{E}$ belongs to two elements and each boundary edge \bar{E} belongs to one element. So

$$2\overset{\circ}{E} + \bar{E} = kF.$$

As the boundary is a union of closed lines (only one if there are no holes), $\bar{E} = \bar{V}$. Thanks to the Euler formula [BY95],

$$F + V - E = 1 - h.$$

So a 2D mesh is solution of the following equations:

$$\begin{cases} V - E + F = 1 - h \\ 2\overset{\circ}{E} + \bar{V} = kF \end{cases} \quad (7.3)$$

whose solutions give the formulas. □

For quad meshes, to locally transform a mesh (i.e., a sub-domain of the mesh) when keeping the boundary of that sub-domain unchanged, amounts to moving only its internal vertices and re-meshing the sub-domain.

7.2. Quad mesh and local modifications

Theorem 7.2.3. *The variation of the number of quads equal the variation of the number of internal vertices between two quad meshes (mesh_a and mesh_b), if and only if the two meshes have the same number of boundary vertices:*

$$\mathring{V}_a - \mathring{V}_b = F_a - F_b \iff \bar{V}_a = \bar{V}_b.$$

In other words, adding or removing some elements in a quad mesh without changing its boundary is equivalent to adding or removing exactly the same number of its internal vertices.

Proof.

• Let us suppose that $\bar{V}_a = \bar{V}_b$. As we have said, on a quad mesh each internal edge is shared by exactly two quads so we can write:

$$4F = 2\mathring{E} + \bar{E}. \quad (7.4)$$

Thanks to the first equation of (7.3) the difference between two meshes that have the same boundary satisfies

$$(F_a - F_b) + (V_a - V_b) - (E_a - E_b) = 0,$$

so

$$(F_a - F_b) + (\mathring{V}_a - \mathring{V}_b) - (\mathring{E}_a - \mathring{E}_b) = 0.$$

Thanks to equation (7.4),

$$\mathring{E}_a - \mathring{E}_b = 2(F_a - F_b),$$

so

$$(\mathring{V}_a - \mathring{V}_b) - (F_a - F_b) = 0.$$

• Let us suppose that $\mathring{V}_a - \mathring{V}_b = F_a - F_b$. Then

$$(F_a - F_b) + (V_a - V_b) - (E_a - E_b) = 0$$

gives

$$2(\mathring{V}_a - \mathring{V}_b) + (\bar{V}_a - \bar{V}_b) - (E_a - E_b) = 0.$$

Equation (7.4) gives $4(\mathring{V}_a - \mathring{V}_b) = 2(\mathring{E}_a - \mathring{E}_b) + (\bar{E}_a - \bar{E}_b)$, so

$$2(\bar{E}_a - \bar{E}_b) - 2(\bar{V}_a - \bar{V}_b) = \bar{E}_a - \bar{E}_b.$$

But on each quad mesh, $\bar{E} = \bar{V}$ so

$$\bar{E}_a = \bar{E}_b.$$

□

7.3 Hexahedral meshing and local modifications

As a complex of polyhedrons, a hex mesh satisfies the equation (7.1). Its boundary is a polyhedron so it satisfies (7.2). On its boundary, each edge belongs exactly to two quads and the number of hex times the number of faces per hex equals the number of boundary faces plus two times the number of internal faces. Then any hex mesh is subject to the following system:

$$\begin{cases} V - E + F - P = 1 \\ \bar{V} - \bar{E} + \bar{F} = 2 \\ \bar{E} = 2\bar{F} \\ \bar{F} + 2\bar{F} = 6P. \end{cases} \quad (7.5)$$

Proposition 7.3.1. *A simply-connected hex mesh satisfies the following equations:*

$$\bar{V} = \bar{F} + 2,$$

$$\sum_{j \geq 0, k \geq 3} (4 - k) V_j^k = 8,$$

$$P = \frac{1}{2} (\mathring{E} - \mathring{V} - 1) + \frac{\bar{F}}{4}.$$

Proof.

- The second equation of system (7.5) combined with the third gives

$$\bar{V} = \bar{F} + 2.$$

- The number of boundary edges satisfies $\sum_{j \geq 0, k \geq 3} k V_j^k = 2\bar{E} = 4\bar{F}$. As $\bar{F} = \bar{V} - 2$, we have

$$\sum_{j \geq 0, k \geq 3} (4 - k) V_j^k = 8.$$

- The first minus the second equation of system (7.5) gives

$$\mathring{V} - \mathring{E} + \mathring{F} - P = -1,$$

so with $\mathring{F} = 3P - \frac{\bar{F}}{2}$, we obtain

$$P = \frac{1}{2} (\mathring{E} - \mathring{V} - 1) + \frac{\bar{F}}{4}.$$

□

7.3. Hexahedral meshing and local modifications

Mitchell [Mit96] gives some necessary conditions for meshing a domain with compatible hexes from an existing boundary quad mesh. This proposition gives another one.

Theorem 7.3.2. *The enclosed volume of a surface quad meshed with an even number of quads can be meshed with compatible hexes only if the number of vertices with 3 edges of that surface mesh is greater than or equal to 8.*

Proof. The second equation of the previous proposition gives

$$\sum_{j \geq 0} V_j^3 = 8 + \sum_{j \geq 0, k \geq 5} (k - 4) V_j^k.$$

Since $k - 4 > 0 \forall k \geq 5$, we have $\sum_{j \geq 0} V_j^3 \geq 8$. □

7.3.1 Elementary hex meshes local modifications

Considering a hex mesh, we want to modify it locally such that in some region we modify a sub-mesh without changing the boundary. We also wish to investigate the changes of parity (i.e., a transformation between two configurations, one with an even number of hexes and the other with an odd number). As this is not an easy problem, we consider first a simple case.

We want to deal with the simplest (in terms of connectivity between vertices) sub-domain (sub-mesh) with more than one hex of any mesh. A mesh with only 3 edges per vertex is reduced to only one hex, so the simplest mesh should have some vertices with more than 3 edges. That is why we've defined the *elementary hex mesh* and it implies some consequences.

Lemma 7.3.3. *The interior of an elementary hex mesh is a mesh (internal mesh) with at most one hex, one quad, one edge or one vertex.*

Proof. We suppose that the interior of an elementary hex mesh is a union of non connected (single) edges, vertices or faces. Then there is at least one boundary vertex sharing one edge with at least one single part of that interior, and one other edge with another boundary vertex or another single part of the interior of that elementary hex mesh. So that boundary vertex will have five edges which is not permitted. So, the interior of an elementary hex mesh has no single part; it is an *internal mesh* (1 dimension mesh, quad mesh or hex mesh).

If the interior of an elementary hex mesh is a mesh with more than one hex, there will be at least one boundary vertex of that internal mesh with four edges (a vertex shared by two hexes) plus the edge connecting that vertex to the boundary of that elementary hex mesh. This will give five edges, which is not admitted. If it has no hex but more

than one quad, each face of those quads should belong to at least two different hexes (one per side). So each vertex of the intersection of two of those quads will have at least five edges. This is not admitted. If there is more than two aligned vertices, three for example, there will be at least two internal faces around the middle vertex which should be coplanar. So there is no way to have hexes above and below those faces by adding only one edge to that middle vertex. \square

As each internal vertex has 4 edges, we have

$$4(\mathring{V} + V_0^4 + V_1^3) + 3V_0^3 = 2E.$$

Each internal vertex belongs to exactly 4 hexes and to 6 faces, each boundary vertex with no internal edge belongs to two hexes and to five faces, each boundary vertex with one internal edge belongs to 3 hexes and to six faces and each boundary vertex with only 3 edges belongs to only one hex and to 3 faces. So we have

$$4\mathring{V} + V_0^3 + 2V_0^4 + 3V_1^3 = 8P,$$

$$6\mathring{V} + 3V_0^3 + 5V_0^4 + 6V_1^3 = 4F.$$

Euler's and Cauchy's formulas (7.1),(7.2) give:

$$F - E + V - P = 1, \quad \bar{F} - \bar{E} + \bar{V} = 2.$$

Then

$$\mathring{F} - \mathring{E} + \mathring{V} - P = -1.$$

We can say that an elementary hex mesh is a solution of the following system

$$\left\{ \begin{array}{l} 2\mathring{F} + \bar{F} = 6P \\ \mathring{F} - \mathring{E} + \mathring{V} - P = -1 \\ 4(\mathring{V} + V_0^4 + V_1^3) + 3V_0^3 = 2E \\ 4\mathring{V} + V_0^3 + 2V_0^4 + 3V_1^3 = 8P \\ 6\mathring{V} + 3V_0^3 + 5V_0^4 + 6V_1^3 = 4F \\ V_0^3 + V_0^4 + V_1^3 = 2 + \bar{F}. \end{array} \right. \quad (7.6)$$

It solution satisfies

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathring{F} = 3P - \frac{\bar{F}}{2} \\ \mathring{V} = 2P + 1 - \frac{\bar{F} + V_1^3}{2} \\ \mathring{E} = 4P + 2 - \frac{2\bar{F} + V_1^3}{2} \\ V_0^4 = \bar{F} - 6 \\ V_0^3 = 8 - V_1^3, \end{array} \right. \quad (7.7)$$

7.3. Hexahedral meshing and local modifications

or

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathring{F} = \frac{6(\mathring{V} - 1) + \bar{F} + 3V_1^3}{4} \\ P = \frac{2(\mathring{V} - 1) + \bar{F} + V_1^3}{4} \\ \mathring{E} = 2\mathring{V} + \frac{V_1^3}{2} \\ V_0^4 = \bar{F} - 6 \\ V_0^3 = 8 - V_1^3. \end{array} \right. \quad (7.8)$$

Theorem 7.3.4.

1. *No elementary hex mesh with more than 7 hexes can be transformed into another elementary hex mesh without changing its boundary quads.*
2. *The parity of an elementary hex mesh can't be changed without modifying its boundary quads.*

Proof. Let us suppose that we have an elementary hex mesh_a that we want to transform into another elementary hex mesh_b with the same boundary quads.

The number of transformations of any elementary hex mesh is the sum of the number of different ways to connect the boundary of that mesh to its internal mesh, each way times the number of possible transformations of the interior of the internal mesh associated. This because if we modify the position of any boundary edge it will modify boundary quads. Thanks to the previous lemma, the interior of any internal mesh of an elementary hex mesh is empty (no vertex). So the number of transformations is only the number of different possibilities to connect the boundary of the elementary hex mesh to each of its possible internal mesh. Let us examine how to modify the connection between the boundary and the interior of an elementary hex mesh.

Of course we have that $V_0^4 = \bar{F} - 6$ as part of the solution of the system (7.6), any transformation will keep the number of V_0^4 constant. The only possible modifications that can change the connection between the boundary and the interior, is to interchange V_1^3 and V_0^3 . This means that any transformation will modify any boundary vertex of the first configuration (mesh_a) that has 3 edges to a boundary vertex of the second configuration (mesh_b) that has 3 boundary edges and one internal edge. If there is a boundary vertex that has 3 boundary edges not modified while the others are modified, the hexes that it belong to will not be transformed. So all the vertices that have 3 edges on the boundary will be modified by any transformation. Then there is at the most one possible transformation of the mesh_a into the mesh_b with the same boundary quads, which satisfies

$$\left\{ \begin{array}{l} V_{0a}^3 = V_{1b}^3 \\ V_{1a}^3 = V_{0b}^3 \end{array} \right. \quad (7.9)$$

or

$$\begin{cases} V_{0_a}^3 + V_{0_b}^3 = 8 \\ V_{1_a}^3 + V_{1_b}^3 = 8 \end{cases}$$

Thanks to the previous lemma any internal mesh has at most one hex, so $\mathring{V} \leq 8$.

Remark 7.3.5.

• $V_{1_a}^3$ is always even because the number of edges going from the internal mesh (previous lemma) to the boundary is always even and when a boundary vertex of the mesh a that has one internal edge is not connected to an internal vertex, it is connected to the same type of boundary vertex.

• Thanks to the solutions (7.8) of the system (7.6), we have

$$P_a - P_b = \frac{\mathring{V}_a - \mathring{V}_b + V_{1_a}^3 - 4}{2}.$$

This means that $\mathring{V}_a - \mathring{V}_b$ have the same parity because $V_{1_a}^3$ is always even.

Since \bar{F} is always even (by Theorem 7.2.1), let us look at the possible values of \mathring{V} in the solutions (7.7).

- If $\mathring{V}_a = 8$,
then $V_{1_a}^3 = 8$ (each internal vertex will have one boundary edge). $V_{0_a}^3 = 0$, $\mathring{V}_b = 0$, $P_a = 7$; one internal hex + six around its faces; since those 7 hexes have already 4 edges per vertex there is no way to add another one. In this case, we have $P_a - P_b = 6$, so $P_a + P_b = 8$.
- If $\mathring{V}_a = 4$,
those internal vertices form one face around which there are 6 hexes: one above, one below and four around the four edges. Since each internal vertex has four edges we will have $V_{1_a}^3 = 8$ and $V_{1_b}^3 = 0$. We have $V_{1_b}^3 = 0$ so $\mathring{V}_b = 0$. As there is no way to add another hex to the first six hexes, $P_a = 6$; we have $P_a - P_b = 4$ so $P_a + P_b = 8$.
- If $\mathring{V}_a = 2$,
each internal vertex has four edges. We will have $V_{1_a}^3 = 6$. Since \mathring{V}_a and \mathring{V}_b have the same parity, $\mathring{V}_b = 0$ or 2 ; the cases $\mathring{V} = 4$ and $\mathring{V} = 8$ have been examined above. If $\mathring{V}_b = 2$, then $V_{1_b}^3 = 6$ which is absurd because of system (7.9) and the fact that $V_{1_a}^3 = 6$. So $\mathring{V}_b = 0$ gives $P_a - P_b = 2$. For the same reasons as in the previous cases $P_a = 5$ (around 2 internal vertices there cannot be more or less than five hexes in an elementary hex mesh) then $P_a + P_b = 8$.

7.4. Flipping quad and hex meshes

- If $\mathring{V}_a = 1$
then $\mathring{V}_b = 1$ (parity of both internal vertices); $V_{1a}^3 = V_{1b}^3 = 4$, $P_a = 4$, $P_a - P_b = 0$. With one internal edge, there is no way to have more or less than four hexes in an elementary hex mesh; so $P_a + P_b = 8$.
- If $\mathring{V}_a = 0$,
We will examine only the case $\mathring{V}_b = 0$ because the other cases are contained in the previous ones. Let us examine the number of V_{1a}^3 :
 - If $V_{1a}^3 = 0$ we have $P_a - P_b = -2$, $V_{1b}^3 = 8$ and $\mathring{E}_b = 4$ (see (7.8)). So $P_b = 5$ (around four internal edges there cannot be more or less than five hexes in an elementary hex mesh), so $P_a + P_b = 8$.
 - If $V_{1a}^3 = 2$,
Then $P_a - P_b = -1$, $V_{1b}^3 = 6$, $\mathring{E}_a = 1$ and $\mathring{E}_b = 3$ (see (7.8)) so $P_a = 3$. With one internal edge, we have at least 3 internal faces and 3 hexes. Each hex has four V_0^4 (two with each of the other hexes) and the two V_1^3 , then we can't have four V_0^3 on the same hex. This means that there is no way to add another hex (you can extend an elementary hex mesh by adding a hex to its boundary if and only if there is at least four V_0^3 on the same boundary's face). As $P_a - P_b = -1$ we have $P_b = 4$ which is absurd because $\mathring{E}_b = 3$ with $\mathring{V}_b = 0$.
 - If $V_{1a}^3 = 4$,
then $P_a - P_b = 0$, $\mathring{E}_a = 2$. There is no way to have $P_a \neq 4$ because of two internal edges. So once more $P_a + P_b = 8$.
 - The cases $V_{1a}^3 = 6$ or 8 correspond to $V_{1b}^3 = 2$ or 0 . They were already examined for V_{1a}^3 .

Finally, in an elementary hex mesh transformation into another elementary hex mesh with the boundary unchanged,

$$P_a + P_b = 8.$$

□

7.4 Flipping quad and hex meshes

For Hexahedral and quadrilateral meshes, Bern and Eppstein's operations described in [BEE02] as *flipping* for Hexahedral meshes and which are the extension in 3D of some of the quad refinement operations of Canann, Muthukrishnan and Phillips [CMP98] (figure 7.2), can be use to modify locally hexes inside a mesh (figure 7.1). One property suggested in [BEE02] for 2D flipping is that together with the parity-changing operation, it should form a complete set. Here we show that those flipping operations for quad or hex meshes are not linked.

7.4.1 Definition

Consider the well-known *flip* transformation for a triangular mesh, which switches one diagonal for the other in a convex quadrilateral Q formed by two triangular elements sharing a side. We can think of this 2-2 flip (two elements in and two elements out) as exchanging the upper and lower facets of a three-dimensional simplex P that projects to Q .

The almost-as-well-known flips for tetrahedral meshes can be defined analogously by the exchange of the upper and lower facets of a four-dimensional simplex. The flips include the 2-3 flip, which exchanges two tetrahedra sharing a face for three sharing an edge, and the 1-4 flip which subdivides a tetrahedron by adding an interior vertex, along with their reverse flips.

This view of flipping extends to quad and hex meshes. The flips for quad meshes are induced by the combinatorially distinct exchanges of upper and lower facets of a three-dimensional cuboid, as shown in Figure 7.2, and the flips for hexahedral meshes are induced by the combinatorially distinct exchanges of upper and lower facets of a four-dimensional hypercube, as shown in Figure 7.1.

The facets of a d -dimensional cube or hypercube can be grouped into d opposite pairs. In order to discover all possible flips, we describe any set of facets of a cube or hypercube by how it relates to these pairs. To any set S of cube or hypercube facets, we assign a pair of integers (X, Y) , where X denotes the number of pairs of facets excluded from S , and Y denotes the number of pairs of facets included in S . The remaining $d - X - Y$ pairs of facets have one of their two facets included in S , and the other facet excluded from S . The symmetries of the hypercube include all permutations of opposite pairs of facets, and all swaps of the two facets in each pair, so any two sets S described by the same pair (X, Y) are combinatorially equivalent.

The meshes in figures 7.2 and 7.1 are labeled by these pairs of numbers. If a set S is represented by a pair (X, Y) , the complementary set is represented by pair (Y, X) . So, a flip can be described as the replacement of a set of mesh cells combinatorially equivalent to the set (X, Y) by a different set of cells combinatorially equivalent to (Y, X) . In order to find all possible flips, it remains only to determine which pairs (X, Y) form topological disks.

Theorem 7.4.1. [JKL⁺07]

Each set of flipping transformations [BEE02] represented in figures 7.2 and 7.1 is topologically free; i.e., you can't go from one configuration to the other in a transformation using a combination of other transformations in a topological or geometrical mesh.

Proof. The dual theory of mesh transformations and its sheet diagrams projections (see figure 7.3), [MH98], [TK02],[BEE02] are more useful in this context, but it is not easy to use them in this case for relationships between different flipping operations. Our way is more algebraic.

Considering the number of new internal edges without a boundary vertex n_e , internal vertices n_v , internal faces without any boundary edge n_f , hexes n_h in 3D and quads

7.4. Flipping quad and hex meshes

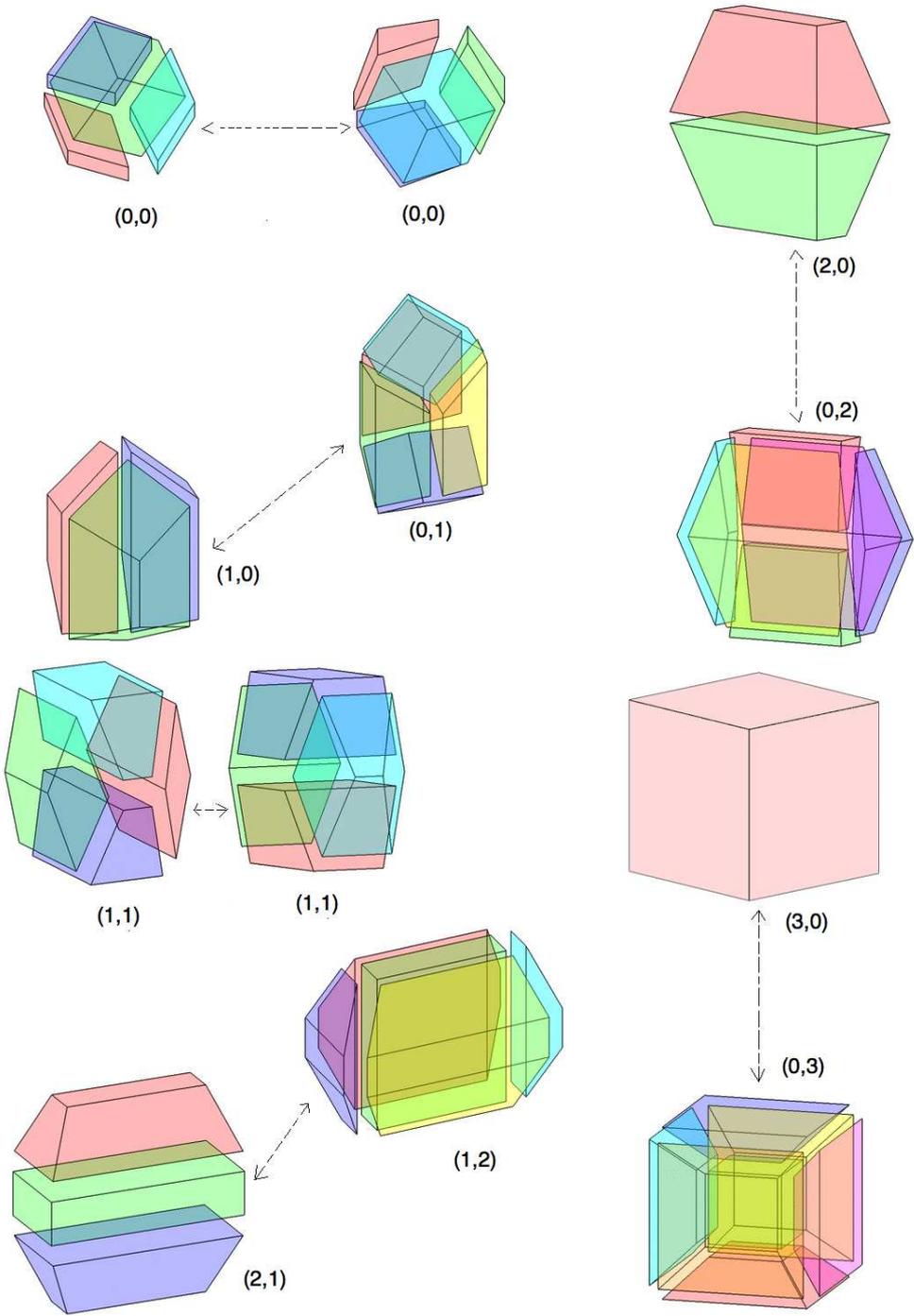


Figure 7.1: The Flips for hex meshes

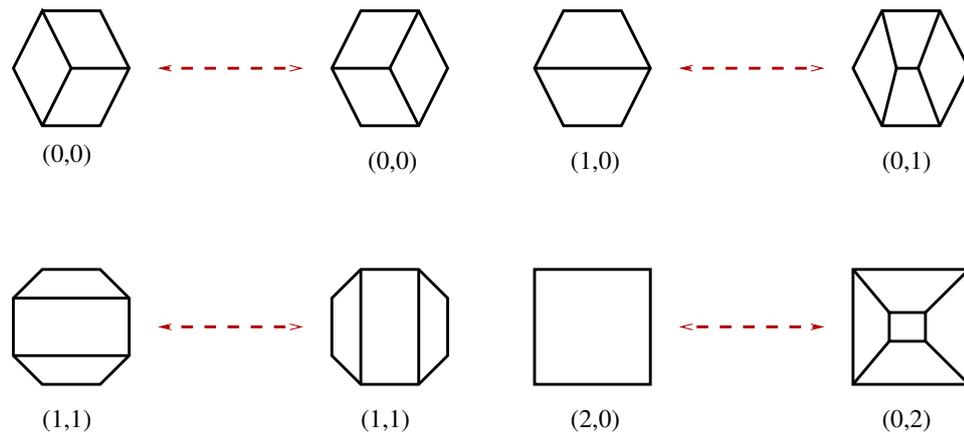


Figure 7.2: The Flips for quad meshes

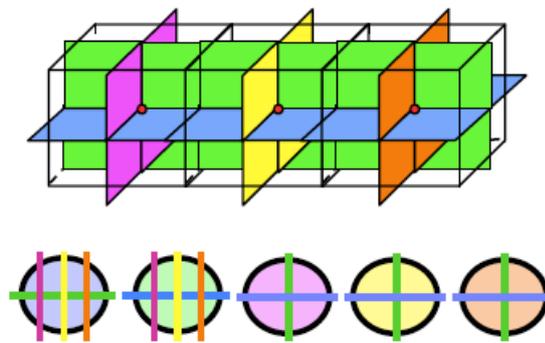


Figure 7.3: Hex mesh with three elements (top); dual surfaces (sheets) and dual vertices shown. Two dimensional projection into "sheet diagrams" shown below.

n_q in 2D created or removed within each transformation, we model them as follows:

$$\begin{aligned}
 (0, 0) &\longleftrightarrow (0, 0) &\implies &\pm (0_h, 0_f, 0_e, 0_v) \\
 (1, 1) &\longleftrightarrow (1, 1) &\implies &\pm (0_h, 0_f, 0_e, 0_v) \\
 (1, 0) &\longleftrightarrow (0, 1) &\implies &\pm (2_h, 0_f, 1_e, 2_v) \\
 (2, 0) &\longleftrightarrow (0, 2) &\implies &\pm (4_h, 1_f, 4_e, 4_v) \\
 (3, 0) &\longleftrightarrow (0, 3) &\implies &\pm (6_h, 6_f, 12_e, 8_v) \\
 (2, 1) &\longleftrightarrow (1, 2) &\implies &\pm (2_h, 0_f, 0_e, 0_v) \quad \text{in 3D,}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 (0, 0) &\longleftrightarrow (0, 0) &\implies &\pm (0_q, 0_e, 0_v) \\
 (1, 1) &\longleftrightarrow (1, 1) &\implies &\pm (0_q, 0_e, 0_v) \\
 (1, 0) &\longleftrightarrow (0, 1) &\implies &\pm (2_q, 1_e, 2_v) \\
 (2, 0) &\longleftrightarrow (0, 2) &\implies &\pm (4_q, 4_e, 4_v) \quad \text{in 2D.}
 \end{aligned}$$

7.4. Flipping quad and hex meshes

So if each set of flipping operations is not free, we can write one of the right hand side of the previous relationships as a linear combination of some others with coefficients in \mathbb{Z} . Let us look at these operations except $(0, 0) \longleftrightarrow (0, 0)$ and $(1, 1) \longleftrightarrow (1, 1)$ because those change nothing numerically; we have to solve the following equations in \mathbb{Z} for each of the unknowns fixed at 1 or -1 (for example $x = 1$ means that you are going from the $(1, 0)$ to the $(0, 1)$ configuration and $x = -1$ is for the $(0, 1)$ to the $(1, 0)$ configuration). We obtain

$$\begin{cases} x + 2y + 3z + t = 0 \\ y + 6z = 0 \\ x + 4y + 12z = 0 \\ x + 2y + 4z = 0 \end{cases} \quad (7.10)$$

for the hexes flipping, and

$$\begin{cases} x + 2y = 0 \\ x + 4y = 0 \end{cases} \quad (7.11)$$

for the quads flipping.

For these two systems, $x = y = z = t = 0$ is the only solution. So there is no linear combination with those transformations. Then each set of operations without $(0, 0) \longleftrightarrow (0, 0)$ and $(1, 1) \longleftrightarrow (1, 1)$ is free. If we add the two other operation, it will not change the equations, nor their solutions. The possible solutions of those systems could have been considered as result of one of the two previous operations when combining all the others, so we can conclude that each set of flipping transformations is topologically free. \square

Theorem 7.4.2. (*existence of elementary mesh transformations*)

The set of hexahedral flipping operations [BEE02] figure 7.1 form the set of transformations that keep unchanged the boundary of any mesh in the subset of elementary hex meshes.

Proof. As the Theorem 7.3.4 says that any elementary mesh transformation needs at most 7 hexes and the sum of the hexes of the two configuration of the transformation is always 8, this is the case with all the operations of the set of hex flipping. Let us examine what happens for each number P of hexes between 1 and 7:

- If $P = 1$ we have only one possibility, $\bar{F} = 6$ and it gives the $(3, 0) \longleftrightarrow (0, 3)$ flipping transformation.
- If $P = 2$ we have only one possibility, $\bar{F} = 10$ and it gives the $(2, 0) \longleftrightarrow (0, 2)$ flipping transformation.

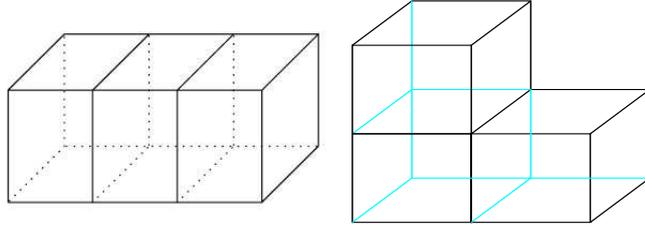


Figure 7.4: some 3 hexes configurations

- If $P = 3$ we have two possibilities:
 1. $\bar{F} = 12$ and it gives the $(1, 0) \longleftrightarrow (0, 1)$ flipping transformation.
 2. $\bar{F} = 14$ for the left configuration of the previous figure, there is no possible transformation without having five edge on a boundary vertex. But numerically, the solution of system (7.6) gives

$$P_b = 5, \quad \mathring{F}_b = 8, \quad \mathring{V}_b = 0, \quad \mathring{E}_b = 4$$

which corresponds to the $(2, 1) \longleftrightarrow (1, 2)$ flipping transformation.

- If $P = 4$, we have $\bar{F} \leq 18$:
 1. If $\bar{F} = 18$, the four hexes should be aligned, the solution of system (7.6) tell us that the second configuration has a negative number of internal edges, so there is no possible transformation.
 2. If $\bar{F} = 16$, we will have $\mathring{V} = 1 - \frac{V_1^3}{2}$. It means that $\mathring{V} = 0$ or 2 any way \mathring{V} will be negative in one of the two configurations, so there is no solution.
 3. If $\bar{F} = 14$, we obtain the $(1, 1) \longleftrightarrow (1, 1)$.
 4. If $\bar{F} = 12$, we obtain the $(0, 0) \longleftrightarrow (0, 0)$.
 5. If $\bar{F} \leq 10$, we will have $\mathring{F} \geq 7$. But a mesh with 4 hexes could not have more than 6 internal faces, so there is no solution.
- If $P = 5$ we have $\bar{F} \leq 22$:
 1. if $22 \leq \bar{F} \leq 16$, there is one configuration where \mathring{V} is negative.
 2. For the case 14 and 12, it corresponds to the solutions obtained with $P = 3$.
 3. As a mesh with 5 hexes couldn't have less than 10 boundary faces, if $\bar{F} = 10$ the second configuration will have 3 hexes with 10 boundary faces which is not realizable.
- If $P = 6$, we have $\bar{F} \leq 26$:

7.5. Some new hex mesh local modifications

1. If $26 \leq \bar{F} \leq 12$ there is one configuration where \dot{V} is negative.
 2. For the case $\bar{F} = 10$, it corresponds to the solution obtained with $P = 2$.
 3. If $\bar{F} < 10$ the second configuration will have 2 hexes with less than 10 boundary faces which is not realizable.
- If $P = 7$, we have $\bar{F} \leq 30$:
 1. If $30 \leq \bar{F} \leq 8$, there is one configuration where \dot{V} is negative.
 2. For the case 6, it corresponds to the solution obtained with $P = 1$.

So apart from the set of hex flips, there is no other transformation of an elementary hex mesh into another elementary hex mesh that keeps the boundary unchanged. \square

7.5 Some new hex mesh local modifications

We have previously observed that there is no other local hex transformation with an elementary hex mesh. So we are trying here to see what happens on a general hex mesh. Let us call $M_{e/v}$ -hex mesh a hex mesh where the maximal number of edges per vertex is M .

We tried to build local hex transformations for a $5_{e/v}$ -hex mesh and obtained four basic transformations: See figure 7.5, where (x, y) denotes x the number of boundary faces and y the number of hexes. Those mesh files in medit [Fre] format, are available at <http://www.ann.jussieu.fr/~kuate/meshes.html>

These basic transformations can be extended by adding k layers of suitable hexes, $k \in \mathbb{N}$, between the group of hexes on each side of those transformations (figure 7.6).

Theorem 7.5.1. *For each fixed value of k , $k \in \mathbb{N}$, the set of four transformations obtained by adding k layers of suitable hexes on each configuration of the four basic $5_{e/v}$ -hex meshes local transformations (figure 7.6), is topologically free.*

Proof. The same reasoning done in Theorem 7.4.1 gives the result. \square

Open problem What relationship between dividing a hex in two topological hexes without changing its boundary and the problem of parity changing ?
The most simple operation for the parity changing is to divide an element in two without changing its boundary topology.

When we divide a quad in two, figure 7.8 left; we obtain a topological quad that have the same vertex connectivity as a geometrical quad; so when keeping the same number of topological quads in the mesh, it is possible to obtain a geometrical mesh, figure 7.7; using untangling algorithms [VGS04].

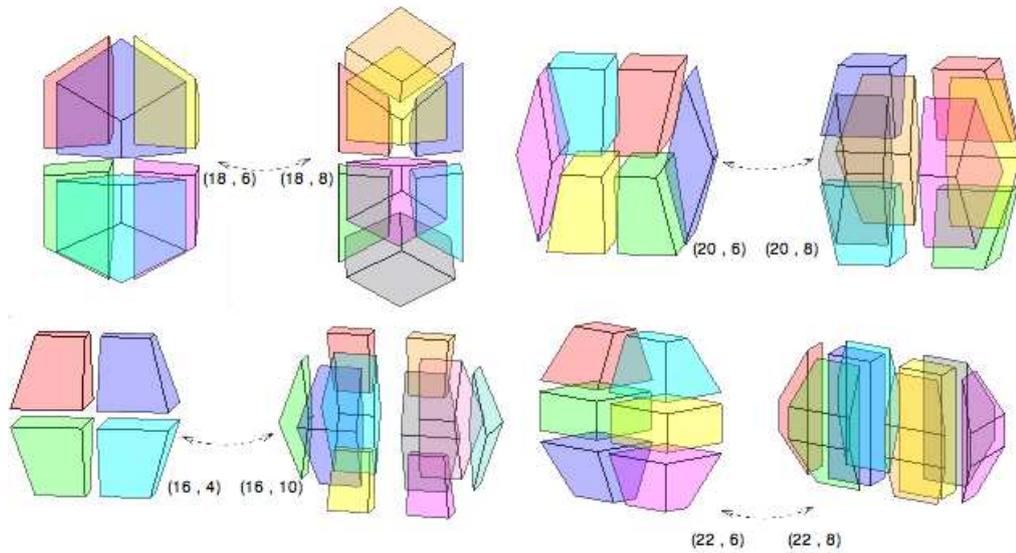


Figure 7.5: Some basic $5_{e/v}$ -hex meshes local transformations

In the case of a hex, figure 7.8 right; we observe that there is one hex that does not have the connectivity of a geometrical hex on all its vertices, even if its faces are topologically correct. The most simple subdivision that is topological correct is to divide a hex by tree figure 7.9, but it does not change the parity. So does this have some consequences on the problem of parity changing for hex meshes?

7.6 Conclusion

We have described some properties of local transformations on quad meshes and essentially of the hex flipping transformations of Bern et. al. [BEE02], from a geometrical and combinatorial point of view. This view allow us to propose a new set of basic local transformations for hexahedral meshes. We find that the sum of the number of hexes on both sides of each existing hexahedral local transformation equals $2 + 6k$, $k \in \mathbb{N}$, $k = 1$ corresponds to the set of Bern et. al. and $k \geq 2$ to ours. Then all those geometrical transformations cannot change the parity of the mesh. It would be interesting to prove that the previous relationship is the only one that is possible to have on any geometrical hex mesh with less than 6 edges per vertex. Therefore the problem of parity changing on a geometrical hex mesh in more complicated situations (some vertices should have more than 5 edges) may be considered.

7.6. Conclusion

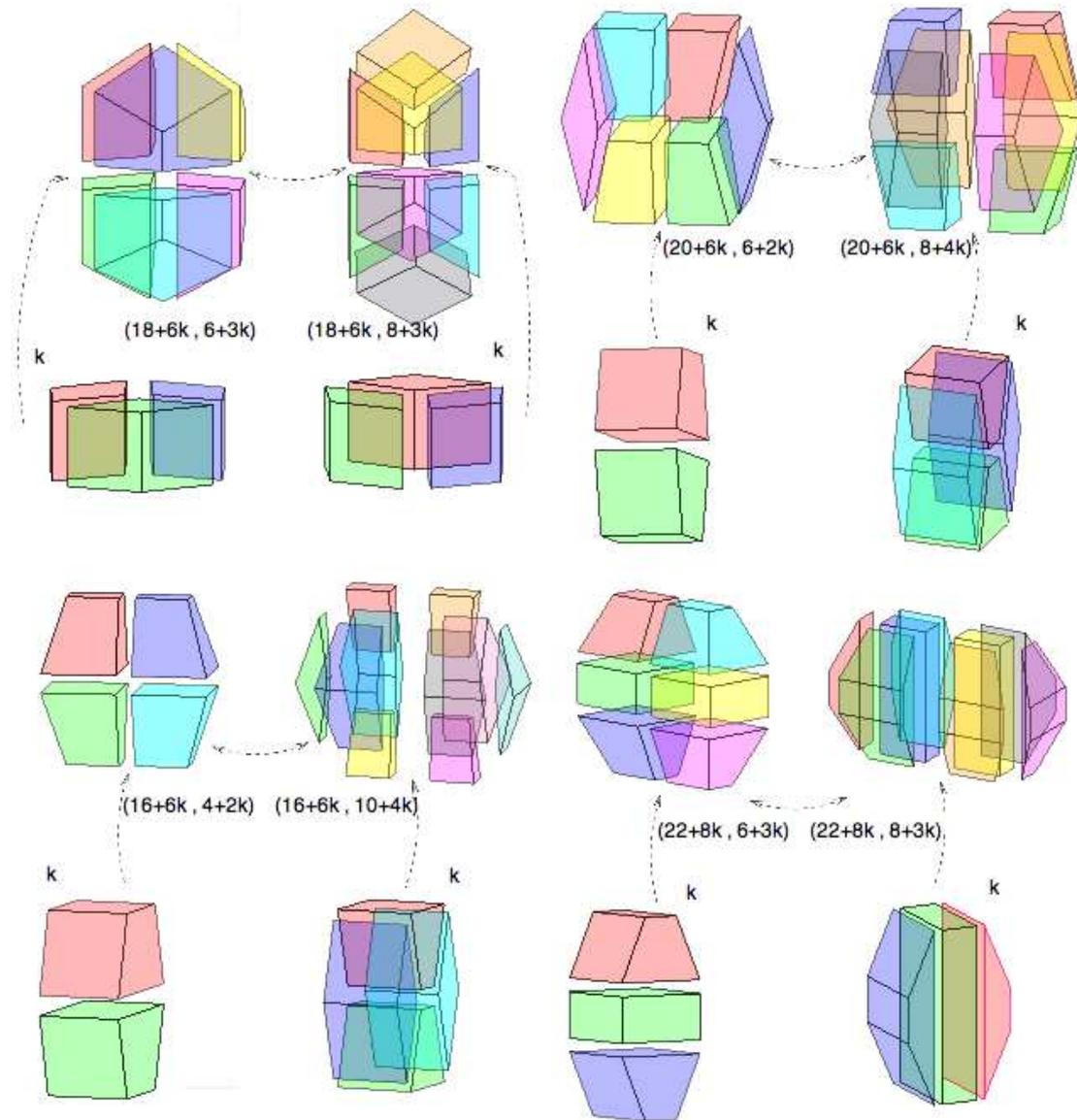


Figure 7.6: Some $5_{e/v}$ -hex meshes local transformations, $k \in \mathbb{N}$

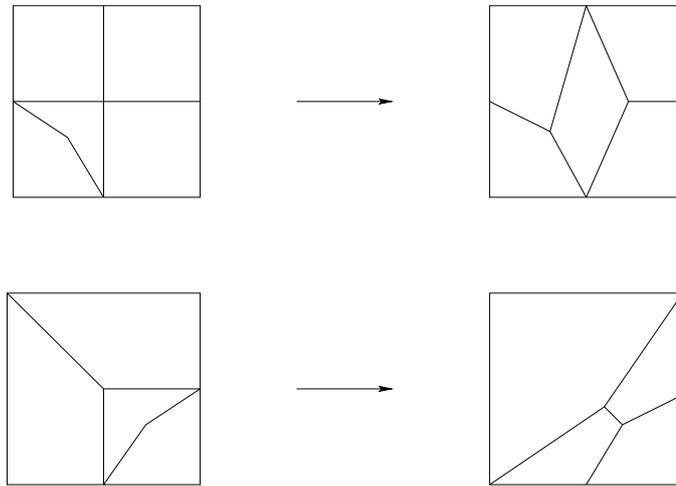


Figure 7.7: Untangling of mesh by edges permutation with node placement.

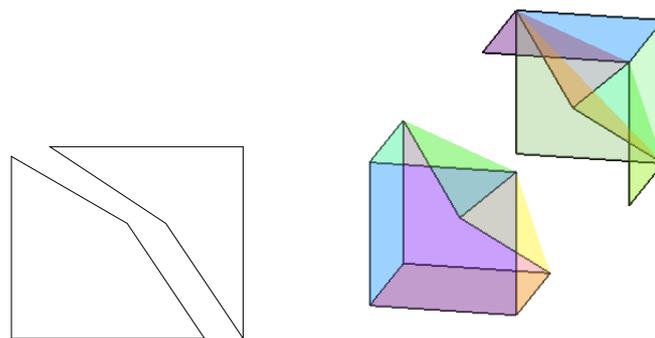


Figure 7.8: A quad and a hex divided in two with their boundary unchanged

7.6. Conclusion

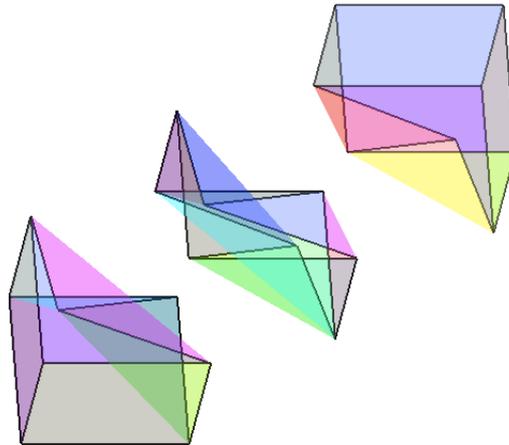


Figure 7.9: A hex divided in tree topological hexes with its boundary unchanged

We thank the reviewers for their comments which helped to improve the quality of this paper. We thank Paulo Amorim who helped us. We also thank the CEMRACS 2007 and its organizing committee P. Frey et. al. who were at the origin of this collaboration between Laboratoire Jacques-Louis Lions and Sandia National Laboratories, which produced this work.

Conclusion et perspectives

Les problèmes abordés au cours de cette thèse comportent deux axes :

- les métriques et estimateurs d'erreur,
- les modifications locales de maillages hexaédriques.

Métriques et estimateurs d'erreur

Dans cette première partie consacrée aux métriques et estimateurs d'erreur, nous nous sommes intéressés à trois questions :

- la reconstruction d'une approximation de la matrice hessienne et des dérivées troisièmes,
- la génération de métrique pour une estimation d'erreur locale donnée,
- l'estimation d'erreur d'interpolation.

Approximation de la matrice hessienne

S'agissant de l'approximation de la matrice hessienne, des résultats de stabilité des méthodes des moindres carrés et d'approximation P_2 induits par la linéarité de ces opérations ont été établis.

La consistance de la méthode des moindres carrés sur des maillages homothétiques a été montrée et il reste à l'établir dans un cadre général. Nous avons proposé une condition de consistance de la méthode d'approximation P_2 , ainsi qu'une variante consistante de celle-ci. Cette variante est obtenue en ramenant l'étude à un problème d'interpolation polynomiale pour lequel on dispose de résultats dans la littérature.

Nous avons montré que l'approximation de la matrice hessienne par la méthode basée sur la formule de Green approchait la *valeur moyenne* de la matrice hessienne pour des polynômes tests de degré deux ou supérieur. Des contre-exemples dans la littérature ont montré la non consistance de cette méthode. Il serait intéressant de trouver une variante "satisfaisante" de cette méthode étant donné que les outils dont on se sert dans ce cas sont en général disponibles dans un code éléments finis.

Il a ensuite été proposé une nouvelle approche combinant l'interpolation polynomiale et un schéma aux différences finies dont les propriétés de consistance et de stabilité dépendent de l'opérateur d'interpolation utilisé. L'interpolation de Lagrange de

degré supérieur ou égal à deux est satisfaisante pour cette approche.

D'un point de vue numérique, des tests ont été effectués essentiellement en dimension 2 pour les méthodes d'approximation par moindres carrés et notre nouvelle approche. On a pu constater que la méthode d'interpolation et différences finies était plus précise que celle des moindres carrés, pour les normes L^∞ et L^2 lorsque les valeurs de la fonction sont prises aux sommets du maillage et aux milieux des arêtes.

Lorsque la fonction est restreinte à son interpolée linéaire sur chaque triangle, la méthode des moindres carrés est consistante quand les valeurs sont prises aux sommets des triangles. La prise en plus des valeurs de la fonction aux milieux des arêtes rend l'approximation divergente, tout comme la méthode d'interpolation et différences finies locales dans ce cas. Ces observations ont été confirmées en adaptation de maillage sur des exemples faits avec le logiciel *freefem++*.

En dimension trois d'espace, la même tendance a été observée sur quelques tests. Mais une étude comparée plus poussée de ces différentes techniques de reconstruction serait intéressante en dimension 3, dans des cas de très fortes anisotropies.

Génération de métrique pour une erreur locale donnée

Dans ce chapitre, nous avons proposé un moyen algorithmique de construire une métrique connaissant localement l'erreur sous forme de courbe fermée, par optimisation de l'aire d'une ellipse contenue dans cette courbe fermée.

Ce travail a été motivé par le besoin de faire de l'adaptation de maillage anisotrope en se servant des dérivées troisièmes comme estimateur d'erreur d'interpolation, dans le cadre d'une résolution P_2 éléments finis d'une EDP.

Les tests effectués notamment avec *freefem++* ont donné des résultats "satisfaisants". Sur des exemples, on a pu constater une amélioration du rendu de l'adaptation de maillage en se servant des dérivées d'ordre supérieur comme estimateur d'erreur d'interpolation. Il reste à rendre son utilité effective pour les différentes formes d'estimation d'erreur existantes. On pourrait aussi étudier la représentation locale d'autres types d'estimateurs d'erreur de façon à pouvoir se servir de cet algorithme ou alors l'adapter à l'expression locale de ces estimateurs.

Approximation de dérivées troisièmes

Des observations ont été faites sur l'amélioration de l'adaptation de maillage apporté par l'utilisation des dérivées d'ordre supérieur comme estimateur d'erreur d'interpolation. Il s'est donc posé la question de l'approximation des dérivées troisièmes. Pour y répondre, nous avons étudié la reconstruction de dérivées troisièmes par la méthode des moindres carrés.

On a pu constater que cette technique était moins stable dans ce cas par rapport à la reconstruction de la matrice hessienne, pour les mêmes ordres de grandeur du pas

de maillage. Malgré cela les résultats obtenus en adaptation de maillage en se servant de dérivées troisièmes comme estimateur d'erreur d'interpolation se sont révélés plus précis qu'avec l'utilisation de la matrice hessienne.

Des stratégies d'amélioration de la précision des calculs, ou d'autres techniques plus précises restent à développer.

Estimation d'erreur d'interpolation

Nous avons proposé une ré-écriture de l'estimation d'erreur d'interpolation de Lagrange en norme L^∞ sur un simplexe, à partir d'un développement de Taylor à l'ordre trois en ne faisant pas apparaître explicitement les dérivées troisièmes.

Cette nouvelle expression de l'estimation d'erreur d'interpolation serait utile pour de l'interpolation éléments finis P_2 . Elle améliorera sans doute les calculs dans le cas P_1 par rapport à l'estimation basée sur le développement de Taylor à l'ordre deux. Certes la constante apparaissant dans la majoration pourrait être optimisée en examinant les cas où l'erreur maximale est atteinte sur une arête ou à l'intérieur du simplexe, en dimension deux ou en dimension trois. Cependant, sa mise en oeuvre numérique reste à faire. Les tests numériques nous permettront sans doute d'apprécier son efficacité. On pourra ainsi mesurer son apport quant-à l'amélioration du résultat donné par le calcul des dérivées troisièmes avec la méthode des moindres carrés.

Remaillage hexaédrique local

Dans cette seconde partie, nous avons examiné le problème du raffinement et dé-raffinement local de maillages hexaédriques.

Il en ressort que pour le cas quadrangulaire, rajouter ou supprimer localement des quadrilatères dans un maillage (à frontière inchangée) revient à rajouter ou supprimer exactement le même de noeuds que de quadrilatères souhaités et remailler. On a observé entre autres que tout volume maillé en hexaèdres avait nécessairement sur sa frontière au moins les huit sommets d'un cube (sommets ayant exactement trois arêtes).

Notre étude a montré que les opérations existantes définies par Bern, Eppstein et Erikson sont les seules transformations géométriques locales possibles de maillages hexaédriques *élémentaires*. Les nouvelles opérations de transformation locale que nous avons proposées ainsi que celles existantes vérifient une relation algébrique (conjecture) qui ne permet pas de changer la parité d'un maillage hexaédrique contrairement au cas quadrangulaire. Une preuve générale de cette conjecture permettrait de clore le problème du changement de parité des maillages hexaédriques géométriques.

L'étude les procédés de *régularisation* des maillages hexaédriques topologiques en maillages géométriques permettrait non seulement d'enrichir l'ensemble des opérations géométriques locales possibles mais aussi de clarifier la question du changement de parité.

Conclusion et perspectives

D'un point de vue informatique, l'utilisation des opérations de modification géométrique locale n'est pas aisée.

Un code permettant de localiser un sous domaine d'un maillage hexaédrique compatible et y appliquer une des opérations de modification géométrique locale de manière automatique aurait certainement un intérêt pratique.

Table des figures

1.1	Schéma classique d'adaptation de maillage : \mathcal{T}_i^0 le maillage initial à l'itération i , \mathcal{S} la solution, \mathcal{S}^0 la solution initiale et \mathcal{M} la métrique. . . .	13
2.1	Grille locale au noeud x_n	29
2.2	31
2.3	Les erreurs en 2D : à gauche en norme L^∞ , à droite en norme L^2	32
2.4	33
2.5	46
2.6	Maillage adapté, matrice Solution exacte. hes- sienne approchée par la formule de Green.	47
2.7	Maillages adaptés, matrice hessienne approchée : à gauche par moindres carrés, à droite par la nouvelle méthode.	47
3.1	Parameters	58
3.2	An ellipse of parameters $\theta = \frac{\pi}{4}$, $\alpha = 3$, $\beta = 2$, $n = 159$; left: $\epsilon_0 = 10^{-1}$; right: $\epsilon_0 = 10^{-4}$	61
3.3	left: $\mathcal{E} = 59$, $\epsilon_0 \text{ opt.} = 10^{-5}$, $n = 285$, $F(x, y) = -0.2y^3x^2 - yx^4 + 0.2y^3 - 9x^3 - 0.5xy^2 + 0.005x^2 - 0.1y^2$, right: $F(x, y) = 0.05x^2 - 0.01y^2 + 0.05xy$, $\mathcal{E} = 1$, $\epsilon_0 \text{ opt.} = 0.001$, $n = 304$	62
3.4	$\mathcal{E} = 1$; $F(x, y) = 0.5x^2 + 0.5y^2 + 2xy$; left: $n = 228$; right: $n = 288$	63
3.5	$\mathcal{E} = 1$; $n = 234$ $F(x, y) = x^2 + y^2 - 2xy$	63
3.6	The effect of the number n of points used to discretize the local error curve on the adapted meshes. Top left: $n = 50$, top right $n = 80$, down left $n = 100$, down right $n = 150$	66
3.7	Adapted meshes for the same maximal error level around 10^{-3} , cc=1, coef=10. Left: metrics computed with this algorithm for the (3.5) error estimator. Right: method based on the hessian.	67
3.8	67
3.9	Adapted meshes for the maximal error level around 10^{-5} , cc=10, coef=10, method based on the hessian.	68
3.10	Adapted meshes for the maximal error level around 10^{-5} , cc=10, coef=10, metrics computed with this algorithm for the (3.5) error estimator, using the third derivatives.	69

Table des figures

3.11	Adapted meshes. $cc=10$, $coef=10$, metrics computed with this algorithm for the (3.5) error estimator, using the fourth derivatives.	70
4.1	Maillages adaptés en utilisant les dérivées troisièmes approchées par moindres carrés avec valeurs prises aux sommets et iso-valeurs de l'erreur	85
4.2	Maillages adaptés en utilisant les dérivées troisièmes exactes et iso-valeurs de l'erreur.	85
4.3	Maillages adaptés en utilisant les dérivées troisièmes approchées avec valeurs prises aux sommets et aux milieux des arêtes et iso-valeurs de l'erreur.	86
4.4	Maillages adaptés en utilisant les dérivées troisièmes avec valeurs prises aux sommets et aux milieux des arêtes pour l'interpolée linéaire de la fonction et iso-valeurs de l'erreur	86
5.1	92
5.2	maillage de triangles équilatéraux	96
5.3	96
5.4	Découpage d'un cube en tétraèdres isométriques.	97
5.5	103
6.1	A) : Maillages adaptés avec résolution par EF P_1 à la seconde itération. A gauche métriques calculées par l'algorithme. A droite métrique donnée par la <i>valeur absolue</i> de la matrice hessienne.	109
6.2	A) : Maillages adaptés avec résolution par EF P_2 à la seconde itération. A gauche métriques calculées par l'algorithme. A droite métrique donnée par la <i>valeur absolue</i> de la matrice hessienne.	109
6.3	A) : Maillages adaptés avec résolution par EF P_1 et valeurs de la fonction prises aux sommets et aux milieux des arêtes. A gauche la première itération, à droite la troisième itération.	110
6.4	B) : Maillages adaptés avec résolution par EF P_1 . A gauche la première itération, à droite la troisième itération.	111
6.5	B) : Maillages adaptés avec résolution par EF P_2 . A gauche la première itération, à droite la troisième itération.	111
6.6	C) : Maillages adaptés avec résolution par EF P_1 . A gauche la première itération, à droite la troisième itération.	112
6.7	C) : Maillages adaptés avec résolution par EF P_2 . A gauche la première itération, à droite la troisième itération.	113
6.8	Maillages adaptés avec résolution par EF P_1 . A gauche la première itération, à droite la troisième itération.	114
6.9	Maillages adaptés avec résolution par EF P_2 . A gauche la première itération, à droite la troisième itération.	114

Table des figures

6.10	A) Zoom sur les maillages adaptés : à gauche métriques générées à partir de la matrice hessienne, à droite à partir des dérivées troisièmes. Valeurs de la fonction prises aux sommets des triangles et aux milieux des arêtes.	115
6.11	A) Zoom sur les maillages adaptés : à gauche métriques générées à partir de la matrice hessienne, à droite à partir des dérivées troisièmes. Valeurs de la fonction prise aux sommets des triangles.	116
6.12	B) Zoom sur les maillages adaptés : A gauche valeurs prises aux sommets des triangles. A droite valeurs prises aux sommets des triangles et aux milieux des arêtes.	116
7.1	The Flips for hex meshes	135
7.2	The Flips for quad meshes	136
7.3	Hex mesh with three elements (top); dual surfaces (sheets) and dual vertices shown. Two dimensional projection into "sheet diagrams" shown below.	136
7.4	some 3 hexes configurations	138
7.5	Some basic $5_{e/v}$ -hex meshes local transformations	140
7.6	Some $5_{e/v}$ -hex meshes local transformations, $k \in \mathbb{N}$	141
7.7	Untangling of mesh by edges permutation with node placement.	142
7.8	A quad and a hex divided in two with their boundary unchanged	142
7.9	A hex divided in tree topological hexes with its boundary unchanged	143

Bibliographie

- [ADF06] Frédéric Alauzet, Alain Dervieux, and Pascal Frey. Multi-dimensional continuous metric for mesh adaptation. In *15th International Meshing Roundtable*, pages 191–213, sept 2006.
- [AF03] Frédéric Alauzet and Pascal J. Frey. Estimateur d’erreur géométrique et métriques anisotropes pour l’adaptation de maillage. *Projet Gamma I.N.R.I.A.*, Rapport de recherche n°4759, mars 2003.
- [Ala03] Frédéric Alauzet. *Adaptation de maillage anisotrope en trois dimensions. Application aux simulations instationnaires en mécanique des fluides*. PhD thesis, université de Montpellier II, oct 2003.
- [BB98] G. Blind and R. Blind. The almost simple cubical polytopes. *Discrete Math.*, 184 :25–48, 1998.
- [BEE02] Marshall Bern, David Eppstein, and Jeff Erickson. Flipping cubical meshes. *ACM Computer Science Archive* <http://arXiv.org/abs/cs/0108020>, 2002.
- [Ber90] Marcel Berger. *Géométrie Tome I*. Nathan Paris, Berlin, 1990.
- [BMR04] Christine Bernardi, Yvon Maday, and Francesca Rapetti. *Discrétisations variationnelles de problèmes aux limites elliptiques*, volume 45 of *Mathématiques & Applications (Berlin) [Mathematics & Applications]*. Springer-Verlag, Berlin, 2004.
- [BMV93] C. Bernadi, B. Métivet, and R. Verfürth. Analyse numérique d’indicateurs d’erreur. *Rapport EDF n° HI-72/93/062*, 1993.
- [BY95] Jean-Daniel Boissonnat and Mariette Yvinec. *Géométrie Algorithmique*. Ediscience International, 1995.
- [Cao05] Weiming Cao. On the error of linear interpolation and the orientation, aspect ratio, and internal angles of a triangle. *SIAM J. Numer. Anal.*, 43(1) :19–40 (electronic), 2005.
- [Cia02] Philippe G. Ciarlet. *The finite element method for elliptic problems*, volume 40 of *Classics in Applied Mathematics*. Society for Industrial and Applied Mathematics (SIAM), Philadelphia, PA, 2002. Reprint of the 1978 original [North-Holland, Amsterdam ; MR0520174 (58 #25001)].

- [CL91] P. G. Ciarlet and J.-L. Lions, editors. *Handbook of numerical analysis. Vol. II.* Handbook of Numerical Analysis, II. North-Holland, Amsterdam, 1991. Finite element methods. Part 1.
- [CMP98] S.A. Canann, S.N. Muthukrishann, and R.K. Phillips. Topological refinement procedures for quadrilateral finite element meshes. *Engineering with Computers*, 12 :168–177, 1998.
- [CR72] P.G. Ciarlet and P.A. Raviart. General lagrange and hermite interpolation in \mathbb{R}^n with applications to finite elements methods. *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, 46(3) :177–199, January 1972.
- [CW71] P.G. Ciarlet and C. Wagschal. Multipoint taylor formulas and applications to the finite element method. *Numer. Math*, 17 :84–100, 1971.
- [Die60] J. Dieudonné. *Foundations of Modern Analysis*. New York Academic Press Inc, 1960.
- [Die72] J. Dieudonné. *Elements d'Analyse Tome I*. Gauthier-Villars, Paris 1972.
- [Dob05] Cécile Dobrzynski. *Adaptation de Maillage anisotrope 3D et application à l'aéro-thermique des bâtiments*. PhD thesis, Université Pierre et Marie Curie, novembre 2005.
- [DS91a] E.F D'Azevedo and R.B Simpson. On optimal triangular meshes for minimizing the gradient error. *Numerische Mathematik*, No. 59 :321–348, 1991.
- [DS91b] E.F D'Azevedo and R.B Simpson. Optimal triangular mesh generation by coordinate transformation. *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, 12(4) :755–786, July 1991.
- [EG02] Alexandre Ern and Jean-Luc Guermond. *Éléments finis théorie, applications, mise en oeuvre*. Berlin Heidelberg , Springer, 2002.
- [Epp96] David Eppstein. Linear complexity hexahedral mesh generation. *Department of Information and Computer Science University of california, Irvine, CA 92717*, 1996.
- [FG99] Pascal Frey and Paul-Louis George. *Maillages : Applications aux Elements Finis*. Hermès Science, Paris, 1999.
- [For01] Michel Fortin. Anisotropic mesh adaptation through hierarchical error estimators. *Advances In Computation : Theory and Practice*, 7 :53–65, 2001.
- [Fre] Pascal Frey. *Medit, scientific visualization*. université Pierre et Marie, <http://www.ann.jussieu.fr/~frey/logiciels/medit.html>. Laboratoire Jacques-Louis Lions.
- [Fre03] Pascal J. Frey. Génération et adaptation de maillages de surfaces à partir de données anatomiques discrètes. *Projet Gamma I.N.R.I.A., Rapport de recherche n°4764*, mars 2003.
- [Geo90] Paul-Louis George. *Génération automatique de maillages : applications aux méthodes d'éléments Finis*. Masson, Paris, 1990.

Bibliographie

- [Ger29] Joseph Gergonne. Géométrie de situation sur théorème d'euler relatif aux polyèdres. *Annales de Mathématiques Pures et Appliquées*, pages 333–338, tome 19 (1828-1829).
- [Gir06] Vivette Girault. *Approximations Variationnelles des EDP*, pages 38–40,52,55. cours de master2. Université Pierre et Marie Curie, 2005-2006.
- [Gru04] Cyril Gruau. *Génération de métriques pour l'adaptation anisotrope de maillages, application à la mise en forme de matériaux*. PhD thesis, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris, décembre 2004.
- [GRW01] Vivette Girault, Beatrice Rivière, and Mary F. Wheeler. A priori error estimates for finite elements methods based on discontinuous approximation spaces for elliptic problems. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 39, 3 :902–931, 2001.
- [Grü87] Shephard Grünbaum. *Tilings and Patterns*. W.H. Freeman and Company, New -York, 1987.
- [Hec98] F. Hecht. *The mesh adapting software : bamg. INRIA report*. <http://www-c.inria.fr/gamma/cdrom/www/bamg/eng.htm>, 1998.
- [Hec03] Frédéric Hecht. Métriques et indicateurs d'erreur. In *Cours maillage*. Paris, INRIA, CEA, EDF, février 2003.
- [Hec05] Frédéric Hecht. A few snags in mesh adaptation loops. In *14th International Meshing Roundtable*. Laboratoire Jacques-Louis Lions université Pierre et Marie Curie, Paris, sept 2005.
- [Hec08] Frédéric Hecht. Quelques estimations d'erreurs d'interpolation anisotropes pour éléments finis de lagrange. *Numerical Analysis and Scientific Computing for Partial Differential Equations and their Challenging Applications*, février 2008.
- [HG99] Frédéric Hecht and Paul Louis Georges. *Nonisotropic Grids*, chapter 20. CRC Press, 1999.
- [HK08a] Frédéric Hecht and Raphaël Kuate. Approximation de la matrice hessienne d'une fonction. *In process*, Laboratoire Jacques-Louis Lions, 2008.
- [HK08b] Frédéric Hecht and Raphaël Kuate. Metric generation for a given error estimation. *Proceedings, 17th International Meshing Roundtable, Springer-Verlag*, pp. 569-584., august 2008.
- [HKT08] Frédéric Hecht, Raphaël Kuate, and Timothy Tautges. A new set of hexaedral meshes local transformations. *Proceedings, 17th International Meshing Roundtable, Springer-Verlag*, pp. 451-466., august 2008.
- [HP] Frédéric Hecht and Olivier Pironneau. *Freefem++, language for finite element method and Partial Differential Equations (PDE)*. Université Pierre et Marie, <http://www.freefem.org/ff++/>. Laboratoire Jacques-Louis Lions.

- [JKL⁺07] K. Jurkova, R. Kuate, F. Ledoux, T.J. Tautges, and H. Zorgati. Local topological modification of hexahedral meshes part ii : Combinatorics and relation to boy surface. *Essaim Proc*, 24 :34, CEMRACS 2007.
- [JZ00] M. Joswig and G. M. Ziegler. Neighborly cubical polytopes. *Discrete & Computational Geometry arXiv :math.CO/9812033*, 24 :(2–3) :325–344, 2000.
- [Lag06] Jean François Lagüe. *Optimisation de maillage basée sur une erreur locale d'interpolation*. PhD thesis, Université Pierre et Marie Curie, décembre 2006.
- [LB96] Patrick Laug and Houman Borouchaki. *The BL2D Mesh Generator*. Projet Gamma, I.N.R.I.A., <http://www-c.inria.fr/gamma/Patrick.Laug/logiciels/bl2d-v2/INDEX.html>, July 1996. Rapport technique N^o 0194.
- [Les01] David Leservoisier. *Stratégies D'adaptation et de raffinement de maillage en Mécanique des Fluides Numérique*. PhD thesis, Université Pierre et Marie Curie, septembre 2001.
- [LH06] J.F. Lagüe and F. Hecht. Optimal mesh for P¹ interpolation in H¹ seminorm. In *15th Int. Meshing Roundtable*, 2006.
- [MH98] Mathias Müller-Hannemann. Hexahedral mesh generation by successive dual cycle elimination. *Technische Universität Berlin*, 1998.
- [Mit96] S.A. Mitchell. A characterization of the quadrilateral meshes of a surface which admits a compatible hexahedral mesh of the enclosed volume. *Proc. 13-th Sympos. Theoretical Aspects of Computer Science, Lect. Notes Computer Sci. 1046*, Available at <http://www.cs.sandia.gov/~samitch/STACS-slides.pdf>, 1996.
- [MP02] S. Matveev and M. Polyak. Cubic complexes and finite type invariants. *arXiv :math.GT/0204085*, 2002.
- [MVDG05] C.-M. Manole, M.-G. Vallet, J. Dompierre, and F. Guibault. Benchmarking second order derivatives recovery of a piecewise linear scalar field. *Département de génie informatique*, Ecole Polytechnique de Montréal Canada, 2005.
- [Pic03] M. Picasso. An anisotropic error indicator based on Zienkiewicz-Zhu error estimator : application to elliptic and parabolic problems. *SIAM J. Sci. Comput.*, 24(4) :1328–1355 (electronic), 2003.
- [TK02] Timoty Tautges and Sarah E. Knoop. Topology modification of hexahedral meshes using atomic dual-based operations. *Sandia National Laboratories, Albuquerque, NM & University of Wisconsin-Madison, WI, U.S.A.*, 2002.
- [Ver93a] R. Verfürth. A posteriori error estimators and adaptative mesh-refinement techniques. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 50 :67–83, 1993.

Bibliographie

- [Ver93b] R. Verfürth. A posteriori error estimators and adaptative mesh-refinement techniques for the navier-stokes equations. *Incompressible Computational Fluid Dynamics, Trends end Advances*, 60 :1447–1477, 1993.
- [VGS04] Pavel Vachal, Rao V. Garimella, and Mikhail J. Shashkov. Untangling of 2d meshes in ale simulations. *Journal of Computational Physics*, 196, Issue 2 :627–644, Elsevier, 2004.
- [Woh99] B. Wohlmuth. A residual based error estimator for mortar finite elements discretization. *numerische Mathematik*, 84 :143–171, 1999.
- [ZZ92] O.C. Zienkiewicz and J. Z. Zhu. The superconvergent patch recovery and posterior estimates, Part I : The recovery technique. *Int. J. Numer. Meth. Engng*, 33(7) :1331–1364, may 1992.