

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

COMPARAISON DE MÉTHODES DE RECONSTRUCTION QUADRATIQUE
POUR L'ADAPTATION DE MAILLAGES ANISOTROPES

CLEOPATRA MIHAELA CIUPERCĂ
DÉPARTEMENT DE GÉNIE INFORMATIQUE
ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

MÉMOIRE PRÉSENTÉ EN VUE DE L'OBTENTION
DU DIPLÔME DE MAÎTRISE ÈS SCIENCES APPLIQUÉES
(GÉNIE INFORMATIQUE)
DÉCEMBRE 2005

© CLEOPATRA MIHAELA CIUPERCĂ, 2005.



Library and
Archives Canada

Bibliothèque et
Archives Canada

Published Heritage
Branch

Direction du
Patrimoine de l'édition

395 Wellington Street
Ottawa ON K1A 0N4
Canada

395, rue Wellington
Ottawa ON K1A 0N4
Canada

Your file Votre référence

ISBN: 978-0-494-16766-3

Our file Notre référence

ISBN: 978-0-494-16766-3

NOTICE:

The author has granted a non-exclusive license allowing Library and Archives Canada to reproduce, publish, archive, preserve, conserve, communicate to the public by telecommunication or on the Internet, loan, distribute and sell theses worldwide, for commercial or non-commercial purposes, in microform, paper, electronic and/or any other formats.

The author retains copyright ownership and moral rights in this thesis. Neither the thesis nor substantial extracts from it may be printed or otherwise reproduced without the author's permission.

AVIS:

L'auteur a accordé une licence non exclusive permettant à la Bibliothèque et Archives Canada de reproduire, publier, archiver, sauvegarder, conserver, transmettre au public par télécommunication ou par l'Internet, prêter, distribuer et vendre des thèses partout dans le monde, à des fins commerciales ou autres, sur support microforme, papier, électronique et/ou autres formats.

L'auteur conserve la propriété du droit d'auteur et des droits moraux qui protègent cette thèse. Ni la thèse ni des extraits substantiels de celle-ci ne doivent être imprimés ou autrement reproduits sans son autorisation.

In compliance with the Canadian Privacy Act some supporting forms may have been removed from this thesis.

Conformément à la loi canadienne sur la protection de la vie privée, quelques formulaires secondaires ont été enlevés de cette thèse.

While these forms may be included in the document page count, their removal does not represent any loss of content from the thesis.

Bien que ces formulaires aient inclus dans la pagination, il n'y aura aucun contenu manquant.


Canada

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

Ce mémoire intitulé:

COMPARAISON DE MÉTHODES DE RECONSTRUCTION QUADRATIQUE
POUR L'ADAPTATION DE MAILLAGES ANISOTROPES

présenté par: CIUPERCĂ CLEOPATRA MIHAELA

en vue de l'obtention du diplôme de: Maîtrise ès sciences appliquées

a été dûment accepté par le jury d'examen constitué de:

M. ROY ROBERT, Ph.D., président

M. GUIBAULT FRANÇOIS, Ph.D., membre et directeur de recherche

M. DUFOUR STEVEN, Ph.D., membre et codirecteur de recherche

M. LAFOREST MARC, Ph.D., membre

À toute l'équipe qui a rendu possible la réalisation
de ce projet de recherche et à ma famille d'ici et de mon pays

REMERCIEMENTS

Je tiens à remercier tout d'abord François Guibault, mon Professeur et directeur de thèse, qui m'a donné la possibilité de découvrir le monde de la recherche en me proposant ce sujet. Je lui suis très reconnaissante de m'avoir fait partager son savoir, d'avoir eu pleine confiance en moi et de m'avoir soutenu dans les moments difficiles. Son dynamisme et sa sympathie ont permis de rendre ce travail très agréable.

Je voudrais adresser ma reconnaissance la plus profonde au Professeur Steven Dufour pour m'avoir fait l'honneur d'être le codirecteur de ce mémoire. Je le remercie pour son intérêt porté à ce sujet de recherche et à mes travaux, et pour le rôle déterminant qu'il a joué durant mon parcours universitaire. En tant que professeur, il a orienté ma formation théorique vers l'approfondissement de mes connaissances scientifiques en vue de la recherche. Ses cours m'ont été d'une aide indispensable.

Je tiens particulièrement à remercier deux docteurs et amis, Julien Dompierre et Marie-Gabrielle Vallet, qui m'ont initié au travail de recherche et qui m'ont accompagné tout au long de mes années de maîtrise. Je les remercie pour leur aide précieuse dans toutes les étapes de ce travail, ainsi que pour m'avoir fait partager leur expérience et leur passion pour la recherche. Merci pour toute l'énergie, les idées et les intuitions dont j'ai bénéficié de votre part au cours de ces trois années. Je remercie d'autant Paul Labbé pour les discussions intéressantes que nous avons eues lors des rencontres sur le sujet de ce travail.

Enfin, je remercie ma famille pour son soutien, sa patience et ses encouragements continus et pour m'avoir communiqué l'envie du savoir. Je remercie du fond du coeur Ovidiu et Corina avec qui j'ai eu la chance et le bonheur de vivre cette expérience formidable et qui par leur présence m'ont permis de réaliser ce travail dans les meilleures conditions possibles. Ce mémoire leur est dédié.

RÉSUMÉ

L'adaptation des maillages anisotropes utilise une métrique pour spécifier la finesse locale d'un maillage. Cette métrique est gouvernée par un *estimateur d'erreur* provenant d'une estimation de l'erreur d'interpolation liée à la discrétisation du domaine, au résidu des équations ou à la courbure des frontières. Dans chaque cas, la métrique dépend de la matrice des dérivées secondes d'un champ numérique et de la méthodologie permettant de la calculer. Les méthodes de calcul des dérivées secondes sont connues comme des techniques de *reconstruction des dérivées secondes* et constituent un aspect important en ce qui concerne l'efficacité d'un processus d'adaptation de maillages. Il existe plusieurs façons de reconstruire les dérivées secondes. Dans ce document, on s'intéresse à l'analyse comparative des techniques pour reconstruire localement une approximation continue et linéaire des dérivées secondes (fonction linéaire par morceaux). On présente donc, ici, un protocole d'expérimentation construit sur une approche méthodique de comparaison qu'on applique à ce type de reconstructions et qui sert à investiguer leur convergence et leur robustesse. Ainsi, on étudie cinq techniques de reconstructions des dérivées secondes basées sur une projection dans l'espace L^2 , sur une extension des procédures classiques de reconstruction de gradient, sur une reconstruction d'une conique au sens des moindres carrées, et sur une intégration par parties.

L'étude de ces techniques a montré que leur comportement, autant à l'intérieur du domaine de calcul que sur les frontières, est sensible à la discrétisation du domaine, ce qui nous a permis de considérer le maillage comme un des principaux facteurs dans l'étude de comparaison et un des éléments constitutifs du protocole d'expérimentation. D'autre part, on a observé que certaines techniques de calcul qui sont précises sur des maillages structurés perdent leurs propriétés sur des maillages non-structurés, ou présentent des difficultés près des frontières ou sur des maillages ayant des éléments étirés. Toutes ces observations nous ont mené à utiliser plusieurs types

de discrétisations, chacune ayant des caractéristiques topologiques et géométriques différentes. Pour couvrir une plage d'utilisation des maillages aussi large que possible, on considère dans le protocole des maillages isotropes et anisotropes, structurés et non-structurés. Tous ces maillages sont construits de façon à rendre possible et efficace le processus de comparaison et l'analyse de la convergence. Dans ce but, chaque type de maillage discrétise le carré unité et est représenté par une série de maillages de plus en plus fins et ayant les mêmes caractéristiques de construction.

Finalement, on ajoute au protocole dix fonctions analytiques, plus ou moins régulières, dans le but de rendre possible l'analyse de la convergence. Les fonctions analytiques sont choisies de manière à couvrir une variété de cas de non-linéarités retrouvés dans des problèmes réels (couches limites, chocs, sillages, fissures, singularités, etc.) et sont représentées par des polynômes ou des fonctions exponentielles. Pour l'étude de la convergence, la différence entre les dérivées secondes numériques et les dérivées secondes analytiques est mesurée en norme L^2 . En même temps, on tient compte du fait que les méthodes de reconstruction peuvent présenter des difficultés près des frontières. On mesure alors séparément l'erreur sur le domaine interne et sur les frontières. Avec la génération de maillages de plus en plus fins, on en déduit leur ordre de convergence.

Par conséquent, dans ce document, on se concentre sur la construction d'un protocole d'expérimentation permettant d'approfondir nos connaissances sur les techniques de reconstruction des dérivées secondes, offrant ainsi une image détaillée de leurs comportements tant sur le domaine interne que près des frontières.

ABSTRACT

Anisotropic mesh adaptation uses a metric to determine where a mesh needs to be refined. This metric is controlled by an error estimator coming from an estimation of the interpolation error related to the discretization of the domain, to the residuals of the equations or to the curvature of the boundary of the geometry. In each case, this metric depends on the reconstruction-based second order derivatives of a computed scalar field, and the methodology used to calculate it. These methods, also known as *Hessian recovery* techniques, represent a significant aspect of the adaptation method which influences the efficiency of a mesh adaptation process. There are several ways to calculate an Hessian matrix. We are mostly interested in the recovery techniques that allow the local reconstruction of the second order derivatives of a continuous piecewise linear function. Therefore, we propose a systematic approach to measure and compare the performance of these methods. It is built as a experimentation protocol and it is applied to this type of recovery techniques in order to investigate their convergence and their efficiency.

The following five second order derivatives reconstruction techniques are studied : the double L^2 projection ; the simple linear fitting ; the double linear fitting ; the quadratic fitting ; and the double integration by parts. These methods, generally based on the standard gradient recovery or on modified versions of this procedure, use a local discrete least-squares approximation (*SAL* and *DAL*), or a double projection onto the L^2 space (*DPL2* and *DIP*). At the same time, a quadratic recovery technique is presented as the quadratic fitting method (*AQ*), which locally reconstructs a conic in the least-squares sense.

The study of these techniques showed that their behavior, in the core of the computational domain, and on the boundaries, is sensitive to the mesh. This enabled us to consider the mesh as one of the main factors in this comparative study, and as one of the components of the experimentation protocol. In addition, it was ob-

served that some recovery techniques, which are accurate on structured meshes, are inaccurate on unstructured meshes, or at the boundaries or on meshes with stretched elements. All these observations lead us to use several types of discretizations, each having different topological and geometrical characteristics. To cover a wide range problems, the protocol includes isotropic, anisotropic, structured and unstructured meshes. These meshes are built in order to make the process of comparison and the analysis of convergence effective. To this end, each type of mesh discretizes the unit square and is represented by a series meshes with various mesh size, with the same geometrical characteristics.

Finally, we add to the protocol ten more or less regular analytic functions in order to perform a convergence analysis. The analytic functions are selected in order to cover a variety of cases of non-linearities that mimic the behavior of the "real problems" (boundary layers, shocks, cracks, singularities, etc.), which are represented by exponential or polynomial functions. For the study of convergence, the difference between the second order numerical derivatives and the second order analytical derivatives is measured using a standard L^2 -norm. At the same time, we take into account that the recovery methods do not perform well on the boundaries. To study this behavior, the error is evaluated separately over the interior domain, as well as on the boundaries. Using increasingly fine meshes, we deduce their order of convergence.

We therefore focus our efforts to develop a experimentation protocol which makes it possible to perform an in depth study of the Hessian recovery techniques, and therefore offering a detailed description of their behavior in the core of the computational domain as well as on the boundaries.

TABLE DES MATIÈRES

DÉDICACE	iv
REMERCIEMENTS	v
RÉSUMÉ	vi
ABSTRACT	viii
TABLE DES MATIÈRES	x
LISTE DES TABLEAUX	xiii
LISTE DES FIGURES	xiv
LISTE DES SIGLES ET ABRÉVIATIONS	xix
LISTE DES ANNEXES	xxi
INTRODUCTION	1
0.1 La formulation du problème	3
0.2 Le plan du mémoire	9
CHAPITRE 1 LA REVUE DE LA LITTÉRATURE	11
CHAPITRE 2 LES MÉTHODES DE RECONSTRUCTION	21
2.1 Les dérivées dans $L^1_{loc}(\Omega)$	22
2.2 L'espace de Sobolev $H^1(\Omega)$	22
2.3 Un résultat d'approximation	23
2.4 Les éléments finis	24
2.4.1 L'élément fini de Lagrange	26
2.4.2 L'élément fini de référence	27

2.4.3	L'interpolation sur le domaine	28
2.4.4	Éléments finis triangulaires	30
2.5	Les méthodes de reconstruction testées	31
2.5.1	Les notations	32
2.5.2	La <i>régularité</i> de la solution et la norme de l'erreur	32
2.5.3	La reconstruction globale par la méthode des moindres carrés	34
2.5.3.1	La reconstruction de Zienkiewicz-Zhu	39
2.5.4	La simple approximation linéaire	39
2.5.5	La double approximation linéaire	42
2.5.6	La double projection L^2	44
2.5.7	L'approximation quadratique	46
2.5.8	La double intégration par parties	47
CHAPITRE 3 LA MÉTHODOLOGIE DE COMPARAISON DES MÉTHODES DE RECONSTRUCTION		51
3.1	Les maillages	52
3.1.1	Le choix des maillages	54
3.1.2	La description des maillages	57
3.1.2.1	Le maillage isotrope en drapeau britannique	57
3.1.2.2	Le maillage anisotrope en drapeau britannique	59
3.1.2.3	Le maillage isotrope de Delaunay	60
3.1.2.4	Le maillage anisotrope avec angles droits	61
3.1.2.5	Le maillage anisotrope avec angles obtus	61
3.2	Les fonctions analytiques	63
3.3	La taille caractéristique	65
3.4	La norme et la convergence	66
3.5	L'environnement de calcul	70
CHAPITRE 4 LES RÉSULTATS NUMÉRIQUES		71

4.1	La reconstruction du hessien dans <i>OORT</i>	72
4.2	La validation des méthodes de reconstruction	80
4.3	Les résultats numériques pour la fonction $\mathbf{u}_{10} = e^{-25x} + e^{-25y}$. . .	80
4.3.1	La simple approximation linéaire	82
4.3.2	L'approximation quadratique	84
4.3.3	La double projection L^2	84
4.3.4	La double approximation linéaire	87
4.4	Les caractéristiques générales des résultats numériques	87
CONCLUSION		90
RÉFÉRENCES		93
ANNEXES		97

LISTE DES TABLEAUX

TABLEAU 3.1	Maillages de type <i>IDB</i>	58
TABLEAU 3.2	Maillages de type <i>IDD</i>	60
TABLEAU 3.3	Maillages de type <i>AAD</i> , <i>AAO</i> , <i>ADB</i>	62
TABLEAU II.1	Description des paramètres d'entrée	106
TABLEAU II.2	Description du fichier <i>.pie</i>	107
TABLEAU II.3	Fichier <i>geometrie.pie</i>	108

LISTE DES FIGURES

FIGURE 2.1	Support des fonctions d'interpolation linéaires par élément . . .	29
FIGURE 2.2	Éléments finis triangulaires de type <i>Lagrange</i> à trois noeuds. Gauche : l'élément de référence; droite : l'élément réel.	30
FIGURE 2.3	Exemples de cellules de triangles à 3 noeuds et des points d'échantillonnage P_j . Gauche : un point d'échantillonnage par élément (barycentre); droite : trois points d'échantillonnage par élément (3 points de <i>Gauss</i>).	36
FIGURE 2.4	Cellules des sommets-frontière et les points d'échantillonnage choisis.	43
FIGURE 2.5	Exemple de cellule T_i^{AQ}	47
FIGURE 2.6	Évaluation de l'intégrale surfacique.	50
FIGURE 3.1	Exemples de maillages isotropes en drapeau britannique, <i>IDB</i>	58
FIGURE 3.2	Exemples de maillages anisotropes en drapeau britannique, <i>ADB</i>	59
FIGURE 3.3	Exemples de maillages isotropes de Delaunay, <i>IDD</i>	60
FIGURE 3.4	Exemples de maillages anisotropes avec angles droits, <i>AAD</i>	61
FIGURE 3.5	Exemples de maillages anisotropes avec angles obtus, <i>AAO</i>	62
FIGURE 3.6	Fonction $f(x, y) = e^{-25x} + e^{-25y}$ sur le carré unité.	64
FIGURE 3.7	Les domaines considérés pour l'évaluation de l'erreur.	69

FIGURE 4.1	Méthode de reconstruction <i>SAL</i> pour la fonction u_1 , sur des maillages isotropes de <i>Delaunay</i>	74
FIGURE 4.2	Méthode de reconstruction <i>SAL</i> pour la fonction u_1 , sur des maillages isotropes en drapeau britannique.	75
FIGURE 4.3	Méthode de reconstruction <i>SAL</i> pour la fonction u_1 , sur des maillages anisotropes avec des angles obtus, <i>AAO</i>	76
FIGURE 4.4	Méthode de reconstruction <i>DPL2</i> pour la fonction u_1 , sur des maillages isotropes de <i>Delaunay</i>	77
FIGURE 4.5	Méthode de reconstruction <i>DPL2</i> pour la fonction u_1 , sur des maillages isotropes en drapeau britannique.	78
FIGURE 4.6	Méthode de reconstruction <i>DPL2</i> pour la fonction u_1 , sur des maillages anisotropes <i>AAD</i> et <i>AAO</i>	79
FIGURE 4.7	La validation des méthodes de reconstruction <i>DPL2</i> , <i>DAL</i> et <i>AQ</i> pour la fonction $u = x$. Graphes de convergence pour le domaine Ω entier.	81
FIGURE 4.8	Graphes de convergence : Méthode <i>SAL</i> avec la fonction u_{10} . .	83
FIGURE 4.9	Graphes de convergence : Méthode <i>AQ</i> avec la fonction u_{10} . .	85
FIGURE 4.10	Graphes de convergence : Méthode <i>DPL2</i> avec la fonction u_{10} . .	86
FIGURE 4.11	Graphes de convergence : Méthode <i>DAL</i> avec la fonction u_{10} . .	89
FIGURE I.1	Schéma d'exécution du protocole expérimentale	100
FIGURE II.1	Géométrie carré	105

FIGURE III.1	Gauche : 1* ; droite : 2*	110
FIGURE III.2	Gauche : 3* ; droite : 4*	110
FIGURE III.3	Gauche : 1* ; droite : 2*	111
FIGURE III.4	Gauche : 3* ; droite : 4*	111
FIGURE III.5	Gauche : 1* ; droite : 2*	112
FIGURE III.6	Gauche : 3* ; droite : 4*	112
FIGURE III.7	Gauche : 1* ; droite : 2*	113
FIGURE III.8	Gauche : 3* ; droite : 4*	113
FIGURE III.9	Gauche : 1* ; droite : 2*	114
FIGURE III.10	Gauche : 3* ; droite : 4*	114
FIGURE III.11	Gauche : 1* ; droite : 2*	115
FIGURE III.12	Gauche : 3* ; droite : 4*	115
FIGURE III.13	Gauche : 1* ; droite : 2*	116
FIGURE III.14	Gauche : 3* ; droite : 4*	116
FIGURE III.15	Gauche : 1* ; droite : 2*	117
FIGURE III.16	Gauche : 3* ; droite : 4*	117
FIGURE III.17	Gauche : 1* ; droite : 2*	118
FIGURE III.18	Gauche : 3* ; droite : 4*	118

FIGURE III.19	Gauche : 1* ; droite : 2*	119
FIGURE III.20	Gauche : 3* ; droite : 4*	119
FIGURE III.21	Gauche : 1* ; droite : 2*	120
FIGURE III.22	Gauche : 3* ; droite : 4*	120
FIGURE III.23	Gauche : 1* ; droite : 2*	121
FIGURE III.24	Gauche : 3* ; droite : 4*	121
FIGURE III.25	Gauche : 1* ; droite : 2*	122
FIGURE III.26	Gauche : 3* ; droite : 4*	122
FIGURE III.27	Gauche : 1* ; droite : 2*	123
FIGURE III.28	Gauche : 3* ; droite : 4*	123
FIGURE III.29	Gauche : 1* ; droite : 2*	124
FIGURE III.30	Gauche : 3* ; droite : 4*	124
FIGURE III.31	Gauche : 1* ; droite : 2*	125
FIGURE III.32	Gauche : 3* ; droite : 4*	125
FIGURE III.33	Gauche : 1* ; droite : 2*	126
FIGURE III.34	Gauche : 3* ; droite : 4*	126
FIGURE III.35	Gauche : 1* ; droite : 2*	127
FIGURE III.36	Gauche : 3* ; droite : 4*	127

FIGURE III.37	Gauche : 1* ; droite : 2*	128
FIGURE III.38	Gauche : 3* ; droite : 4*	128
FIGURE III.39	Gauche : 1* ; droite : 2*	129
FIGURE III.40	Gauche : 3* ; droite : 4*	129
FIGURE III.41	Gauche : 1* ; droite : 2*	130
FIGURE III.42	Gauche : 3* ; droite : 4*	130
FIGURE III.43	Gauche : 1* ; droite : 2*	131
FIGURE III.44	Gauche : 3* ; droite : 4*	131
FIGURE III.45	Gauche : 1* ; droite : 2*	132
FIGURE III.46	Gauche : 3* ; droite : 4*	132
FIGURE III.47	Gauche : 1* ; droite : 2*	133
FIGURE III.48	Gauche : 3* ; droite : 4*	133

LISTE DES SIGLES ET ABRÉVIATIONS

det	Opérateur déterminant
n	Vecteur normal
P^k	Ensemble des polynômes de degré inférieur ou égal à k
u	Solution exacte
u_h	Solution numérique
u_x	$\frac{\partial u}{\partial x}$
V_h^k	Espace d'approximation associé à l'élément fini P^k de <i>Lagrange</i>
φ	Fonction de base
∇, ∇_R	Opérateur gradient. Gradient reconstruit
Π_C, Π_h	Opérateur d'interpolation de Clément. Opérateur d'interpolation
$\mathcal{H}_u, \mathcal{H}_h$	Hessien analytique. Hessien reconstruit
K	Élément fini (triangle)
$ K $	Aire de K
$\ \cdot\ _{L^2}$	Norme L^2
Ω	Domaine d'étude (le carré unité)
$\partial\Omega$	Bord du domaine d'étude
Ω_1	Domaine contenant tous les éléments appartenant à la frontière du Ω
Ω_2	Domaine contenant tous les éléments internes du Ω
Ω_3	Domaine contenant toutes les arêtes appartenant à la frontière du Ω
SAL	Méthode de reconstruction : la simple approximation linéaire
DAL	Méthode de reconstruction : la double approximation linéaire
$DPL2$	Méthode de reconstruction : la double projection L^2
AQ	Méthode de reconstruction : l'approximation quadratique
DIP	Méthode de reconstruction : la double intégration par parties

<i>IDB</i>	Maillage isotrope en drapeau britannique
<i>ADB</i>	Maillage anisotrope en drapeau britannique
<i>IDD</i>	Maillage isotrope de <i>Delaunay</i>
<i>AAD</i>	Maillage anisotrope avec des angles droits
<i>AAO</i>	Maillage anisotrope avec des angles obtus

LISTE DES ANNEXES

ANNEXE I	LA DESCRIPTION DU PROGRAMME DE RECONSTRUC-	
	TION DES DÉRIVÉES SECONDES	97
I.1	La description des classes du programme	99
I.1.1	La classe <i>Sommet</i>	100
I.1.2	La classe <i>Arete</i>	101
I.1.3	La classe <i>Triangle</i>	102
I.1.4	La classe <i>Maillage</i>	102
I.1.5	La classe <i>Norme</i>	103
I.1.6	La classe <i>FonctionAnalytique</i>	103
ANNEXE II	PARAMÈTRES DU PROGRAMME <i>RDS</i>	104
ANNEXE III	PRÉSENTATION DES RÉSULTATS NUMÉRIQUES . . .	109

INTRODUCTION

Depuis plusieurs années, la génération de maillages fait l'objet de nombreux travaux pratiques et de recherche. Tenant compte de la grande quantité de travaux effectués sur ce sujet, on pourrait dire jusqu'à un certain point que la génération des maillages a atteint un degré de maturité, devenant un problème assez connu et répandu. Les champs de recherche couverts sur la génération de maillages et leurs applications (simulations, calculs numériques, ingénierie) est vaste, grâce entre autres aux progrès de l'informatique et aux techniques de génération de maillages existantes. Les ressources informatiques actuelles et les concepts théoriques derrière la génération de maillages rendent maintenant possible l'utilisation des maillages autant dans l'industrie que dans les laboratoires de recherche universitaires. Mais malgré toutes ces ressources, il reste encore des chemins à explorer dans ce domaine. Par exemple, l'obtention de meilleurs maillages répondant aux besoins pour la résolution des problèmes, comme ceux rencontrés en aéronautique, l'énergétique, ou l'imagerie médicale, font l'objet de plusieurs directions de pointe de la recherche actuelle. Quels que soient le domaine ou les problèmes rencontrés, des efforts considérables de recherche sont effectués pour développer des méthodes de génération de maillages s'adaptant mieux aux critères spécifiques à chaque type d'application. La génération de maillages constitue un aspect important dans de nombreuses applications, dans des domaines aussi variés que le calcul scientifique, la robotique, la CAO, la modélisation géométrique ou l'imagerie médicale. Comme le cadre de cette recherche ne nous permet pas de couvrir tous les aspects théoriques et pratiques de la génération de maillages, on va se concentrer sur l'étude de la génération de maillages pour la résolution des problèmes en mécanique des fluides.

En mécanique des fluides, l'étude des écoulements, par exemple, autour des avions, des voitures, etc. s'inscrivent dans le contexte des simulations numériques. Les simulations numériques apparaissent donc comme étant indispensables, permettant de

mieux appréhender et comprendre les phénomènes rencontrés dans les problèmes réels. D'autre part, les simulations d'écoulements sur des configurations réelles restent encore un problème, malgré les connaissances théoriques et les ressources informatiques actuelles : la performance des processeurs des ordinateurs, le développement constant des logiciels pour la génération de maillages (ICEM, Gambit) et pour le calcul des écoulements (Fluent, CFX). Toutefois, les technologies de calcul d'aujourd'hui permettent d'utiliser des bases de données très complètes pour l'étude des écoulements autour des voitures, des avions, des bateaux, etc.

Dans les simulations numériques, les maillages ont un rôle significatif. L'importance des maillages dans le processus de calcul découle du fait que si les maillages représentent mieux le problème, alors les phénomènes physiques sont mieux représentés. Les techniques de construction de maillages répondant bien à certains critères imposés par le problème à résoudre, s'inscrivent parmi les techniques d'adaptation de maillages.

L'adaptation de maillages est le processus de raffinement local qui s'effectue préférentiellement dans des régions présentant des phénomènes physiques comme les chocs ou les couches limites, ou modélisant des géométries complexes. Le but de ces raffinements est de mieux capturer les phénomènes physiques et représenter la géométrie.

Un point bien important dans la génération et l'adaptation de maillages est la gestion et la manipulation des maillages de grande taille qui pourraient entraîner un grand coût de calcul dans le processus. Un maillage ayant plusieurs millions d'éléments est difficile à gérer et si, en plus, on lui applique un processus d'adaptation qui pourrait augmenter le nombre d'éléments, cela produira une hausse visible du coût de calcul. Ceci nous permet de dire que, dans le cas des phénomènes physiques concentrés dans de petites régions du domaine de calcul, comme les couches limites ou chocs, il est préférable que les raffinements soient faits localement. Alors, l'adaptation de maillages permet à la fois la réduction de la taille des maillages, du temps de calcul et l'amélioration de la qualité des résultats numériques.

Les maillages anisotropes constituent une catégorie de maillages fréquemment utilisés. La performance de ces maillages dans la résolution de plusieurs types de problèmes est reconnue (Leservoisier *et al.* (2001), Frey *et al.* (1996), Laug *et al.* (1996)). L'utilisation des maillages anisotropes est due au fait qu'en général les phénomènes physiques sont de nature anisotrope, ou étirés, occupant des régions très allongées et aplaties dans le domaine de calcul, ce qui nous conduit au concept de maillage s'adaptant aux différentes échelles de l'écoulement ou, en d'autres termes, aux différentes directions spécifiques du phénomène physique. Un tel maillage devrait contenir des éléments anisotropes (étirés) dans les régions où les phénomènes physiques sont concentrés, et des éléments isotropes ailleurs, là où il n'existe pas de comportement concentré et de direction privilégiée. L'utilisation d'un maillage de ce type permet la capture des couches limites, des chocs, etc., tout le long de la direction préférentielle de propagation.

0.1 La formulation du problème

Une branche importante des sciences en ingénierie et en mathématiques appliquées s'intéresse aux calculs des équations aux dérivées partielles. Les techniques permettant de les calculer reposent sur des modélisations numériques basées sur les différences finis, les éléments finis ou les volumes finis. La modélisation numérique par des différences finies approxime les dérivées partielles par des développements limités (différences finies). La difficulté de cette méthode réside dans le manque de flexibilité dans la réalisation du maillage (maillage structuré). Les simulations numériques de la propagation d'ondes seraient un exemple de l'utilisation de cette méthode. La méthode des volumes finis utilise des lois de conservation où des bilans locaux des variables (masse, énergie, quantité de mouvement, etc.) conduisent à des équations non linéaires dont les inconnues sont supposées constantes dans le volume de contrôle (équations de diffusion, de transport-diffusion, etc.). La modélisation numérique avec des éléments

finis constitue une des plus puissantes méthodes de calcul utilisées en pratique. Cette méthode, basée sur le principe variationnel, permet l'analyse des phénomènes physiques pouvant être décrits à l'aide des modèles mathématiques constitués d'une ou de plusieurs équations différentielles, et d'une série de conditions initiales et limites. L'analyse des champs de vitesses et de pression dans un écoulement serait un bon exemple de l'application de cette méthode.

Les applications basées sur les éléments finis permettent la réalisation d'expériences numériques vues comme des procédés fondamentaux de la recherche et de la conception géométrique assistée par ordinateur. Une formulation mathématique incorporant une modélisation analytique sous forme d'équations et de relations constitutives constitue le point de départ dans la réalisation de ces expériences numériques. Le développement des modèles analytiques et numériques rend possible aujourd'hui la résolution de problèmes de plus en plus complexes. Un point clef dans la résolution des problèmes simples ou complexes est la concordance entre les résultats analytiques et les résultats expérimentaux, ou numériques. Cette concordance est réalisée en considérant un processus de modélisation numérique partant d'un modèle analytique connu. La modélisation numérique s'avère donc être un instrument de prédiction et, en même temps, de vérification des objectifs. Cependant, ses limites d'applicabilité deviennent évidentes au fur et à mesure que la complexité des problèmes augmente.

Le concept fondamental sur lequel une méthode basée sur les éléments finis repose est celui d'approximation par discrétisation. Partant de ce concept, les domaines se décomposent en un nombre fini d'éléments géométriques ayant les mêmes propriétés physiques et fonctionnelles que le domaine initial. Cette décomposition, appelée *maillage*, se définit comme le processus de division du domaine en morceaux continus et de formes simples (triangles, quadrilatères, tétraèdres, etc.).

Une résolution approximative des équations différentielles avec une discrétisation fournit une solution s'approchant de la solution analytique du problème. La précision de la solution numérique obtenue est liée à la discrétisation effectuée. Prenons, comme

exemple, le problème de réaction-diffusion sur le domaine $\Omega \subset \mathbb{R}^3$, pour lequel on impose une condition de *Dirichlet* g , sur la frontière de Ω , de façon à ce que la solution analytique soit donnée par $u = e^{-kx} + e^{-ky} + e^{-kz}$.

$$\begin{cases} -\Delta u + k^2 u = 0, & \text{sur } \Omega, \\ u = g, & \text{sur } \partial\Omega \end{cases}$$

La résolution de ce problème, par une méthode d'éléments finis, fournit des résultats s'approchant de la solution. Partant de cette solution, on pourrait évaluer la précision de calcul de la méthode, vis-à-vis de la discrétisation employée et de la solution exacte connue. Une évaluation de la précision du calcul, obtenue sur une série de discrétisations, montrerait que la solution numérique est liée à la façon de construire la discrétisation, ce qui veut dire que plus la discrétisation est fine, meilleure sera la précision de calcul. Ainsi, la construction des maillages devient un des principaux facteurs dans le contrôle de la précision numérique. Mais plutôt que de raffiner continûment le maillage jusqu'à l'obtention d'une solution indépendante du maillage, pourquoi ne pas se servir d'un maillage s'adaptant aux critères imposés par les caractéristiques du problème. Dans ce cas-ci, un maillage adapté devrait fournir les résultats escomptés. On vient de préciser qu'un maillage adapté améliore la qualité des résultats numériques obtenus. Cependant, il arrive souvent que le maillage initial ne soit pas le mieux adapté aux conditions de calcul. Il y a plusieurs raisons conduisant à l'affirmation que le maillage de départ n'est pas tout à fait le meilleur. Parmi ces raisons on pourrait énoncer un manque de finesse dans la description de la géométrie ou un changement continu des zones à mailler finement au cours d'un calcul transitoire. Dans ces cas, un processus d'adaptation du maillage initial s'impose. Le processus d'adaptation de maillage consiste à modifier le maillage au fur et à mesure que le processus de calcul s'effectue, de telle sorte que le nouveau maillage évolue en fonction de la solution obtenue. Évidemment, l'application successive du processus d'adaptation conduit à la construction d'un nouveau maillage de meilleure qualité à partir de celui antérieure-

ment obtenu. Ainsi, dans un processus d'adaptation de maillage, on cherche à obtenir soit la meilleure précision pour un nombre donné de degrés de liberté ou à trouver le nombre de degré de liberté minimal pour une précision donnée.

Complémentaire au concept d'approximation par discrétisation, la modélisation numérique par éléments finis, utilise en plus une série de fonctions d'interpolation décrivant localement le problème. L'ensemble des fonctions et la discrétisation définissant le modèle d'approximation permettent de quantifier la qualité des résultats obtenus par l'approximation de l'erreur via un *estimateur d'erreur*. L'estimateur d'erreur s'avère donc un instrument de mesure de la précision du calcul et, en même temps, l'outil sur lequel repose le processus d'adaptation.

La définition des estimateurs d'erreur est basée sur l'évaluation de l'erreur d'interpolation liée à la discrétisation du domaine, au résidu des équations ou à la courbure des frontières. Une catégorie d'estimateurs d'erreur sont des estimateurs définis *a posteriori*, ou à la suite d'un processus de calcul. Après avoir effectué un calcul préalable s'approchant de la solution, l'estimateur *a posteriori* sert à contrôler le maillage par un processus d'adaptation de façon à ce que la solution obtenue sur le maillage adapté soit d'une précision préétablie. Il est donc préférable de disposer d'estimateurs d'erreur *a posteriori* robustes pour pouvoir contrôler les erreurs en adaptant le maillage afin d'éviter des résultats aberrants.

L'estimateur d'erreur *a posteriori* indique où l'erreur est plus grande qu'une précision donnée, où la solution possède de fortes variations, fournissant des informations sur les régions où le maillage devrait être fin ou grossier. La construction d'un estimateur d'erreur *a posteriori* rend possible la définition d'une *carte métrique*. La carte métrique spécifie la taille h , la forme et les directions d'étirements des éléments à construire, gouvernant ainsi le processus d'adaptation des maillages par l'équirépartition de l'erreur dans chaque direction. La carte métrique est définie à l'aide de la *matrice des dérivées secondes* d'un champ scalaire discret.

Un point clef dans la construction de la carte métrique est la connaissance des déri-

vées secondes du champ scalaire. En pratique, dans la plupart des cas, la solution du problème n'est pas connue *a priori*. Ceci veut dire que le calcul des dérivées secondes part d'une approximation de la solution discrète. Soit u , la solution exacte, u_h , la solution numérique élément-fini et $\Pi_h u$, l'interpolation polynômiale de u , alors $u_h \neq \Pi_h u$, mais d'après le lemme de Céa il existe une constante C indépendante de la taille h telle que

$$\| u - u_h \| \leq C \| u - \Pi_h u \|,$$

ce qui permet de contrôler l'erreur d'approximation par l'erreur d'interpolation. Donc, il suffit d'étudier les erreurs d'interpolation plutôt que les erreurs obtenues par la solution numérique élément-fini. En mécanique des fluides, par exemple, les composantes de la vitesse sont typiquement interpolées à l'aide des fonctions linéaires par morceaux et l'erreur d'interpolation est donnée par les dérivées secondes de la vitesse. La différentiation d'un champ linéaire donne donc, des valeurs strictement nulles, ce qui nous amène au contexte du problème qu'on pose, soit la reconstruction linéaire des dérivées secondes significatives d'un champ discret afin de représenter l'estimateur d'erreur et, dans ce document, on se concentre sur l'étude des reconstructions des dérivées secondes basées exclusivement sur des interpolations linéaires. Les reconstructions des dérivées secondes ne constituent pas un nouveau problème, car il existe plusieurs méthodes de reconstruction. Grâce à leur importance dans le processus de l'adaptation des maillages, les méthodes de reconstruction des dérivées secondes reçoivent une attention particulière.

Un grand nombre d'articles traite les estimateurs d'erreur basés sur la reconstruction des dérivées secondes. Parce que ces estimateurs d'erreur sont plus récents et moins classiques plusieurs travaux de recherche s'appuient sur des propositions de nouvelles reconstructions des dérivées secondes, des combinaisons ou des extensions des techniques classiques de reconstruction du gradient. Cependant il existe peu d'études numériques dédiés à l'analyse de la performance des méthodes de reconstruction. Toutefois, on en retrouve des spécifications liées à la robustesse de certains recons-

tructions du hessien (voir, Hecht (2003) et Buscaglia *et al.* (1998)).

La variété des méthodes de reconstruction existantes offre donc la possibilité de choisir la technique de reconstruction à implémenter afin de construire l'estimateur d'erreur. Les motivations derrière ces choix pourraient être la facilité d'implémentation de la méthode de reconstruction ou la concordance de la solution du problème avec les résultats expérimentaux (voir, Alauzet (2003) et Buscaglia *et al.* (1998)).

Partant de toutes ces idées, les principales hypothèses de ce travail sont ainsi la construction des estimateurs d'erreur d'interpolation basés sur l'évaluation du hessien où, donc, le principal intérêt porte sur la reconstruction locale et continue des dérivées secondes d'une fonction linéaire par morceaux. Compte tenu de ces hypothèses, les principaux facteurs pouvant influencer la robustesse de l'estimateur d'erreur sont les méthodes de reconstruction des dérivées utilisées et les maillages. En explorant les méthodes de reconstruction on remarque qu'il existe des reconstructions qui se comportent bien, par exemple, sur des maillages structurés tandis que, pour d'autres types de maillages, leur comportement pourrait être moins bon ou erratique. En tenant compte de toutes ces idées, on propose d'explorer, dans ce travail, les techniques de reconstruction les plus utilisées dans la littérature spécialisée. Dans le même ordre d'idée, on présente une analyse des méthodes et de leurs caractéristiques afin d'établir une comparaison qui n'a pas été effectuée auparavant. La comparaison des méthodes que nous proposons s'effectue en respectant une stratégie d'évaluation préétablie. La stratégie d'évaluation, définie comme un protocole d'expérimentation, est constituée d'expériences numériques basées sur les reconstructions choisies. Le protocole contient, en plus des méthodes de reconstruction, un ensemble d'*outils* permettant de les comparer. L'ensemble d'outils, considéré comme un ensemble de facteurs influençant le comportement des méthodes de reconstruction, comprend à la fois un ensemble de maillages, de fonctions analytiques et de mesures pour évaluer l'erreur. Le protocole, construit rigoureusement sur une approche méthodique de comparaison, sert donc à étudier les caractéristiques des différentes méthodes de reconstruction du

point de vue de l'efficacité et de la précision. En même temps, il devrait se révéler être un outil permettant de trouver la meilleure reconstruction des dérivées secondes. Ainsi, la comparaison des méthodes s'effectue sur un ensemble de maillages présentant différentes caractéristiques de construction et de taille. L'ensemble des fonctions analytiques contient des fonctions simples et complexes. Ces dernières s'approchent de la description des solutions des problèmes de type convection-diffusion, mais les deux types de fonctions sont entièrement connues du point de vue de leurs dérivées. Le choix des fonctions analytiques a été guidé par le fait que nous voulons faire une analyse des résultats numériques reconstruits versus les valeurs analytiques. En ce qui concerne l'évaluation de l'erreur, une fois que la reconstruction est faite, on mesure la différence entre les dérivées secondes reconstruites et les dérivées analytiques. Un point important dans la reconstruction numérique concerne le traitement des frontières. Plusieurs méthodes de reconstruction présentent des difficultés près des frontières. Dans ces cas on dit, que les méthodes employées sont sensibles aux frontières et qu'elles nécessitent l'utilisation de traitements spéciaux au niveau de la méthodologie de calcul. Par conséquent, une attention accrue est accordée à l'évaluation des erreurs près des frontières et plusieurs évaluations de l'erreur sont considérées et effectuées, autant sur la frontière qu'à l'intérieur du domaine.

0.2 Le plan du mémoire

Après cette introduction montrant l'importance de l'évaluation des dérivées secondes dans le processus d'adaptation des maillages anisotropes, on entame ce document composé de quatre chapitres.

Le premier chapitre est dédié entièrement à la revue de la littérature spécialisée dans la construction des estimateurs d'erreur. Le deuxième chapitre présente brièvement, dans la première partie, l'appareil mathématique de base pour les formulations de type élément-fini. On donne les définitions de certains espaces et des interpolations

utilisées, pour ensuite présenter une section préparatoire au niveau des informations et des notations nécessaires pour la description des méthodes de reconstruction. La deuxième partie de ce chapitre est dédiée à la revue des méthodes de reconstructions basées sur les méthodes éléments-finis. Cinq méthodes de reconstruction sont choisies et on retrouve une description détaillée de chaque méthode dans ce chapitre.

Le chapitre 3 décrit le protocole d'expérimentation en présentant à la fois la méthodologie d'évaluation et les facteurs de comparaison. On retrouve ici une description des maillages, des fonctions analytiques et de la stratégie permettant de mesurer l'erreur. Finalement, on décrit brièvement l'environnement de calcul sur lequel repose le protocole d'expérimentation proposé.

Le chapitre 4 présente les expériences et les résultats obtenus. Le dernier chapitre est consacré aux conclusions sur les aspects analysés et les résultats obtenus, et les travaux futurs. De plus, ce document contient un ensemble d'annexes où on décrit la construction et le fonctionnement d'un module informatique servant à évaluer et comparer la précision des reconstructions suivant l'approche méthodique de comparaison décrite au chapitre 3.

CHAPITRE 1

LA REVUE DE LA LITTÉRATURE

Afin de mieux comprendre le concept d'estimateur d'erreur, largement utilisé dans le contexte de l'adaptation des maillages, on a effectué une revue de la littérature sur ce sujet afin d'en évaluer l'utilisation dans plusieurs travaux de recherche. Il nous semble en effet important de voir de quelle façon le parcours historique de l'analyse des estimateurs d'erreur a influencé la recherche sur la génération et l'adaptation des maillages, et comment il a rendu possible et utile une comparaison des estimateurs d'erreur dans le cadre de la présente recherche. Le problème que l'on se propose d'étudier est donc la façon dont les estimateurs d'erreur sont construits. Nous nous concentrerons sur la construction de métriques discrètes, définies aux sommets du maillage, partant d'un estimateur de l'erreur d'interpolation basé sur l'évaluation du hessien. D'une façon générale, la construction des estimateurs d'erreur se situe à un niveau théorique, ou s'appuie sur des traitements des cas pratiques particuliers et donnent, par conséquent, très peu d'informations pratiques concernant leur évolution en fonction de changements du maillage. Plusieurs recherches ont été effectuées dans la construction des modèles d'estimateurs d'erreur, dont beaucoup d'entre elles traitent de modélisation adaptative par éléments finis. Par exemple, Mackerle (2001) fait un recensement, pour la période de 1990 à 2000, de 2177 publications sur le sujet de l'estimation d'erreur et de l'adaptation de maillages, partant des modèles numériques de type éléments-finis, dont 118 dédiées aux procédures de reconstruction des dérivées. Malgré le nombre impressionnant de publications se référant à ce sujet de recherche, le problème de l'estimation de l'erreur est toujours un sujet de recherche important.

Parmi les façons dont l'erreur peut être approximée, on retrouve les techniques de type

post-traitement, ou *a posteriori*, d'une solution de type élément-fini. Un estimateur *a posteriori* sert à analyser, via une approximation de l'erreur, la solution approximative obtenue à la suite d'un processus de calcul effectué. Ce type d'estimateur est, en général, facile à implémenter et il en existe pour plusieurs méthodes d'éléments finis. Les méthodes utilisées pour la construction d'un tel estimateur peuvent être considérées comme des méthodes de type global ou local. Une méthode de type global requiert la solution d'un système d'équations assemblé et résolu globalement, tandis que pour une méthode locale, des cellules d'éléments, i.e. les éléments voisins d'un sommet, sont alors utilisés dans le calcul de l'estimation de l'erreur.

La majorité de ces estimateurs d'erreurs sont basés sur la formulation éléments-finis du problème et donc traitent l'erreur due à l'approximation élément-fini du problème. Nous supposons que la composante la plus importante de l'erreur se comporte comme l'erreur d'interpolation de la solution u exacte sur notre maillage de référence. Ceci implique que l'erreur dans l'approximation du scalaire f prend la forme théorique de

$$C \cdot f^{(2)}(\xi) \cdot h^2,$$

où C est une constante inconnue, et h est le diamètre de notre élément. Les estimateurs d'erreur considérés ici nécessitent donc l'évaluation des dérivées, ce qui nous amène à étudier les méthodes de reconstruction des dérivées, où la reconstruction d'une matrice hessienne est nécessaire. Par conséquent, on se concentre sur les techniques qui reconstruisent une approximation continue des dérivées secondes d'une fonction linéaire par morceaux. L'intérêt qu'on y porte se concentre sur les techniques locales, car on veut garder un coût de calcul faible, proportionnel au nombre de sommets du maillage. Toutefois, on fait quand même une courte présentation des méthodes globales.

Les méthodes de reconstruction du hessien sont plus récentes et moins classiques. Il existe beaucoup de variantes, en particulier des combinaisons ou des extensions de méthodes locales de reconstruction de gradient. La plupart de ces méthodes se ra-

mènent à associer à chaque noeud une moyenne pondérée des dérivées aux éléments voisins. On a observé qu'il y a peu d'études numériques comparant le comportement de ces méthodes et en particulier le comportement à la frontière.

Un premier estimateur d'erreur basé sur l'évaluation du gradient a été construit par Babuška et Rheinboldt (1978), pour des problèmes 1D, à l'aide des éléments finis linéaires. En ce qui concerne les estimations de type *a posteriori* basées sur l'estimation des dérivées d'ordre supérieur d'un champ, on retrouve le travail de Zienkiewicz et Zhu (1987), qui proposent la construction d'une approximation continue des champs du gradient à partir d'une approximation du gradient de type élément-fini, en utilisant différentes méthodes incluant la méthode globale de la projection L^2 et la méthode de la condensation de la masse («mass-lumping»). De même, ce travail explore une méthode d'approximation discrète au sens des moindres carrés. Par la suite, en 1992 Zienkiewicz propose, en collaboration avec J. Z. Zhu, une technique discrète de reconstruction «superconvergente», considérant comme support de calcul une cellule d'éléments entourant un sommet. Depuis l'apparition de la technique de reconstruction des dérivées premières de Zienkiewicz et Zhu (1992), connue depuis comme la reconstruction classique de ZZ, on retrouve plusieurs travaux théoriques et/ou pratiques traitant de ce sujet. Ainsi, l'estimateur d'erreur de ZZ, pour ne donner que quelques exemples, est abondamment utilisé dans les recherches de Apel *et al.* (2004), Picasso (2003) et analysé par Zhang et Zhu (1995) et Bank et Xu (2003). Pour cette raison, dans les paragraphes suivants, on fait un petit rappel de cet estimateur pour ensuite se concentrer sur son impact sur les autres travaux de recherche.

Zienkiewicz et Zhu ont développé la technique de reconstruction superconvergente ZZ, basée sur une reconstruction éléments-finis et l'ont appliqué dans le cas des problèmes elliptiques d'ordre deux. Les expériences numériques de Zienkiewicz et Zhu montrent une superconvergence des dérivées premières reconstruites pour une variété d'éléments finis linéaires et quadratiques. Par exemple, une convergence d'un ordre

plus élevé est atteinte pour des éléments linéaires. De même, une caractéristique importante de la méthode est l'obtention d'une superconvergence pour des éléments quadratiques incluant les triangles à six noeuds et les quadrilatères à huit ou neuf noeuds. En particulier, pour des éléments triangulaires quadratiques la convergence atteinte pour la reconstruction nodale des dérivées est d'ordre $\mathcal{O}(h^4)$ et, ceci est rapporté pour la première fois. D'autre part, les auteurs montrent que cette technique n'est pas coûteuse car elle utilise localement des procédures discrètes d'approximation par moindres carrés. Brièvement, cette technique part de la solution éléments-finis de Galerkin u_h , définie comme approximation continue de la solution exacte u d'un problème elliptique d'ordre deux. Étant donnée l'approximation continue u_h , les gradients peuvent être calculés directement de u_h et on suppose ensuite que les gradients reconstruits appartiennent localement à la restriction d'une expansion polynômiale. Ainsi, pour les gradients reconstruits, deux expansions polynômiales, P_x et P_y , sont déterminées afin de mieux approximer les deux dérivées premières, u_x et u_y , de u . Les deux approximations polynômiales, P_x et P_y , sont obtenues par la résolution locale de deux systèmes linéaires d'équations au sens des moindres carrés, en tenant compte des gradients de u_h . Pour la résolution de ces systèmes linéaires au sens des moindres carrés, un ensemble de points de superconvergence S_j , est considéré sur chaque élément entourant un sommet N_i . Pour un nombre suffisant de points de superconvergence sur chaque élément, on peut obtenir par interpolation, pour chaque dérivée, une fonction globalement continue, pour laquelle la restriction à chaque cellule du maillage est l'approximation polynômiale fixée. On note qu'une description détaillée de cette technique est faite dans le chapitre suivant.

On a mentionné que l'estimateur ZZ a été utilisé dans plusieurs contextes. Pour faire une courte revue de ceux-ci, on considère l'article de Li et Zhang (1999), où les auteurs reprennent la reconstruction discrète par moindres carrés et celle de la projection L^2 , pour des approximations linéaires sur des triangles, et bilinéaires sur des rectangles. Ces reconstructions sont employées pour des problèmes elliptiques d'ordre deux dans

des domaines polygonaux convexes, où les auteurs les développent mathématiquement et démontrent, sur des maillages fortement réguliers, la superconvergence de ZZ , et de la projection locale L^2 . On y observe de même une revue des approches mathématiques effectuées sur des techniques de reconstruction superconvergente de type éléments-finis, basées sur des corrections apportées à des interpolations. En 1995, dans l'approche de Zhang et Zhu (1995), les auteurs montrent que l'estimateur d'erreur ZZ est asymptotiquement exact, ce qui est repris par Bank et Xu (2003), de façon théorique et numérique, et aussi par Picasso (2003), pour des maillages isotropes et anisotropes. Picasso, dans son approche, compare trois estimateurs d'erreur basés sur le gradient. Ainsi, Picasso compare l'estimateur de ZZ utilisant une projection L^2 au sens discret versus un estimateur isotrope basé sur le résidu et un nouvel estimateur anisotrope proposé par l'auteur. Dans ce contexte l'auteur propose une étude numérique basée sur des indicateurs d'efficacité pour des problèmes de type elliptique, convection-diffusion, et parabolique. De même, un algorithme d'adaptation basé sur l'estimation de l'erreur relative est proposé. Dans la même direction, on mentionne Apel *et al.* (2004), qui comparent, du point de vue numérique, plusieurs estimateurs d'erreur (Bank-Weiser, Ainsworth-Oden, Ainsworth-Babuska, Zienkiewicz-Zhu), basés sur les erreurs des gradients. Comme point de départ de cette étude, ils considèrent un problème analytique de type réaction-diffusion sur des maillages cartésiens ayant un raffinement directionnel et ensuite, ils comparent les estimateurs choisis avec l'erreur exacte définie comme la différence entre la solution exacte est celle de *Galerkin*. En ce qui concerne les estimateurs d'erreur basés sur la reconstruction du hessien, ils sont, plus récents et moins classiques. Toutefois, ce problème est connu, depuis une étude parue en 1987, et a été suivie d'un nombre assez grand d'articles qui en ont traité abondamment dans les années qui ont suivies. Parmi les travaux effectués dans ce sens, il faut mentionner ceux de Peraire *et al.* (1987), Vallet *et al.* (1991), Zienkiewicz et Wu (1994) et Castro-Diaz *et al.* (1995), qui recherchent un estimateur d'erreur directionnel contrôlant la génération des maillages triangulaires de *Delaunay*

ayant un fort étirement des éléments. On y trouve la définition d'une *carte métrique* permettant de contrôler les éléments à construire (éléments aplatis et allongés). En définissant l'espace métrique basé sur la taille et la direction d'étirement désirées, on peut générer un maillage isotrope de *Delaunay* dans cette espace, qui produira, en revenant de nouveau à l'espace physique, le maillage étiré désiré.

Les articles dédiés exclusivement à l'exploration des méthodes basées sur la reconstruction des dérivées secondes proposent en général la description d'une méthode, sans faire de lien avec celles qui ont été publiées, ce qui implique qu'il existe très peu d'études de comparaison. Une comparaison des méthodes d'adaptation anisotropes basées sur la reconstruction du hessien de la solution exacte est présentée dans Buscaglia *et al.* (1998), où deux estimateurs d'erreur sont pris en considération. Le premier s'appuie sur la «méthode la plus classique basée sur le hessien» de Vallet (1996), qui représente, pour les sommets internes, une formulation au sens faible des composantes du hessien, et pour la frontière, une extrapolation ou une imposition des valeurs des composantes du hessien déjà calculées. Buscaglia *et al.* (1998) proposent une amélioration de cette méthode pour le domaine interne et pour la frontière. Ainsi, pour le domaine interne, au lieu de la reconstruction du gradient de type éléments-finis, définie et utilisée dans la méthode originale (voir Vallet (1996)), ils utilisent une technique «superconvergente» de reconstruction du gradient (voir l'estimateur *ZZ*). Pour ce qui est de frontière, ils proposent une nouvelle procédure d'extrapolation des valeurs du hessien dans la direction de la normale, tandis que pour la composante tangentielle du hessien, ils ont observé qu'elle peut être évaluée numériquement, ce qui implique qu'il n'est pas nécessaire de l'extrapoler.

On retrouve une autre approche de comparaison des estimateurs d'erreur basés sur le hessien dans l'article de Pichelin *et al.* (2000), où les estimateurs considérés sont définis sur les arêtes du maillage. Ainsi, un premier estimateur d'erreur est défini pour le hessien calculé par une formulation faible. Le deuxième, proposé comme un nouvel estimateur, prend le hessien en valeur absolue. Le troisième est une estima-

tion par dérivation du gradient, tandis que le dernier est construit sur une méthode hiérarchique qui utilise une technique basée sur le résidu. Cette dernière technique est vue comme une décomposition hiérarchique d'un espace des éléments finis plus riche, i.e. l'espace des approximations quadratiques par élément, que celui dans lequel une première approximation de type éléments-finis est effectuée, i.e. l'espace des approximations linéaires par élément. L'espace enrichi utilisé contient à la fois l'espace des fonctions continues et linéaires, où se trouve la solution initiale qui est fixée, et l'espace des fonctions continues et quadratiques par élément, associées au milieu des arêtes, où les corrections sont évaluées. Ce dernier estimateur est aussi défini sur les arêtes du maillage et il est construit à partir de la correction évaluée aux points milieux des arêtes. En résumé, les estimateurs étudiés dans cet article sont des estimateurs construits sur des arêtes et donc, pas sur un hessien continu. Il est démontré, de même, sur un exemple, que la condensation de masse («mass-lumping») diffuse le hessien dans le cas des deux premiers estimateurs.

Kunert (2002) fait une analyse de l'adaptation de maillage basée sur le hessien et compare, pour le problème de *Poisson*, les estimateurs directionnels basés sur le résidu de Kunert et Grosman. Ainsi, il investigate certaines stratégies d'approximation du hessien dans le but d'extraire des informations concernant la taille et les directions d'étirement optimales des éléments à construire pour des maillages anisotropes. Dans cette idée, il pose un certain nombre d'hypothèses heuristiques d'une part, sur le comportement du hessien au travers des éléments adjacents et les interpolations, et d'autre part, sur le choix d'un paramètre local, partant d'un estimateur d'erreur, qui permet de définir la taille des éléments à construire et de comparer deux itérations consécutives du processus d'adaptation de maillages, i.e. le nouveau maillage adapté à partir du maillage antérieurement adapté. Des exemples numériques en trois dimensions (problème de *Poisson*, problème de réaction-diffusion) sur des champs analytiques, montrent la validité des hypothèses heuristiques proposées pour contrôler l'adaptation des maillages.

On a mentionné, au début de la revue de la littérature dédiée aux reconstructions basées sur le hessien, qu'il y a des articles qui proposent ou utilisent une méthode de reconstruction sans faire de lien avec celles qui ont été publiées. Beaucoup d'entre elles sont des démarches particulières à des reconstructions des dérivées premières. Dans cette catégorie on énumère les papiers de Hecht (2003), Guibault *et al.* (2002), Manole *et al.* (2003), Alauzet (2003) et Zhang (2001).

Hecht (2003) propose une méthode locale permettant de reconstruire un hessien continu par élément à partir d'une solution discrète afin d'approximer le hessien numérique de la solution exacte. Cette méthode est basée sur une double projection locale L^2 , où la première projection est faite pour les dérivées premières et qui est, ensuite, suivie par une deuxième projection pour les dérivées secondes. La façon dont le hessien est reconstruit par cette méthode est équivalente à la façon dont on effectue une double projection L^2 globale avec un traitement de la matrice de masse par une condensation de la masse («mass-lumping»). Cette méthode de reconstruction est reprise de façon mathématique par Alauzet (2003) dans sa thèse de doctorat où, de plus, on retrouve la proposition d'une technique de calcul du hessien par une minimisation faite sur les arêtes. L'évaluation de la matrice hessienne est réalisée à l'aide d'un développement de *Taylor*, suivi de la résolution d'un système linéaire par une approximation au sens des moindres carrés. Cette méthode prend en considération une boule contenant toutes les arêtes connectées à un sommet servant comme support local de calcul du hessien selon un développement de *Taylor*.

Une autre technique de reconstruction du hessien utilisée dans plusieurs articles, (voir par exemple Guibault *et al.* (2002) et Dompierre *et al.* (2003)), a été élaborée par P. Labbé. Elle consiste à appliquer une version modifiée de la technique de reconstruction de Zienkiewicz-Zhu, par l'introduction d'une dérivation dans l'estimateur de *ZZ*. Par cette méthode une approximation continue et linéaire par morceaux du hessien est reconstruite à partir d'une solution discrète. Premièrement, la méthode reconstruit localement une approximation de chaque composante du gradient sur la cellule d'un

sommet, définie comme l'ensemble des éléments connectés au sommet. Cette approximation est linéaire et elle est appliquée à un ensemble de points d'échantillonnage sur chaque élément appartenant à la cellule. Une fois les composantes du gradient reconstruites, la reconstruction des dérivées d'ordre deux se réalise par l'introduction d'un opérateur de dérivation dans la reconstruction du gradient. Alors, la modification apportée à la technique de *ZZ* réside dans l'idée que la reconstruction locale du gradient calculé n'est pas utilisée pour évaluer les valeurs nodales, mais plutôt, par une dérivation de celles-là, les dérivées secondes nodales sont reconstruites.

La technique proposée par Zhang (2001), implique une reconstruction de type quadratique des dérivées d'ordre deux. Celle-ci se réalise au niveau local, car elle reconstruit le hessien-nodal à l'aide d'une approximation au sens des moindres carrés. La double dérivation de l'approximation quadratique choisie fournit les valeurs nodales du hessien. Pour l'implémentation de cette méthode, il est nécessaire de considérer un ensemble de points qui va pouvoir satisfaire le critère de la minimisation par moindres carrés. Dans ce sens, l'auteur propose de tenir compte d'une «grande cellule» comprenant au moins deux niveaux de voisinage pour un sommet donné, c.-à.-d. les voisins du sommet et les voisins des voisins du sommet. Ce processus de calcul est appliqué à chaque sommet du maillage et ensuite, par une interpolation des valeurs nodales calculées, une approximation linéaire et continue du hessien par élément est obtenue. Dans l'article de Manole *et al.* (2003), l'auteur présente un calcul d'écoulement visqueux sur des maillages hybrides, où l'estimateur d'erreur est construit à partir d'une formulation de type *Gauss-Ostrogradski*. Ce type d'estimateur reconstruit, par une double application de la formulation du théorème de la divergence, une approximation continue et linéaire du hessien. Cette méthode est aussi locale, car elle est utilisée sur un volume de l'espace comprenant tous les éléments entourant un sommet, ce qui revient à associer à chaque sommet une moyenne pondérée des gradients aux éléments voisins.

Comme on a vu ci-dessus, un point clef dans la construction d'un estimateur d'erreur,

qui permettra le contrôle du processus d'adaptation des maillages, est l'évaluation de la matrice hessienne. On a constaté également que pour la construction d'un bon estimateur d'erreur, il est nécessaire d'avoir une bonne évaluation de la matrice hessienne et que, pour cette raison, il y a plusieurs travaux qui sont dédiés à ce sujet. Pour passer en revue les types d'estimateurs d'erreur basés sur l'évaluation du hessien décrits brièvement ci-dessus, on constate que la plupart d'entre eux s'appuient sur des modélisations de type éléments-finis, sur des formulations au sens faible (variantes de la formule de *Green*), sur des développements de *Taylor*, ou sur des variantes de construction d'une conique. Comme on peut voir, il existe une grande variété de méthodes permettant le traitement et l'évaluation du hessien et, de même, on retrouve des études numériques montrant, pour des cas particuliers, leur validité. Cependant, suite à cette revue de la littérature, en ce qui concerne les travaux faits sur l'estimation d'erreur, on observe qu'aucune comparaison numérique n'a été faite au niveau des méthodes de reconstruction du hessien à part de *Buscaglia et al.* (1998), qui reconstruit le hessien sur l'élément, et de *Pichelin et al.* (2000) qui reconstruit le hessien sur les arêtes. Ainsi, l'enjeu de cette recherche est inédit, au sens où elle se propose d'explorer les méthodes de reconstruction des dérivées secondes dans le but de contribuer à une construction théorique et pratique permettant de les comparer de manière systématique. Mais cette recherche comporte également une visée pragmatique. En restant proche de certaines techniques de reconstruction et en tenant compte de leurs difficultés ou contraintes d'applicabilité, en particulier aux frontières, cette recherche voudrait mettre en évidence leurs comportements à un changement des conditions géométriques du maillage (plusieurs types de maillages) et de champs analytiques (plusieurs type de fonctions analytiques), et en même temps, être un guide menant à solutionner certains problèmes pratiques dans l'adaptation de maillages. Dans cet esprit, un grand nombre d'exemples numériques en deux dimensions, sur une variété de maillages et de champs analytiques, permet de montrer la validité de cette approche dans le contexte de l'adaptation de maillages.

CHAPITRE 2

LES MÉTHODES DE RECONSTRUCTION

L'objectif de ce travail est d'étudier les erreurs d'interpolation pour des fonctions appartenant aux espaces de *Sobolev*. Ces espaces sont à la base de la résolution d'un bon nombre de problèmes concernant les équations aux dérivées partielles notamment par éléments finis. On s'intéresse ici, plus particulièrement, à présenter les espaces les plus utilisés en pratique. On rappelle, sans entrer dans tous les détails, quelques caractéristiques de ces espaces et on introduit un certain nombre d'outils mathématiques dont on aura besoin dans les sections suivantes. Pour plus de précisions, on peut se référer à Fortin et Garon (2000). Ainsi, on introduit la définition de l'espace fonctionnel $H^1(\Omega)$ et du sous-espace $H_0^1(\Omega)$ et on présente un résultat d'approximation ayant un impact important dans la modélisation numérique par les éléments finis. Ensuite, on introduit les éléments finis de type *Lagrange* et les interpolations qui seront utilisées. Ces notions préparent le «terrain» mathématique pour la description des méthodes de reconstruction basées sur le hessien d'un champ scalaire. On rappelle qu'on s'intéresse aux méthodes qui consistent à reconstruire une approximation linéaire et continue des dérivées d'un champ scalaire. En partant de ces idées, cinq types de reconstruction sont choisis et décrits dans les sections suivant la partie dédiée aux concepts de base théoriques. La description de ces reconstructions est faite en détail à la section (2.5), où on retrouve l'ensemble de méthodes : l'approximation linéaire, l'approximation quadratique, la double projection L^2 , la double approximation linéaire et la double intégration par parties. Outre ces descriptions, on retrouve en plus la technique classique de reconstruction du gradient de ZZ qui, en effet, est à la base de certaines reconstructions du hessien. On propose donc une revue des concepts mathématiques et des techniques de reconstruction les plus utilisées.

2.1 Les dérivées dans $L^1_{loc}(\Omega)$

Soit Ω un ouvert borné de $\mathbb{R}^n$ ($n \leq 3$ en pratique), de frontière régulière $\partial\Omega$, c.-à.-d. $\partial\Omega = \bigcup_i C_i$, où $C_i = \{x \in \mathcal{B}_i | \mathcal{B}_i \text{ est une boule et } f_i(x) = 0, f_i \text{ est lisse}\}$. On désigne par $\mathcal{D}(\Omega)$, l'espace vectoriel des fonctions infiniment dérivables dans $\mathbb{R}^n$, et nulles hors d'un compact de Ω . $L^1_{loc}(\Omega)$ est l'espace vectoriel des fonctions intégrables sur tous les compacts dans Ω . Considérons une fonction $f \in L^1_{loc}(\Omega)$. S'il existe $g \in L^1_{loc}(\Omega)$ vérifiant

$$\int_{\Omega} f \frac{\partial \varphi}{\partial x_i} dx = - \int_{\Omega} g \varphi dx, \quad \forall \varphi \in \mathcal{D}(\Omega),$$

alors g permet d'étendre la notion de dérivée à $f \in L^1_{loc}(\Omega)$. Par exemple, pour $f \in C^1(\Omega)$, une intégration par parties sur la dérivée partielle en x_i donne

$$\int_{\Omega} f \frac{\partial \varphi}{\partial x_i} dx = - \int_{\Omega} \frac{\partial f}{\partial x_i} \varphi dx + \int_{\partial\Omega} f \mathbf{n}_i \varphi ds = - \int_{\Omega} \frac{\partial f}{\partial x_i} \varphi dx, \quad \forall \varphi \in \mathcal{D}(\Omega), \quad (2.1)$$

et on remarque que $g = \partial f / \partial x_i$ est la dérivée habituelle de f . D'une manière générale, on dit que la fonction de plusieurs variables $f(x_1, x_2, \dots, x_n) \in L^1_{loc}(\Omega)$ admet une dérivée partielle (au sens des distributions) $\partial^\alpha f = \frac{\partial^\alpha f}{\partial x_1^{\alpha_1} \partial x_2^{\alpha_2} \dots \partial x_n^{\alpha_n}}$ avec $|\alpha| = \alpha_1 + \alpha_2 + \dots + \alpha_n$, si $\partial^\alpha f$ satisfait l'identité (2.2).

$$\int_{\Omega} f \partial^\alpha \varphi dx = (-1)^{|\alpha|} \int_{\Omega} \partial^\alpha f \varphi dx, \quad \forall \varphi \in \mathcal{D}(\Omega). \quad (2.2)$$

2.2 L'espace de Sobolev $H^1(\Omega)$

Définition : On note $L^2(\Omega) \subset L^1_{loc}(\Omega)$ l'espace des fonctions réelles de carré intégrable sur un compact Ω . $L^2(\Omega)$ est un espace fonctionnel linéaire.

Définition : Un espace fonctionnel linéaire complet muni d'un produit scalaire qui induit une norme est un espace de *Hilbert*.

Prenons maintenant l'espace de *Sobolev* $H^1(\Omega)$, défini par :

$$H^1(\Omega) = \left\{ u \in L^2(\Omega) \mid \frac{\partial u}{\partial x_i} \in L^2(\Omega), i = 1, \dots, n \right\}$$

et on définit sur $H^1(\Omega)$ le produit scalaire, $(u, w)_{1,\Omega}$ et la norme, $\| u \|_{1,\Omega}$:

$$(u, w)_{1,\Omega} = \int_{\Omega} \left(uw + \sum_{i=1}^n \frac{\partial u}{\partial x_i} \frac{\partial w}{\partial x_i} \right) dx, \quad (2.3)$$

$$\| u \|_{1,\Omega} = (u, u)_{1,\Omega}^{1/2}. \quad (2.4)$$

On dit que l'espace $H^1(\Omega)$ est complet parce que toute suite de *Cauchy* de $H^1(\Omega)$ est convergente dans $H^1(\Omega)$. Comme $H^1(\Omega)$ satisfait les critères (2.3) et (2.4), on peut énoncer, sans donner la démonstration, le résultat suivant :

Théorème : $H^1(\Omega)$ est un espace de Hilbert.

Définition : Un des sous-espaces de $H^1(\Omega)$, très utile en pratique, est défini par :

$$H_0^1(\Omega) = \{ u \in H^1(\Omega) \mid u|_{\partial\Omega} = 0 \}.$$

2.3 Un résultat d'approximation

Les techniques d'approximation par éléments finis utilisent des sous-domaines de forme géométrique simple. Ces sous-domaines peuvent être des intervalles, des triangles, des quadrilatères ou tétraèdres, tout dépendant des préférences de l'utilisateur et de la dimension de l'espace considéré. L'idée de base des techniques d'approximation par éléments finis est d'utiliser des fonctions polynomiales sur chaque sous-domaine. Pour que ces approximations appartiennent en général à $H^1(\Omega)$, il faut s'assurer de la continuité de ces approximations à la frontière des sous-domaines. Ces idées font l'objet de la note suivante (voir Fortin et Garon (2000)).

Note N_1 : Soit un domaine Ω constitué de sous-domaines Ω_i et soit une fonction

u telle que sa restriction à chaque sous-domaine Ω_i est un polynôme de degré n . On suppose de plus que les polynômes de degré n sont dans $H^1(\Omega_i)$ quel que soit i . Alors si la fonction u est continue à la frontière entre les sous-domaines Ω_i , la fonction u appartient à l'espace $H^1(\Omega)$.

2.4 Les éléments finis

On vient de préciser, dans la section précédente, le support géométrique sur lequel repose une technique d'approximation de type éléments-finis. Les éléments finis se définissent donc dans le cadre d'un processus de subdivision, connue comme la *discretisation* d'un domaine. Il s'agit du résultat de la décomposition d'un domaine en plusieurs sous-domaines compatibles et d'intérieur disjoint. La connectivité des sous-domaines se fait à l'aide des noeuds qui sont des points choisis dans le domaine considéré. Ces sous-domaines sont dits *éléments-finis* ou *éléments*, et ils sont des modèles de discrétisation pour les champs du problème physique. À l'intérieur de ces éléments, ces champs ont une variation selon une lois imposée et qui dépend des valeurs nodales. Autrement dit, ils reproduisent, à une échelle plus petite (3 noeuds pour un triangle, 4 pour un tétraèdre, etc.), une ou plusieurs variables dans le domaine de définition du problème. Habituellement, les variables sont approximées au niveau des noeuds de l'élément. Cependant, il y a des cas où des conditions ou des paramètres supplémentaires sont définis à l'intérieur de l'élément. On dit qu'une structure nodale de l'élément est suffisante, si elle peut représenter la variation d'un champ quelconque en utilisant exclusivement :

- un ensemble de valeurs nodales de la variable à approximer, ou de ses dérivées jusqu'à un certain ordre ;
- un ensemble de fonctions associées à chaque type d'élément fini.

La construction d'un modèle de type *éléments-finis* implique :

- La sélection d'un nombre fini d'éléments. Pour le cas unidimensionnel, le choix est

simple, les éléments sont des intervalles, tandis qu'en dimension 2 et 3 le choix est multiple (triangles, quadrilatères, tétraèdres etc.) ;

- La sélection d'un nombre fini de points (nœuds) avec des coordonnées connues dans chaque élément. Les valeurs des variables à approximer en ces points sont les valeurs nodales ;
- La caractérisation des éléments sur le plan local. Chaque élément se détermine, localement, par les coordonnées des nœuds qui le modélisent et, aussi, par ses valeurs nodales ;
- La définition des relations de discrétisation du domaine. On entend par cela la connectivité des éléments ou la définition des relations d'appartenance des nœuds globaux aux éléments. On identifie deux systèmes de référence mis en correspondance par les relations de discrétisation suivantes :
 - un système global, associé au domaine d'analyse considéré ;
 - un système local ou élémentaire, associé à chaque élément.

L'ensemble de fonctions associé à l'élément fini, définit les fonctions d'interpolation permettant l'approximation des variables sur l'élément fini à partir des valeurs nodales de la variable et/ou de ses dérivées jusqu'à un certain ordre. À partir des caractéristiques nodales, il est possible de concevoir plusieurs types de fonctions d'interpolation (trigonométriques, logarithmiques, etc.), mais les fonctions polynômiales sont préférées, en raison de la simplicité de leur dérivation et de leur intégration. Dans les sections suivantes, on fait un petit rappel des techniques classiques d'interpolation de type *Lagrange*.

Les fonctions de *Lagrange* sont des polynômes à coefficients réels de degré inférieur ou égal à k , ensemble noté P^k . La construction des fonctions de *Lagrange* fait appel à la structure nodale de l'élément et aux valeurs nodales des interpolants. Pour une interpolation linéaire sur un triangle, par exemple pour $k = 1$, il est naturel de considérer comme structure nodale les 3 sommets du triangle, tandis que pour $k = 2$, on prend les 3 sommets et les 3 milieux des côtés, bien que ce ne soit pas obligatoire. Une

fois le degré d'interpolation choisi, les noeuds d'interpolation deviennent les noeuds de calcul où on identifie le processus de calcul. Pour $k = 1$, on identifie 3 noeuds de calcul qui sont les sommets de l'élément, et 6 noeuds de calcul sont utilisés pour $k = 2$, où on prend de plus les 3 milieux des côtés.

Pour obtenir une approximation d'une fonction sur un domaine discrétisé, il faut obtenir une approximation nodale de la solution et il faut s'assurer que l'approximation employée respecte la note N_1 . Tous ces aspects sont détaillés dans la construction des fonctions d'interpolation de *Lagrange*.

2.4.1 L'élément fini de Lagrange

D'une manière générale, la notion d'élément fini de *Lagrange* exige les conditions suivantes :

- $K \subset \Omega$, un élément connexe et d'intérieur non-vidé ;
- F est un espace vectoriel de fonctions continues définies sur K dans $\mathbb{R}$;
- S est l'ensemble $a_1, \dots, a_N$ de noeuds distincts appartenant à K et N est le nombre des noeuds par élément.

On dit que le triplet (K, F, S) est un élément fini de *Lagrange* s'il satisfait les conditions suivantes :

$$\begin{cases} \dim F = N; \\ (\exists!) f_1, \dots, f_N \in F \text{ tels que } f_i(a_j) = \delta_{ij}, (i, j = 1, \dots, N). \end{cases} \quad (2.5)$$

Les fonctions $f_1, \dots, f_N$ forment la base canonique de F relative aux noeuds de S .

On définit l'interpolé de $v \in C^0(K)$ sur K , la fonction $\Pi_K v \in F$ vérifiant $(\Pi_K v)(a_i) = v(a_i)$. Grâce à la base f_i , le polynôme Π_K est donné explicitement par

$$\Pi_K v = \sum v(a_i) f_i. \quad (2.6)$$

2.4.2 L'élément fini de référence

Soit un élément fini $(\mathcal{K}, \Phi, \Sigma)$ dit de *référence*, et considérons l'application T , continue et bijective, et de réciproque T^{-1} , définies comme

$$\begin{aligned} T : \xi \in \mathcal{K} &\longrightarrow x(\xi) \in K; \\ T^{-1} : x \in K &\longrightarrow \xi(x) \in \mathcal{K}. \end{aligned}$$

On désigne par K et S les images de $\mathcal{K}$ et Σ par la transformation T . Si φ est une fonction définie sur $\mathcal{K}$, on appelle *l'image de φ par T* la fonction f définie sur K par

$$f = T(\varphi) \iff f(x) = \varphi(\xi) \text{ si } x = T(\xi).$$

T étant bijective les triplets $(\mathcal{K}, \Phi, \Sigma)$ et (K, F, S) sont des éléments finis de *Lagrange équivalents*. À partir de $(\mathcal{K}, \Phi, \Sigma)$ on construit l'élément fini (K, F, S) , image du précédent par la transformation T .

Les variables $x = (x_i)$ portent le nom de *coordonnées globales* et les variables $\xi = (\xi_i)$, celui de *coordonnées locales*. Si la transformation $x = T(\xi)$ est continûment différentiable sur $\mathcal{K}$, et si la matrice *jacobienne* de la transformation que l'on note $DT = \left(\frac{\partial x}{\partial \xi} \right)$, est de déterminant non nul

$$\det \frac{\partial x}{\partial \xi} \neq 0,$$

alors, avec la notation de la transposée de l'inverse de la matrice *jacobienne* $(DT)^{-t}$, $(DT)^{-t} = \left| \frac{\partial x}{\partial \xi} \right|^{-t}$, on a $f = T(\varphi) \in C^1(K)$ si et seulement si $\varphi \in C^1(\mathcal{K})$, avec

$$\nabla f(x) |_{x=x(\xi)} = (DT)^{-t} \nabla \varphi(\xi). \quad (2.7)$$

On a $f \in L^2(K)$ si et seulement si $\varphi \left| \det \frac{\partial x}{\partial \xi} \right| \in L^2(\mathcal{K})$, avec

$$\int_K f(x) dx = \int_{\mathcal{K}} \varphi(\xi) \left| \det \frac{\partial x}{\partial \xi}(\xi) \right| d(\xi). \quad (2.8)$$

La transformation T n'est pas choisie arbitrairement. En pratique, elle devrait transformer les composantes de l'élément fini de référence $(\mathcal{K}, \Phi, \Sigma)$ en des composantes de l'élément fini (K, F, S) . Étant donné l'ensemble de points de $\Sigma = \{\alpha_i\}_{i=1}^N$, on exige que la relation $a_i = T(\alpha_i)$ soit satisfaite, ou, en d'autres termes, on souhaite que par la transformation T on obtienne les composantes de S . Il s'ensuit que

$$T : \xi \in \mathcal{K} \longrightarrow x = \sum_{i=1}^N \varphi_i(\xi) a_i \in K,$$

où les φ_i sont les fonctions de la base de Φ . Pour définir les $v \in C^0(K)$, nous avons de (2.6) que

$$(\Pi_K v)(x) \big|_{x=x(\xi)} = \sum_{i=1}^N v(a_i) f_i(x) \big|_{x=x(\xi)} = \sum_{i=1}^N v(a_i) \varphi_i(\xi). \quad (2.9)$$

2.4.3 L'interpolation sur le domaine

Pour faciliter la présentation du concept mathématique suivant, on adopte des conventions de langage pour les géométries 2D, où on dénote par l'élément, *le triangle*, par la face de l'élément, *l'arête* du triangle et par le sommet de l'élément, *le sommet* du triangle. Le domaine est donc Ω décomposé en éléments, K . Tous les éléments K sont des éléments compacts :

- d'intérieurs non vides disjoints;
- avec de faces communes quand ils sont adjacents, ou entièrement situés sur $\partial\Omega$.

La réunion des K forme T_h , qui est appelé *maillage* de Ω . Sur chaque élément $K \in T_h$, on construit un élément fini (K, F_K, S_K) . Pour deux éléments adjacents K_1 et K_2 admettant les mêmes noeuds sur la face commune, on cherche donc à construire

une fonction ψ continue sur $K_1 \cup K_2$, de telle sorte que ses restrictions aux éléments K_1 et K_2 , soit $\psi|_{K_1} \in F_{K_1}$, et $\psi|_{K_2} \in F_{K_2}$, coïncident sur la face commune. La construction des fonctions ψ , continues sur $\bigcup_{K_i \in T_h} K_i$, permet de définir globalement l'opérateur d'interpolation (2.6).

On définit l'opérateur global $\Pi_h : v \in C^0(\Omega) \longrightarrow \Pi_h v \in H^1(\Omega)$ tel que

$$\Pi_h v|_K = \Pi_K v, \quad \forall K \in T_h. \quad (2.10)$$

Si on considère l'ensemble des noeuds du maillage T_h , qu'on les notera N_i , alors les fonctions $\psi_i \in H^1(\Omega)$ vérifiant $\psi_i(N_j) = \delta_{ij}$, permettent d'écrire l'opérateur Π_h :

$$\Pi_h v = \sum_i v(N_i) \psi_i, \quad \forall v \in C^0(\Omega). \quad (2.11)$$

Les fonctions ψ_i sont associées aux noeuds N_i . Elles sont égales à 1 en un seul noeud N_i et nulles dans les autres noeuds. Elles sont définies à l'aide des fonctions de base relatives au noeud N_i provenant de chaque élément qui le partage. Prenons comme

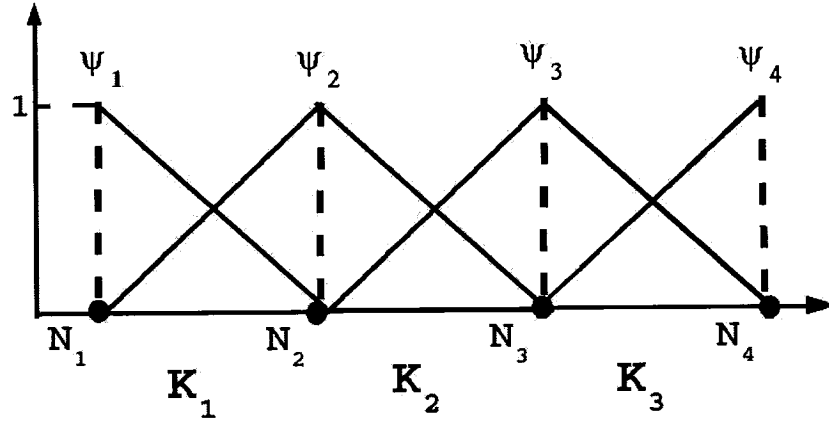


FIGURE 2.1 Support des fonctions d'interpolation linéaires par élément

exemple le cas des fonctions linéaires par élément pour des éléments en 1D conforme figure 2.1, où on voit le *support* des fonctions d'interpolation. La restriction de la

relation (2.11) à un élément K n'est rien d'autre que l'interpolation locale (2.6).

2.4.4 Éléments finis triangulaires

Prenons maintenant le cas des éléments finis linéaires de *Lagrange*, (voir la figure 2.2), et considérons l'élément triangulaire de référence $(\mathcal{K}, \Phi, \Sigma)$ défini comme suit :

- $\mathcal{K}$: le triangle de sommets $\alpha_1(0, 0)$, $\alpha_2(1, 0)$, $\alpha_3(0, 1)$;
- Φ : $P_1 = a\xi + b\eta + c$, où $a, b, c \in \mathbb{R}$, les polynômes de degré 1 ;
- Σ : $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$, l'ensemble des sommets de l'élément $\mathcal{K}$.

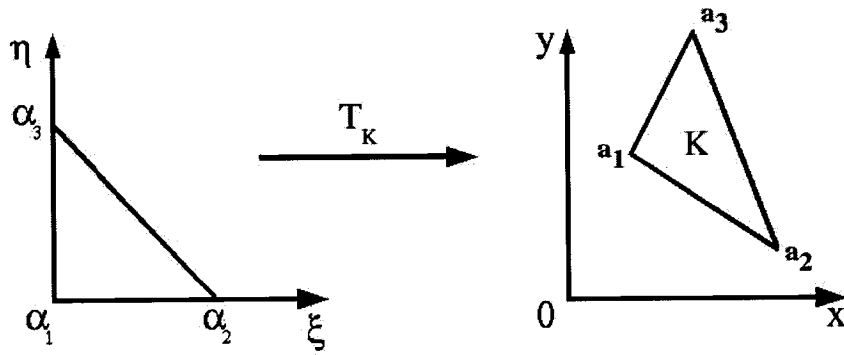


FIGURE 2.2 Éléments finis triangulaires de type *Lagrange* à trois noeuds. Gauche : l'élément de référence ; droite : l'élément réel.

On a $\dim \Phi = 3$ et les fonctions de base canonique sont :

$$\varphi_1(\xi, \eta) = 1 - \xi - \eta; \quad \varphi_2(\xi, \eta) = \xi; \quad \varphi_3(\xi, \eta) = \eta.$$

Pour l'ensemble des sommets $S = \{a_1(x_1, y_1), a_2(x_2, y_2), a_3(x_3, y_3)\}$ appartenant au triangle $K = T(\mathcal{K})$, la transformation $T : (\xi, \eta) \in \mathcal{K} \longrightarrow (x, y)$ s'écrit

$$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (1 - \xi - \eta)x_1 + \xi x_2 + \eta x_3 \\ (1 - \xi - \eta)y_1 + \xi y_2 + \eta y_3 \end{pmatrix}. \quad (2.12)$$

Si $v \in C^0(K)$ et $(x, y) = T(\xi, \eta)$ nous avons que

$$(\Pi_K v)(x, y) = (1 - \xi - \eta)v(a_1) + \xi v(a_2) + \eta v(a_3). \quad (2.13)$$

La relation (2.13) implique que :

- lorsque v est nul aux noeuds situés sur un côté de K , ceci implique que $\Pi_K v$ est nul sur ce côté ;
- pour deux triangles adjacents K_1 et K_2 , il y a raccordement continu des interpolés Π_{K_1} et Π_{K_2} sur le côté commun.

L'espace $\Phi = \{\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3\}$ satisfaisant (2.5), que l'on note P^1 , constitue l'espace des polynômes de degré 1 dont la base est l'ensemble des polynômes de *Lagrange*. La transformation T , dans l'espace P^1 , est une transformation bijective continue si K n'est pas dégénéré. Les relations (2.12) et (2.13) définissent les transformations P^1 de *Lagrange*.

2.5 Les méthodes de reconstruction testées

En se basant sur ces considérations théoriques, on se propose de faire la revue des méthodes de reconstruction des dérivées secondes parmi les plus utilisées dans la littérature spécialisée. Dans les sous-sections suivantes, on décrit cinq types de reconstructions des dérivées secondes d'une fonction linéaire par morceaux. Ces reconstructions sont : la simple approximation linéaire, *SAL* ; l'approximation quadratique, *AQ* ; la double projection L^2 , *DPL2* ; la double approximation linéaire, *DAL* ; et la double intégration par parties, *DIP*.

2.5.1 Les notations

Soit T_h le maillage d'un domaine de calcul $\Omega \in \mathbb{R}^2$. On note $V_h^k = \{v \in H_0^1(\Omega) \mid \forall K \in T_h, v|_K \in P^k\}$ l'espace associé à l'élément fini P^k de Lagrange. Dans le reste de ce document nous ne considérons que V_h^1 . Étant donnée u_h , la solution discrète sur T_h , on veut reconstruire une approximation linéaire par morceaux de ses dérivées secondes. La reconstruction d'une telle approximation linéaire par morceaux repose sur une transformation de fonctions de l'espace V_h^1 dans l'espace V_h^1 . On appelle $\mathcal{H}$ l'opérateur de reconstruction des dérivées secondes, qui est formalisé, en deux dimensions, par

$$\begin{aligned} \mathcal{H} : V_h^1 &\longrightarrow (V_h^1)^3, \\ u_h &\longmapsto (\mathcal{H}_{xx}(u_h), \mathcal{H}_{xy}(u_h), \mathcal{H}_{yy}(u_h)). \end{aligned} \tag{2.14}$$

Cet opérateur $\mathcal{H}$ retourne trois fonctions linéaires par morceaux, c.-à-d. de V_h^1 , définissant les composantes des dérivées secondes reconstruites de la fonction u_h .

2.5.2 La *régularité* de la solution et la norme de l'erreur

La reconstruction des dérivées secondes de u_h qui vient d'être formalisée ci-dessus requiert pourtant des hypothèses supplémentaires sur la solution, *exacte* ou *approchée*, du problème considéré (voir Remacle *et al.* (2000) et Donoho et Grimes (2003)). C'est donc avec l'imposition de telles hypothèses que les reconstructions (2.14) sont concevables et que la construction d'un estimateur d'erreur basé sur l'évaluation du hessien est plausible.

Sur le plan théorique la construction d'un estimateur d'erreur basé sur le hessien exige que la solution soit suffisamment *régulière* sur le domaine de calcul pour que ses dérivées secondes puissent être reconstruites. Bien entendu, au sens classique, $\partial^2 u / \partial x^2$ n'existe que si u est deux fois dérivable. Cependant, dans le contexte des éléments finis

on utilise fréquemment la dérivée d'une fonction au sens des distributions, même si la fonction possède des discontinuités, où, donc, elle n'est pas dérivable. Cette dérivée fait intervenir à part la dérivée classique de la fonction, partout où elle existe, des distributions de *Dirac* (voir Fortin et Garon (2000)). Ainsi, lors des modélisations de type *élément-fini*, les dérivées des fonctions sont prises au sens des distributions. C'est donc dans ce contexte que l'on impose l'existence des dérivées d'une fonction. Par exemple, pour un problème elliptique avec des conditions limites de *Dirichlet* sur un domaine Ω , de frontière régulière $\partial\Omega$, et pour une fonction $f \in L^2(\Omega)$, le problème d'élément-fini se résume à trouver une fonction u de Ω qui est solution de :

$$\begin{cases} -\Delta u = f, & \text{sur } \Omega, \\ u = 0, & \text{sur } \partial\Omega \end{cases} \quad (2.15)$$

Théoriquement dans le cadre de la résolution des EDP d'ordre 2, l'espace de travail est $H^1(\Omega)$, ou ses sous-espaces comme le serait $H_0^1(\Omega)$ pour le problème particulier (2.15). Alors l'analyse de l'erreur et de la convergence de la solution *élément-fini* d'un problème d'EDP d'ordre 2 sont bien reflétées par l'utilisation de la norme adéquate à l'espace de travail. Comme dans cette approche on s'intéresse à des modélisations par des éléments finis linéaires on pourrait expliciter la définition de la norme de $H^1(\Omega)$ donnée par (2.4) de la façon :

$$\| u - u_h \|_{1,\Omega} = \left(\| u - u_h \|_{0,\Omega}^2 + \| \nabla u - \nabla u_h \|_{0,\Omega}^2 \right)^{1/2} \leq Ch \| u \|_{2,\Omega} . \quad (2.16)$$

La relation (2.16) ne fait que de ramener l'analyse de la convergence de la solution *élément-fini* u_h , à un problème concernant la régularité de la solution exacte u . Dans la relation (2.16) on identifie d'une part h , la *taille* du maillage et C , une constante indépendante de h , et d'autre part $\| u \|_{2,\Omega}$ qui est la norme de l'espace $H^2(\Omega)$ de *Sobolev*. La définition de l'espace $H^2(\Omega)$ requiert que les propriétés de $H^1(\Omega)$ soient satisfaites, et, en plus que les dérivées secondes soient dans $L^2(\Omega)$. Quant à la notion

de la *taille* du maillage, une présentation détaillée sera donnée à la section 3.3.

En analysant l'expression (2.16) on observe qu'au moins au niveau théorique, une convergence linéaire en norme $H^1(\Omega)$ est obtenue si la solution u est en $H^2(\Omega)$. Formellement, l'appartenance de la solution des problèmes d'EDP d'ordre 2 à l'espace $H^1(\Omega)$ ou ses sous-espaces (ex. (2.15)) est assurée. Par contre, une supposition que la solution soit de plus en $H^2(\Omega)$, n'est pas garantie.

Cependant, l'objectif de ce travail est la construction des fonctions des dérivées secondes $(\mathcal{H}_{xx}, \mathcal{H}_{xy}, \mathcal{H}_{yy})$ en $(V_h^1)^3$ d'une solution discrète. L'expression (2.14) exige alors que la solution discrète pour laquelle le hessien est calculé soit assez régulière pour que ses dérivées secondes existent et soient dans $L^2(\Omega)$. L'hypothèse qu'on fait ici est que la solution appartienne en fait à l'espace $H^2(\Omega)$. En tenant compte que $H^2(\Omega) \subset H^1(\Omega)$ on déduit facilement qu'une telle solution est plus régulière que celle de $H^1(\Omega)$. Cette hypothèse nous confère donc une mesure valide sur Ω pour les dérivées secondes qui sera définie à la section 3.4, et exige, en même temps, une attention particulière quant aux choix des cas analytiques que nous allons considérer dans la construction du protocole d'expérimentation. Par conséquent, pour bien refléter les hypothèses de ce travail, on ne prend en considération que des situations plausibles où les solutions, connues *a priori*, sont en $H^2(\Omega)$. Tout ceci étant dit on est maintenant en mesure de faire la présentation des méthodes de reconstruction du hessien.

2.5.3 La reconstruction globale par la méthode des moindres carrés

Cette technique utilise des procédures locales d'approximation par moindres carrés pour construire une approximation plus lisse d'une fonction de départ. Pour illustrer les idées de base de cette technique, on part d'une fonction quelconque w définie sur Ω , de laquelle on s'attend, au moins, qu'elle soit dans l'espace des fonctions de carrés intégrables c.-à-d. $w \in L^2(\Omega)$. On désire construire une approximation de w dans

l'espace V_h^k , un espace plus lisse que $L^2(\Omega)$. On note Π_h l'opérateur,

$$\begin{aligned} \Pi_h : L^2(\Omega) &\longrightarrow V_h^k, \\ w &\longmapsto \Pi_h(w) = \sum_i w_i \varphi_i^k, \end{aligned} \quad (2.17)$$

où $w_i = w(N_i)$, la fonction au noeud N_i . On veut remplacer l'opérateur d'interpolation par un opérateur qui permettra une meilleure approximation de w . La forme (2.17) suggère que l'on remplace la valeur $w_i = w(N_i)$ par une valeur $\bar{w}_i^*$, calculée de façon locale et peu dispendieuse, pour obtenir un opérateur

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} : L^2(\Omega) &\longrightarrow V_h^k, \\ w &\longmapsto \mathcal{Z}(w) = \sum_i \bar{w}_i^* \varphi_i^k. \end{aligned} \quad (2.18)$$

On va exprimer le problème de calculer les valeurs $\bar{w}_i^*$ comme un problème de minimisation

- trouver les valeurs nodales $\bar{w}_i^*$ telles que la distance entre la fonction w et sa reconstruction $\mathcal{Z}(w)$ soit minimale sur Ω , pour une norme donnée.

Ainsi, l'opérateur $\mathcal{Z}$ transforme une fonction w en une fonction de type éléments-finis $\mathcal{Z}(w)$, qui est une combinaison de produits de fonctions φ_i^k de type *Lagrange* de degré k par les valeurs nodales correspondantes, $\bar{w}_i^*$. Les fonctions de *Lagrange* étant connues, l'opérateur $\mathcal{Z}$ est déterminé par ses valeurs nodales, $\bar{w}_i^*$.

L'idée essentielle est donc de faire le calcul de $\bar{w}_i^*$ localement. La valeur $w_i = w(N_i)$ au noeud N_i est localement approximée en utilisant une régression de données discrètes. L'ensemble de données utilisé dans la régression est déterminé d'une part par l'ensemble des éléments entourant un noeud et d'autre part par un ensemble choisi de noeuds d'échantillonnage appartenant à l'ensemble de ces éléments. La clé c'est de faire un bon choix des noeuds de reconstruction. Connaissant les valeurs w aux noeuds choisis, la fonction w est, alors, approximée localement au sens des moindres carrés par, selon le cas, une fonction linéaire ou quadratique.

On doit maintenant décrire l'opérateur local qui nous permettra de calculer $\bar{w}_i^*$. Dans le processus de reconstruction, on suppose que chaque valeur nodale $\bar{w}_i^*$ appartient à une expansion polynômiale $\bar{w}^{*P}$. Cette expansion polynômiale est utilisée pour chaque composante de w , quelque soit le type de reconstruction de fonction ou de ses dérivées. Zienkiewicz et Zhu recommandent que le degré de l'expansion polynômiale soit le même que le degré des fonctions φ_i^k choisies et que l'expansion polynômiale considérée ne soit définie que sur l'ensemble des éléments entourant le noeud qui forme le centre de la cellule. On appelle cet ensemble des éléments autour d'un sommet la *cellule* du sommet et elle représente l'union des éléments connectés ou qui contiennent le sommet. Chaque sommet du maillage appartient à une cellule. Des illustrations de cellules typiques sont présentées à la figure 2.3. On note par $T_i \subset T_h$ la cellule de

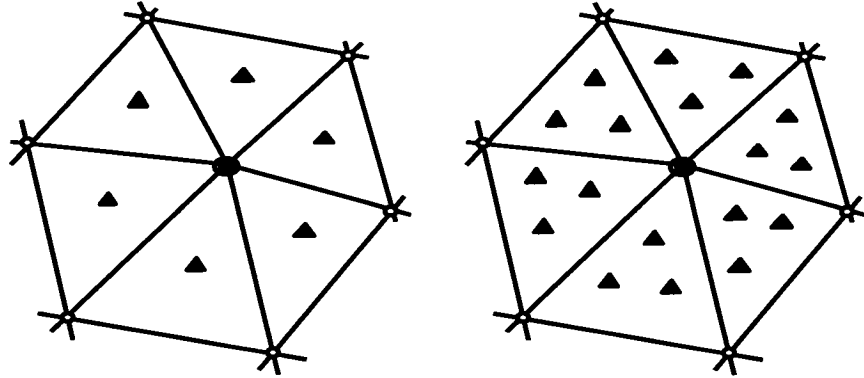


FIGURE 2.3 Exemples de cellules de triangles à 3 noeuds et des points d'échantillonnage P_j . Gauche : un point d'échantillonnage par élément (barycentre); droite : trois points d'échantillonnage par élément (3 points de *Gauss*).

sommet N_i , du maillage T_h .

Pour le sommet N_i on a une cellule T_i et on sélectionne un ensemble de noeuds d'échantillonnage $P_j \in T_i$. Plusieurs choix sont possibles. Ces noeuds peuvent être les sommets des éléments appartenant à la cellule, les barycentres de ces éléments ou un certain nombre de points de *Gauss* choisis sur chaque élément de la cellule. On considère ensuite l'ensemble discret de données $S_i(w) = \{(P_j, w(P_j)) \mid P_j \in T_i\}$ qui va servir comme base de calcul des valeurs nodales $\bar{w}^*$ par une approximation au sens

des moindres carrés. On définit l'opérateur local $\mathcal{L}^k$

$$\begin{aligned} \mathcal{L}^k : S_i(w) &\longrightarrow P^k(T_i), \\ S_i(w) &\longmapsto \bar{w}^{*P}(x) = \sum_l a_l \zeta_l^k(x). \end{aligned} \quad (2.19)$$

où k est le degré du polynôme, ζ_l^k est la base polynômiale de l'expansion et $a_l \in \mathbb{R}$ est le l -ième coefficient associé à la base polynômiale. Par exemple en 2D, si $k = 1$, la base polynômiale est $\zeta^1 = [1, x, y]$ et si $k = 2$, la base polynômiale est $\zeta^2 = [1, x, y, x^2, xy, y^2]$.

La base ζ_l^k étant connue, l'approximation polynômiale locale $\bar{w}^{*P}$ est complètement déterminée par la détermination des paramètres a_l . C'est ici qu'intervient le choix très important des points d'échantillonnage P_j et de la méthode d'approximation au sens des moindres carrés dans la résolution du problème, en fournissant les coefficients a_l du polynôme $\bar{w}^{*P}$. On formule alors le problème de minimisation suivant :

$$\min_{a_l \in \mathbb{R}} \sum_{P_j} \left(\sum_l a_l \zeta_l^k(P_j) - w(P_j) \right)^2. \quad (2.20)$$

Le problème de minimisation (2.20), sert principalement à :

- trouver les paramètres a_l de la fonction polynômiale $\bar{w}^{*P}$, passant par les points d'échantillonnage P_j ;
- remplacer, après la détermination des coefficients a_l , $\bar{w}_i^*$ par la construction polynômiale simple $\bar{w}_i^{*P}$, afin de mieux approximer (2.18).

Le critère de minimisation (2.20) n'est valide que si le nombre de paramètres à déterminer est inférieur au nombre de points d'échantillonnage. Pour pouvoir se servir de (2.20), il faut s'assurer que le système est surdéterminé, i.e. que le nombre d'équations est plus grand que le nombre de paramètres a_l à déterminer. Cela signifie que pour chaque noeud N_i , il faut construire une cellule ayant un nombre suffisant de points d'échantillonnage P_j , afin de pouvoir résoudre le problème de minimisation (2.20). Si, par exemple, on désire faire passer par les points P_j une surface quadratique telle que

la somme (2.20) soit minimale, alors le nombre d'équations à résoudre, pour chaque noeud N_i , est de 6, ce qui implique qu'un minimum de 6 points par cellule est nécessaire pour pouvoir résoudre ce système.

Pour résoudre le problème (2.20), on emploie les techniques classiques de résolution. La minimisation au sens des moindres carrés du problème (2.20), qu'on peut encore écrire sous la forme

$$\mathbf{F}(\mathbf{a}) = \sum_{P_j} \left(\sum_l a_l \zeta_l^k(P_j) - w(P_j) \right)^2,$$

où $\mathbf{a} = a_l$, revient à multiplier avec la transposée de ζ^t ce qui implique donc que $\mathbf{a}$ satisfasse la condition

$$\sum_{P_j} \zeta^t(P_j) \zeta(P_j) \mathbf{a} = \sum_{P_j} \zeta^t(P_j) w(P_j).$$

Pour simplifier la notation, on a considéré dans la relation ci-dessus $\zeta = \zeta_l^k$, et ζ^t est la transposé de ζ . Sous forme matricielle, cela donne

$$\mathbf{a} = \mathbf{A}^{-1} \mathbf{b},$$

où

$$\mathbf{A} = \sum_{P_j} \zeta^t(P_j) \zeta(P_j) \quad \text{et} \quad \mathbf{b} = \sum_{P_j} \zeta^t(P_j) w(P_j).$$

qui est un système carré qu'on résout en inversant la matrice $\mathbf{A}$. Une fois les paramètres a_l déterminés, la valeur nodale reconstruite, $\bar{w}_i^*$, est simplement obtenue par l'insertion des coordonnées appropriées dans l'expression de $\bar{w}^{*P}$ où, dans notre cas, les coordonnées sont les coordonnées du noeud N_i ,

$$\bar{w}_i^* = \bar{w}^{*P}(N_i) = \sum_l a_l \zeta_l^k(N_i). \quad (2.21)$$

2.5.3.1 La reconstruction de Zienkiewicz-Zhu

L'estimateur de Zienkiewicz-Zhu (voir Zienkiewicz et Zhu (1992)) produit une approximation améliorée de la première dérivée qui est comparée à la dérivée originale. Quand la différence est grande, il est concevable que l'erreur soit grande. Si u_h est une approximation dans P^1 , alors l'approximation de Zienkiewicz-Zhu, que l'on note $\mathcal{Z}_Z$, est $\mathcal{Z}_Z(\nabla u_h)$ ou plus spécifiquement

$$\mathcal{Z}_Z(\nabla u_h)(N_i) = \mathcal{L}^1(\nabla u_h)(N_i), \quad (2.22)$$

où les valeurs $S_i(\nabla u_h)$ sont prises aux barycentres des éléments dans la cellule T_i .

2.5.4 La simple approximation linéaire

La méthode de la simple approximation linéaire, *SAL*, élaborée par P. Labbé est utilisée dans plusieurs travaux d'adaptation de maillages, dont on énumère Guibault *et al.* (2002) et Dompierre *et al.* (2003). Elle consiste à appliquer une version modifiée de la technique de Zienkiewicz-Zhu, par l'introduction de l'opérateur de dérivation ∇ dans l'opérateur de reconstruction (2.18).

Soit u_h la solution discrète P^1 par élément connue seulement aux noeuds du maillage. On lui applique l'opérateur gradient pour obtenir ses dérivées premières selon x et y . Ceci implique qu'en appliquant à u_h l'interpolation linéaire P^1 de *Lagrange* (2.13), en passant par les transformations $T(\xi)$ aux variables de l'élément de référence (2.12), on est en mesure d'effectuer la première dérivation de u_h . Selon la définition (2.7), les dérivées premières de u_h s'écrivent

$$\nabla u_h |_{x=x(\xi)} = (DT)^{-t} \nabla \varphi^1(\xi). \quad (2.23)$$

L'interpolation étant P^1 de *Lagrange*, les dérivées de (2.23) en x et y sont constantes par élément. L'opérateur ∇ de dérivation fournit donc les deux composantes des dérivées dans l'espace V_h^0 :

$$\begin{aligned}\nabla : V_h^1 &\longrightarrow (V_h^0)^2; \\ u_h &\longmapsto ((\nabla u_h)_x, (\nabla u_h)_y).\end{aligned}$$

Pour la méthode *SAL*, on considère à chaque noeud N_i , la cellule correspondante T_i , contenant les éléments entourant le sommet N_i . Cette méthode consiste à reconstruire localement la dérivée $((\nabla u_h)_x, (\nabla u_h)_y)$ sur une telle cellule T_i , ce qui revient, dans un premier temps, à calculer les composantes des dérivées de u_h sur tous les éléments appartenant à la cellule T_i à l'aide de l'équation (2.23).

La reconstruction locale des dérivées premières est de type linéaire et elle est obtenue à l'aide de l'opérateur $\mathcal{L}^1$. D'autre part, l'ensemble de points d'échantillonnage $P_j \in T_i$ choisi pour la reconstruction linéaire des dérivées d'ordre un, comprend trois points de *Gauss* sur chaque élément de la cellule de N_i (voir figure 2.3, Droite). En pratique, ce choix des points P_j n'ajoute pas d'information supplémentaire comparé à un seul point de *Gauss*, (voir figure 2.3, Gauche) sur chaque élément, car ∇u_h est constant par élément. Par contre, le choix de trois points de Gauss par élément garantit d'avoir toujours un nombre suffisant de points par élément pour que le problème de minimisation (2.20) soit résolu pour n'importe quel type de cellule, comprenant aussi le cas particulier d'une cellule contenant un seul élément (noeud dans un coin). De cette façon, il n'est pas nécessaire de recourir à un traitement spécial pour les frontières. Cependant, dans ce cas-ci, le problème de calcul des dérivées sur les frontières est résolu en considérant qu'à la limite, les valeurs des dérivées des noeuds internes les plus proches des frontières sont les mêmes que les valeurs nodales appartenant aux frontières.

L'ensemble $S_i(\nabla u_h) = \{(P_j, \nabla u_h(P_j)) | P_j \in T_i\}$, et l'opérateur d'approximation linéaire $\mathcal{L}^1$, sont appliqués aux valeurs des points d'échantillonnage P_j , (voir figure 2.3,

Droite). Ceci signifie que les trois coefficients a_l sont calculés à partir du problème de minimisation (2.20), pour obtenir

$$\mathcal{L}^1(S_i(\nabla u_h)) = \sum_{l=1}^3 a_l \zeta_l^1. \quad (2.24)$$

Ainsi pour chaque composante du gradient $\nabla u_h = ((\nabla u_h)_x, (\nabla u_h)_y)$ on obtient une reconstruction de la façon suivante :

$$\begin{cases} \mathcal{L}^1(S_i((\nabla u_h))_x) = \sum_{l=1}^3 a_l^x \zeta_l^1, \\ \mathcal{L}^1(S_i((\nabla u_h))_y) = \sum_{l=1}^3 a_l^y \zeta_l^1. \end{cases}$$

La modification apportée à la méthode de Zienkiewicz et Zhu est que la reconstruction locale des dérivées premières n'est pas effectuée pour calculer les valeurs nodales comme dans l'expression (2.22). Les dérivées selon x et y sont plutôt calculées sur l'approximation polynomiale locale (2.24) :

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial x}((\nabla u_h)_x) = \frac{\partial}{\partial x} \sum_{l=1}^3 a_l^x \zeta_l^1 \approx a_2^x; \\ \frac{\partial}{\partial y}((\nabla u_h)_x) = \frac{\partial}{\partial y} \sum_{l=1}^3 a_l^x \zeta_l^1 \approx a_3^x; \end{cases} \quad \begin{cases} \frac{\partial}{\partial x}((\nabla u_h)_y) = \frac{\partial}{\partial x} \sum_{l=1}^3 a_l^y \zeta_l^1 \approx a_2^y; \\ \frac{\partial}{\partial y}((\nabla u_h)_y) = \frac{\partial}{\partial y} \sum_{l=1}^3 a_l^y \zeta_l^1 \approx a_3^y. \end{cases}$$

Alors dans ce cas, la reconstruction (2.24) ne définit que formellement la reconstruction du gradient $\nabla u_h(N_i)$ permettant, ensuite, de calculer par dérivation les dérivées secondes de u_h . La moyenne des valeurs numériques est prise pour les dérivées croisées en xy et yx . Utilisant une interpolation linéaire Π_h avec les estimateurs des dérivées secondes aux sommets, trois fonctions continues sont reconstruites, approximant ainsi les dérivées secondes de u_h . Formellement, ce processus détermine l'opérateur de reconstruction global $\mathcal{H}_{SAL}$ par une simple approximation linéaire (*SAL*), au sens des

moindres carrés :

$$\mathcal{H}_{SAL} = \sum_i \mathcal{H}_{SAL}(u_h)(N_i) \varphi_i^1, \quad (2.25)$$

où localement

$$\mathcal{H}_{SAL}(u_h)(N_i) = \nabla \mathcal{L}^1(S_i(\nabla u_h))(N_i).$$

2.5.5 La double approximation linéaire

Dans la reconstruction globale par la méthode des moindres carrés l'opérateur noté $\mathcal{Z}$ reconstruit une fonction continue à partir des approximations locales effectuées pour les valeurs nodales. La reconstruction des dérivées secondes par une double approximation linéaire, *DAL*, consiste à appliquer l'opérateur $\mathcal{Z}$ tel qu'il est défini où l'objectif est de lisser localement des approximations linéaires. En fait, ce qu'on propose dans cette section est d'appliquer la technique de Zienkiewicz et Zhu à deux reprises, une fois pour la reconstruction du gradient et une fois pour la reconstruction des dérivées secondes. Soit la fonction u_h , discrète P^1 par élément. L'opérateur gradient ∇ , appliqué à cette fonction, fournit les deux composantes de la dérivée première de u_h , en x et en y , qui sont constantes par élément. L'application de $\mathcal{Z}$ permet de construire des approximations des composantes de ∇u_h dans l'espace V_h^1 à l'aide de l'opérateur $\mathcal{L}^1$. On formalise donc la transformation de $\mathcal{Z}$ de façon :

$$\mathcal{Z}(\nabla u_h) \in (V_h^1)^2,$$

où les valeurs $S_i(\nabla u_h)$ sont prises aux barycentres des éléments de la cellule T_i entourant le sommet N_i (voir figure 2.3, Gauche).

En appliquant ensuite l'opérateur ∇ aux fonctions continues $\mathcal{Z}(\nabla u_h)$, on obtient les quatre dérivées secondes en xx, xy, yx et en yy , qui sont elles mêmes constantes par élément. L'utilisation à nouveau des opérateurs $\mathcal{Z}$ et $\mathcal{L}^1$ permet la transformation des

2.5.6 La double projection L^2

La méthode de la double projection L^2 , *DPL2*, élaborée par Hecht (2003), utilise, pour la reconstruction des dérivées secondes, une double projection dans l'espace L^2 . La reconstruction *DPL2* se fait à l'aide de l'opérateur de *Clément* (voir Alauzet (2003)), qui transforme une fonction de L^2 en une fonction de V_h^1 . Cette reconstruction s'applique localement et utilise un opérateur local appliqué sur la cellule T_i du sommet. L'idée est de projeter $w \in L^2(\Omega)$, de façon indépendante, sur chaque cellule $T_i \subset T_h$. L'opérateur local de projection Π_0 , défini comme

$$\int_{T_i} (\Pi_0(w) - w) = 0, \quad \Pi_0(w) \in P^0(T_i), \quad (2.26)$$

reconstruit une fonction constante pour laquelle la valeur intégrale sur la cellule T_i est la même que la valeur intégrale de w sur T_i . L'opérateur de *Clément* prend ces valeurs comme des valeurs nodales pour la reconstruction d'une fonction linéaire par morceaux :

$$\Pi_C(w) = \sum_{j=1}^n \Pi_0(w)(N_j) \varphi_j^1, \quad \Pi_C(w) \in V_h^1. \quad (2.27)$$

La reconstruction *DPL2* part de la solution discrète u_h définie P^1 par élément. La simple application de l'opérateur de dérivation ∇ à u_h sur l'élément, donne les composantes des dérivées constantes par élément. On se retrouve, sur l'élément, avec des dérivées d'ordre un appartenant à l'espace $(V_h^0)^2$. Comme plusieurs éléments $K \in T_i$ interviennent dans la construction de la cellule T_i , on obtient des dérivées $(\nabla u_h)_K$ qui sont des fonctions constantes par élément, mais discontinues entre les éléments de la cellule T_i . En employant l'opérateur Π_0 (2.26), on effectue une projection de la dérivée première $(\nabla u_h)_K$ en utilisant une moyenne pondérée par l'aire. Cette projection, assimilée à une valeur constante par cellule T_i , est ensuite utilisée comme la valeur nodale reconstruite de la dérivée première en N_i . Les valeurs nodales reconstruites

pour N_i se calculent à partir de la relation (2.26),

$$\int_{T_i} \Pi_0(\nabla u_h) = \int_{T_i} \nabla u_h \iff (\Pi_0(\nabla u_h))|_{N_i} = \frac{\sum_{K \in T_i} |K| (\nabla u_h)_K}{\sum_{K \in T_i} |K|}, \quad (2.28)$$

où $|K|$ représente l'aire de l'élément $K \in T_i$. L'opérateur de *Clément*, défini en (2.27), intervient dans la reconstruction des dérivées d'ordre un de u_h sur l'élément. Cette reconstruction permet une formulation de type linéaire pour les dérivées reconstruites :

$$\Pi_C(\nabla u_h) = \left[\Pi_C \left(\frac{\partial u_h}{\partial x} \right), \Pi_C \left(\frac{\partial u_h}{\partial y} \right) \right]. \quad (2.29)$$

Les valeurs calculées $(\Pi_0(\nabla u_h))|_{N_i}$ sont aussi les valeurs nodales du gradient reconstruit, c.-à-d.

$$(\Pi_C(\nabla u_h))(N_i) = \frac{\sum_{K \in T_i} |K| (\nabla u_h)_K}{\sum_{K \in T_i} |K|}. \quad (2.30)$$

Considérant à nouveau (2.27) et (2.30), le même processus est appliqué à chaque composante du gradient reconstruit. Pour les composantes des dérivées secondes croisées, une moyenne de leurs valeurs pourrait être considérée. Les trois fonctions en V_h^1 des dérivées secondes reconstruites par la méthode *DPL2* se formulent de façon

$$\mathcal{H}_{DPL2}(u_h) = \sum_i \mathcal{H}_{DPL2}(u_h)(N_i) \varphi_i^1, \quad (2.31)$$

où les valeurs nodales sont données par :

$$\mathcal{H}_{DPL2}(u_h)(N_i) = \Pi_C(\nabla \Pi_C(\nabla(u_h)))(N_i).$$

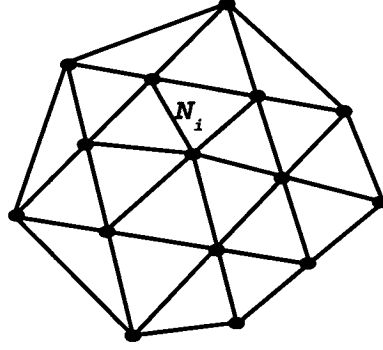
Cette méthode est simple et elle ne nécessite pas de traitement spécial aux frontières.

2.5.7 L'approximation quadratique

La méthode de reconstruction appelée approximation quadratique, AQ , consiste à appliquer une reconstruction de type quadratique pour les dérivées secondes (la construction d'une conique sur une cellule d'éléments). Cette méthode, proposée par Zhang (2001), reconstruit les valeurs nodales en utilisant une approximation par moindres carrés de type $\mathcal{L}^2$, appliquée à la fonction u_h . On note donc que cette méthode reconstruit une approximation locale de u_h et pas de ses dérivées.

Cette méthode utilise un ensemble d'éléments S_i défini comme suit : pour chaque sommet $N_i \in T_h$, la cellule $T_i \subset T_h$ associée au sommet N_i est composée par les éléments entourant le sommet N_i . À cette cellule T_i , on ajoute une autre cellule d'éléments constituée des éléments voisins des sommets appartenant à la première cellule T_i . Autrement dit, dans le cas de la reconstruction AQ , une cellule est définie par deux niveaux de voisinage d'éléments entourant le sommet N_i . On note une telle cellule T_i^{AQ} , pour éviter une ambiguïté concernant les autres notations de cellules utilisées. Sur une cellule T_i^{AQ} , l'ensemble de points d'échantillonnage $P_j \in T_i^{AQ}$ comprend les sommets des éléments formant la cellule T_i^{AQ} . Dans le cas des sommets se trouvant sur la frontière, la cellule T_i^{AQ} peut contenir de plus un troisième niveau de voisinage, s'assurant ainsi qu'il y a toujours un nombre suffisant de points d'échantillonnage dans la cellule T_i^{AQ} . Ce choix est fait afin d'éviter l'utilisation de traitements spéciaux en ce qui a trait aux sommets frontières (voir Pelletier (1999)). Une cellule T_i^{AQ} est illustré à la figure 2.5.

L'opérateur $\mathcal{L}^2$, utilisé par cette reconstruction AQ , permet le calcul des coefficients a_l des fonctions de base ζ^2 . Rappelons que l'ensemble de points d'échantillonnage choisi est représenté ici par les sommets des éléments formant la cellule T_i^{AQ} . La formulation $\mathcal{L}^2(S_i(u_h)) = \sum_l a_l \zeta_l^2$ est deux fois dérivée, ce qui résulte en des valeurs nodales des dérivées secondes reconstruites de u_h . Les trois valeurs nodales, aux N_i ,

FIGURE 2.5 Exemple de cellule T_i^{AQ} .

des dérivées secondes reconstruites sont données par

$$\mathcal{H}_{xx}(N_i) \approx \frac{\partial^2 \mathcal{L}^2(S_i(u_h))}{\partial x^2} \Big|_{N_i} = \frac{\partial^2 (\sum_l a_l \zeta_l^2)}{\partial x^2} \Big|_{N_i} = 2a_4,$$

$$\mathcal{H}_{xy}(N_i) \approx a_5 \quad \text{et} \quad \mathcal{H}_{yy}(N_i) \approx 2a_6.$$

Ce processus est appliqué à chaque sommet de T_h et, en utilisant ensuite une interpolation des valeurs nodales, trois fonctions en V_h^1 définissent l'approximation linéaire continue des dérivées secondes de u_h :

$$\mathcal{H}_{AQ}(u_h) = \sum_i \mathcal{H}_{AQ}(u_h)(N_i) \varphi_i^1, \quad (2.32)$$

où les valeurs nodales sont :

$$\mathcal{H}_{AQ}(u_h)(N_i) = \nabla^2 \mathcal{L}^2(S_i(u_h))(N_i). \quad (2.33)$$

2.5.8 La double intégration par parties

La méthode de la double intégration par parties, *DIP*, utilisée par Manole *et al.* (2003), reconstruit les dérivées secondes par une application successive du théorème de la divergence. Premièrement, le gradient de la fonction est calculé à chaque élément

entourant un sommet pour qu'il soit, ensuite, pondéré afin de reconstruire le gradient au sommet. La reconstruction des dérivées secondes est obtenue en substituant successivement la fonction par les composantes du gradient reconstruit et en appliquant à nouveau le même processus de reconstruction.

On vient de préciser que cette méthode utilise le théorème de la divergence. La formulation la plus connue de ce théorème et celle dite de Gauss-Ostrogradski :

$$\int_{\Omega} \nabla \cdot \mathbf{w} d\Omega = \int_{\partial\Omega} \mathbf{w} \cdot \mathbf{n} ds, \quad (2.34)$$

où $\mathbf{w}$ est un champ scalaire et $\mathbf{n}$ est la normale au domaine d'intégration $\partial\Omega$.

Dans la formulation (2.34), le passage d'une intégrale sur le volume à une intégrale de surface s'explique intuitivement par le fait qu'il suffit de mesurer ce qui entre et sort de la surface pour mesurer l'évolution de ce qui se passe à l'intérieur du volume. L'application de ce théorème permet l'obtention de la valeur moyenne de la dérivée d'un champ à l'aide de ses valeurs surfaciques.

Le principe de calcul de la méthode *DIP*, consiste à appliquer le théorème (2.34), à de petits volumes de l'espace. Comme ces volumes sont pris suffisamment petits, on considère les composantes de la dérivée de l'intégrale volumique comme étant constantes pour pouvoir ensuite les extraire de l'intégrale. Mathématiquement, d'après le théorème de la moyenne, cela signifie que sa valeur moyenne est atteinte en un point situé à l'intérieur du volume choisi. Cependant, on pourrait considérer le gradient comme évoluant suffisamment régulièrement sur la région du volume choisi, pour que sa valeur en un point central représente convenablement la valeur moyenne sur le volume. Pour ce qui est de l'intégrale de surface, on présente dans ce qui suit la méthode d'évaluation utilisée.

Considérons maintenant Ω , un volume suffisamment petit, $|\Omega|$ le volume de Ω , et

l'opérateur local $\mathcal{T}_{div} \in P^0$, défini par

$$\mathcal{T}_{div}(\nabla w) = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\partial\Omega} \mathbf{w} \cdot \mathbf{n} \, ds, \quad (2.35)$$

qui reconstruit la différentielle d'une fonction sur Ω à l'aide de ses valeurs surfaciques. À partir de toutes les spécifications faites, on considère l'élément $K \in T_h$ de l'aire $|K|$ et la fonction u_h , pour laquelle en appliquant (2.35) pour la composante x de la dérivée ∇u_h , on obtient la relation

$$\mathcal{T}_{div}(\nabla u_h) |_x = \frac{1}{|K|} \int_{\partial K} u_h n_x ds. \quad (2.36)$$

On décompose l'intégrale de droite en une somme d'intégrales sur chacune des arêtes composant la frontière de l'élément K . Dans la relation (2.36), le terme u_h est connu aux sommets de l'élément, aussi que son produit avec la normale à la surface de l'élément K , ce qui permet d'évaluer l'intégrale surfacique à l'aide d'une méthode classique d'intégration numérique. La méthode d'intégration utilisée dans ce cas-ci est la méthode des trapèzes. Pour une arête de l'élément K , (voir la figure 2.6), l'évaluation de l'intégrale se réalise de la façon suivante,

$$\int_{N_i}^{N_j} u_h n_x ds \approx \frac{u_h|_{N_i} + u_h|_{N_j}}{2} n_x^{ij} l_{ij},$$

où n_x^{ij} et l_{ij} sont les notations définissant la composante x de la normale à l'arête, et la longueur de l'arête. En utilisant la méthode des trapèzes pour le calcul de l'intégrale sur toute la frontière de l'élément K , on obtient une relation de la forme

$$\mathcal{T}_{div}(\nabla u_h)_x |_K = \int_{\partial K} u_h n_x ds \approx \sum_{i,j=1, i \neq j}^3 \left(\frac{u_h|_{N_i} + u_h|_{N_j}}{2} \right) n_x^{ij} l_{ij}. \quad (2.37)$$

Cette dernière relation employée pour chaque composante du gradient de u_h permet ensuite d'évaluer les dérivées premières de chaque élément K d'une cellule T_i , associée

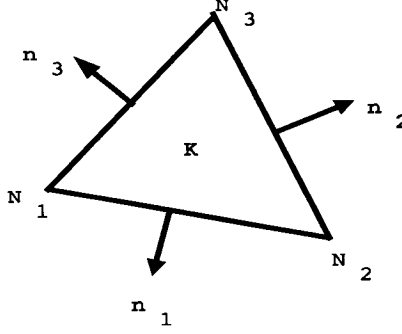


FIGURE 2.6 Évaluation de l'intégrale surfacique.

à un sommet N_i . Une fois que les gradients des éléments $K \in T_i$ sont évalués, le procédé de reconstruction nodale des dérivées premières en N_i se formule comme une moyenne pondérée par l'aire. La reconstruction nodale s'applique de la manière suivante :

$$\mathcal{T}_{div}(\nabla u_h)(N_i) = \frac{\sum_{K \in T_i} |K| \mathcal{T}_{div}(\nabla u_h)_K}{\sum_{K \in T_i} |K|}. \quad (2.38)$$

On remarque que (2.38) n'est que la reconstruction de la double projection L^2 (2.30), ce qui se vérifie autant par l'explicitation des relations (2.37) et (2.38) que par les résultats numériques. Pour conclure, la reconstruction linéaire des dérivées secondes se réalise en appliquant, à nouveau, le même procédé de reconstruction :

$$\mathcal{H}_{DIP}(u_h) = \sum_i \mathcal{H}_{DIP}(u_h)(N_i) \varphi_i^1, \quad (2.39)$$

où localement les dérivées secondes se formalisent :

$$\mathcal{H}_{DIP}(u_h)(N_i) = \mathcal{T}_{div}(\nabla \mathcal{T}_{div}(\nabla(u_h)))(N_i). \quad (2.40)$$

CHAPITRE 3

LA MÉTHODOLOGIE DE COMPARAISON DES MÉTHODES DE RECONSTRUCTION

Afin de comparer la performance des différentes méthodes de reconstruction présentées au chapitre précédent, nous proposons de mettre en place un cadre expérimental permettant de tenir compte des principaux facteurs influençant la convergence et la robustesse des techniques de reconstruction. Le but de ce chapitre est d'établir les principes de base de la méthodologie d'évaluation de la précision des techniques de reconstruction en préparant la base d'un protocole expérimental qui sera utilisé ensuite, de façon itérative, pour toutes les techniques de reconstruction.

Parmi les éléments influençant la précision de ces techniques de reconstruction, on en identifie trois significatifs :

- la forme et l'orientation de l'élément dans la construction du maillage ;
- le type de la fonction à reconstruire (polynômiale, exponentielle etc.) ;
- l'endroit où la précision de la reconstruction est mesurée, sur la frontière ou à l'intérieur du domaine de calcul.

Dans les sections suivantes nous décrivons chaque élément énuméré ci-dessus en débutant, à la section 3.1, par la description des maillages et des principes de base de leur construction. Ensuite, à la section 3.2, nous présentons et discutons le choix des fonctions analytiques pour qu'à la section 3.3 et 3.4, nous puissions expliquer la façon d'évaluer l'erreur. Finalement, dans la dernière section du chapitre, nous présentons l'environnement de calcul sur lequel est construit le protocole d'expérimentation.

3.1 Les maillages

L'utilisation d'une méthode de calcul reliée à un problème réel nécessite, avant toute chose, la construction d'un modèle géométrique discret représentant le domaine de calcul. Ce modèle discret, ou *maillage*, est utilisé comme support de calcul et doit satisfaire un certain nombre de propriétés liées à la géométrie du domaine étudié et à la physique du problème. Il est clair qu'avec un maillage bien adapté au problème à résoudre, on aura de bons résultats.

L'utilisation des maillages aussi réguliers que possible n'aide pas toujours dans la résolution des problèmes. Si on prend, par exemple, un maillage défini par des éléments aussi équilatéraux que possible, on pourrait dire que c'est un «*bon*» maillage, mais cela ne signifie pas qu'il aurait les qualités nécessaires pour mieux répondre aux caractéristiques particulières d'un problème donné. Par les caractéristiques particulières d'un problème, on entend les comportements physiques tels que les chocs, les sillages, les couches limites ou les fissures. On peut aussi avoir des contraintes géométriques comme celles trouvées dans la reconstruction de surfaces avec de fortes variations de courbures ou des singularités. Dans tous ces cas, l'utilisation des maillages ayant des éléments très allongés ou très aplatis est préférable. Les maillages contenant de tels éléments étirés sont qualifiés d'*anisotropes*. L'introduction des anisotropies dans la construction des maillages favorise la capture de certains comportements ayant une direction de propagation préférentielle, ou en d'autres termes, les anisotropies aident à la propagation des champs dans la direction de la plus grande longueur.

Une autre caractéristique importante dont on devrait tenir compte dans la construction des maillages est la taille des mailles ou la finesse locale du maillage. La finesse locale d'un maillage joue un rôle important dans un processus de calcul si on désire mettre en évidence la propagation d'un effet local au travers d'un maillage. Toutes ces idées nous permettent de conclure que les maillages anisotropes ayant un étirement et une finesse locale définis dans la bonne direction de propagation géométrique ou

physique, décrivent mieux la réalité.

Il n'est évidemment pas possible de prévoir avant de résoudre un problème sur un maillage donné le comportement de la solution. On pourrait intuitivement construire les maillages tout en respectant les critères géométriques et physiques auxquels on s'attend, mais, la capture de certains phénomènes apparaissant dans le processus de calcul ne pourrait pas être envisagée *a priori*. Ici intervient le processus d'adaptation de maillages, qui se fait au fur et à mesure que les comportements physiques apparaissent. On énonce ci-dessous quelques types d'applications où la construction et l'adaptation des maillages présentent un intérêt majeur :

- problèmes de mécanique des fluides :
 - l'étude des écoulements autour d'un profil d'aile d'avion ou d'un bateau ;
- problèmes de mécanique :
 - la discrétisation des pièces mécaniques ou des surfaces ;
- problèmes d'imagerie médicale :
 - la reconstruction d'une surface, le plus fidèlement possible, en partant d'un ensemble de points en 3D, sans connaître *a priori* la topologie, ou d'une surface plane par morceaux.

Un rôle important dans le processus d'adaptation de maillages est joué par la métrique spécifiant la forme, l'orientation des éléments à construire et la finesse locale du maillage. Cette métrique, provenant d'un estimateur d'erreur, est gouvernée par la matrice des dérivées secondes. Ainsi, une bonne évaluation de la matrice des dérivées secondes fournit une bonne connaissance de la métrique. En partant de cette idée, on peut passer à l'étape suivante, qui est l'investigation de la performance des techniques de reconstruction des dérivées secondes. On présente dans les sections suivantes les facteurs permettant de faire une étude rigoureuse de comparaison des reconstructions des dérivées secondes.

3.1.1 Le choix des maillages

On commence cette section en précisant que le domaine considéré est $\Omega = [0, 1] \times [0, 1]$ de $\mathbb{R}^2$ et que tous les maillages sont construits sur Ω . On travaille en dimension 2 et les maillages choisis sont des maillages triangulaires.

Le *maillage* sur lequel reposent tous les calculs numériques constitue un des principaux facteurs qui influencent la précision des techniques de reconstruction. On dit que si le maillage est structuré, la reconstruction numérique des dérivées devrait être précise. Dans l'esprit de cette idée, on mentionne que certaines méthodes de calcul des dérivées secondes, qui sont précises sur des maillages structurés, perdent leurs propriétés sur des maillages non-structurés, pour lesquels la *valence topologique* autour du sommet peut varier d'un sommet à l'autre. Par la *valence topologique* on comprend le nombre de voisins (sommets, arêtes ou éléments) d'un sommet. Ceci nous amène à étudier d'une part l'effet qu'une *valence topologique variée autour d'un sommet* produit sur un processus de calcul, et d'autre part l'influence de l'*étirement* des éléments du maillage, afin d'en tenir compte dans la construction des maillages tests que nous proposons.

Pour couvrir le plus grand nombre possible d'applications, on considère comme des maillages tests des maillages structurés et non-structurés, comme celui de type *Delaunay*. Comme il existe plusieurs mailleurs pouvant produire des maillages anisotropes, on prend aussi en considération des maillages isotropes et anisotropes. Les types de maillages choisis sont :

- maillage isotrope en drapeau britannique (*IDB*), (voir la figure 3.1) ;
- maillage anisotrope en drapeau britannique (*ADB*), (voir la figure 3.2) ;
- maillage isotrope de Delaunay (*IDD*), (voir la figure 3.3) ;
- maillage anisotrope avec angles droits (*AAD*), (voir la figure 3.4) ;
- maillage anisotrope avec angles obtus (*AAO*), (voir la figure 3.5).

La raison pour laquelle nous choisissons des maillages anisotropes est pour évaluer la sensibilité des méthodes de reconstruction aux éléments étirés et particulièrement aux éléments ayant des angles obtus. Le maillage de type *Delaunay* est étudié parce-qu'il est fréquemment utilisé. Les reconstructions devraient donc bien se comporter sur ce type de maillage.

Tous les aspects géométriques et topologiques concernant la construction de ces maillages sont présentés dans les sections suivantes, où on détaille pour chaque type de maillage la valence topologique autour d'un sommet, autant sur la frontière qu'à l'intérieur du domaine, en mettant en évidence aussi les particularités topologiques de certains maillages anisotropes qui pourraient être semblables à première vue.

Afin d'analyser systématiquement la convergence, nous prenons chaque type de maillage et nous le représentons par une famille de maillages de plus en plus fins, ayant la même structure. Pour capturer les résultats asymptotiques de la convergence, ce qui n'est possible que pour une augmentation du nombre d'éléments dans le maillage, nous construisons des maillages assez fins, ayant un nombre de sommets allant jusqu'à 500 000 et un nombre de triangles allant jusqu'à 1 000 000.

En ce qui concerne les algorithmes de construction des maillages étudiés, on se limite à la génération des maillages non-structurés, pour lesquels la valence topologique autour des sommets est toujours variable. L'exemple le plus connu d'un tel maillage est le maillage de *Delaunay* qui fait partie de la liste des maillages testés.

Les techniques de génération des maillages non-structurés de type *Delaunay*, de même que celui de type *frontal*, sont bien connues. Plusieurs descriptions de ces techniques se retrouvent dans la littérature qui traite de génération de maillages. Parmi les publications décrivant les algorithmes et les structures de données utiles dans la construction des maillages, on retrouve celle de Frey et George (1999), où les auteurs apportent une contribution significative au processus de génération des maillages. Dans les paragraphes suivants, on fait un petit rappel sur ces techniques en précisant d'abord qu'il est possible d'employer une technique de génération de maillages ou l'autre, ou

même de faire appel à ces deux techniques, pour la génération de maillages. Pour plus de détails à ce sujet, voir Frey et George (1999).

Les deux techniques de construction partent de la même donnée d'entrée, qui est la *frontière discrétisée* du domaine. Cette *frontière* délimite la partie à mailler de la partie extérieure et détermine en partie la taille et la densité des éléments.

L'algorithme de *Delaunay* repose sur une base mathématique rigoureuse. Partant d'une liste de points à insérer dans un domaine, l'algorithme de *Delaunay* s'applique comme suit :

- générer une boîte englobant le domaine ;
- insérer les points internes, un à la fois dans la boîte englobante ;
- vérifier la validité de la triangulation de type *Delaunay* pour le point inséré (ex. : l'algorithme de Lawson) ;
- créer le nouveau maillage de *Delaunay* à partir du point inséré ;
- mettre à jour le nouveau maillage du point de vue géométrique et topologique.

L'algorithme de type *frontal* s'appuie également sur un processus itératif. Au départ, on désigne le *front* comme étant la frontière discrétisée du domaine. Par exemple, en 2D, le *front* désigne l'ensemble des segments formant la frontière. Ensuite le front ainsi construit se *déplace* vers l'intérieur du domaine définissant ainsi le nouveau *front* comme étant la frontière entre la zone maillée et non-maillée. Ce processus continue de façon itérative tant que le *front* n'est pas vide ou que la discrétisation n'est pas complète :

- choisir un élément, i.e. segment ou arête, du front ;
- rechercher les points proches de cet élément ou créer un point idéal ;
- trier ces points en fonction de critères prédéfinis (distance, qualité, convergence) ;
- créer un élément (triangle) avec le premier point qui satisfait les critères établis ;
- mettre à jour le front.

3.1.2 La description des maillages

La construction des maillages tests est faite de façon à satisfaire les critères suivants :

- chaque type de maillages discrétise le même domaine de calcul ;
- chaque type de maillages est un maillage triangulaire ;
- chaque type de maillage est représenté par une famille de maillages de plus en plus fins et ayant les mêmes caractéristiques ;
- chaque famille de maillages contient huit maillages de même type.

Ces maillages sont décrits par une liste de doublets des coordonnées des sommets, par une liste d'arêtes sur lesquelles se reposent les sommets et par une liste de triangles. Chaque triangle est décrit par les trois sommets qui le composent. Les arêtes qui n'appartiennent qu'à un seul triangle définissent la frontière du domaine. Pour plus de détails, voir les annexes.

3.1.2.1 Le maillage isotrope en drapeau britannique

Le maillage isotrope en drapeau britannique (*IDB*) est un maillage qui est composé de carrés divisés en deux triangles rectangles, tel qu'illustré à la figure 3.1. Dans la construction de ce maillage, la division des carrés en deux triangles est faite de façon à ce que pour chaque carré, on prend alternativement les diagonales, comme dans un drapeau britannique. Cette division donne des sommets internes ayant 4 ou 8 voisins, tandis que pour la frontière, la valence topologique pour un sommet est 2 ou 4. Pour la génération des maillages *IDB* de plus en plus fins, on augmente le nombre de sommets tout en gardant le même nombre de sommets dans chaque direction. Le tableau 3.1 montre la densité des éléments générés pour les maillages *IDB* construits. On remarque que le maillage le plus fin contient 640×640 éléments. On note N_i et N_j le nombre de sommets en X et en Y respectivement.

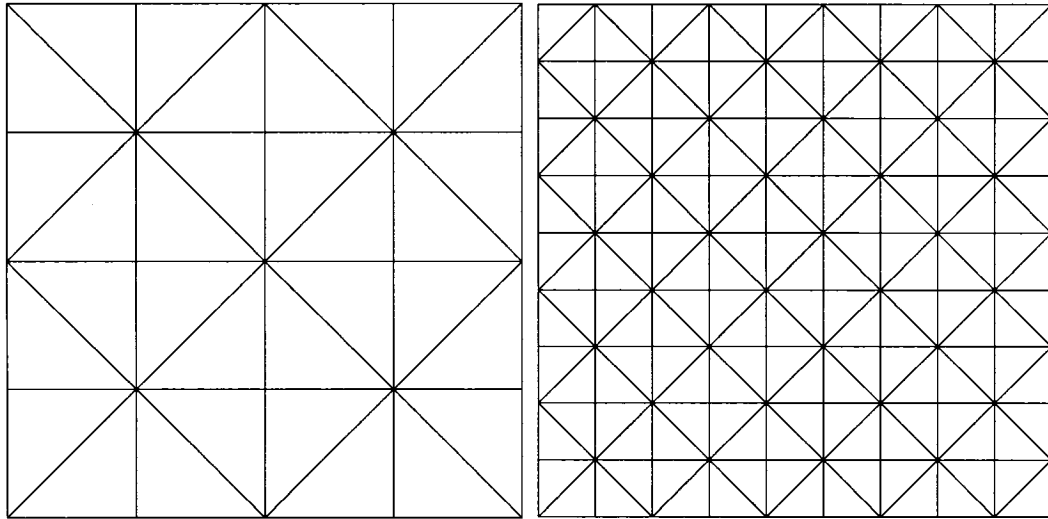


FIGURE 3.1 Exemples de maillages isotropes en drapeau britannique, *IDB*.

TABLEAU 3.1 Maillages de type *IDB*

Cas	Nombre de sommets	N_i	N_j
1	1600	40	40
2	6400	80	80
3	14 400	120	120
4	25 600	160	160
5	57 600	240	240
6	102 400	320	320
7	230 400	480	480
8	409 600	640	640

3.1.2.2 Le maillage anisotrope en drapeau britannique

Le maillage anisotrope en drapeau britannique (ADB) est construit de la même manière que le maillage IDB . La seule différence entre les deux maillages choisis est que le maillage ADB contient des éléments étirés, ce qui permet d'examiner la sensibilité des techniques de reconstruction à l'introduction d'un étirement des éléments. L'étirement choisi est un étirement de facteur 10. Par exemple, si on divise X en 2 intervalles et Y en 20 intervalles on obtient des rectangles ayant un étirement de 10 qui, dans notre cas, sont divisés ensuite en deux triangles rectangles présentant le même étirement. Les valences topologiques autour des sommets restent les mêmes que dans le cas du maillage IDB . La figure 3.2 montre des exemples des maillages ADB . Des maillages de type ADB de plus en plus fins sont construits, tels que décrit

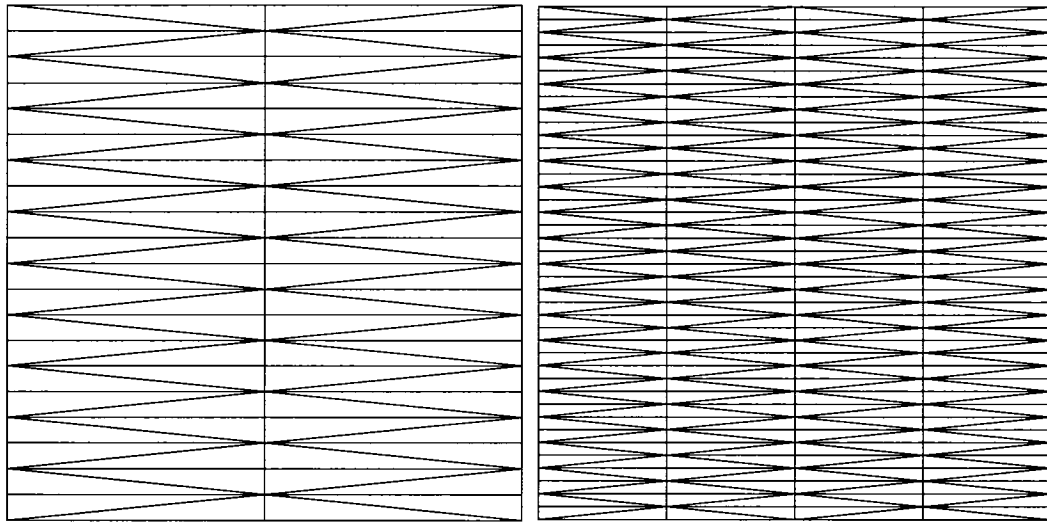


FIGURE 3.2 Exemples de maillages anisotropes en drapeau britannique, ADB .

au tableau 3.3, où on remarque que le plus fin maillage ADB contient 182×1811 éléments.

3.1.2.3 Le maillage isotrope de Delaunay

Une brève description du processus de construction des maillages de type *Delaunay* a été présentée dans les paragraphes précédents. Ici on ne montre que deux exemples de maillages isotropes de type *Delaunay (IDD)* (conforme figure 3.3 et tableau 3.2). On note que le maillage le plus fin contient à peu près 500 000 sommets. En ce qui concerne la valence topologique autour des sommets, elle peut varier d'un sommet à l'autre. À titre d'exemple, on peut retrouver des valences de 5, 6 ou 7 autour des sommets internes.

TABLEAU 3.2 Maillages de type *IDD*

Cas	Nombre de sommets	N_i	N_j
1	3820	56	57
2	7521	80	81
3	14 949	113	114
4	29 780	160	161
5	59 334	226	227
6	118 680	320	321
7	236 831	453	454
8	473 610	640	641

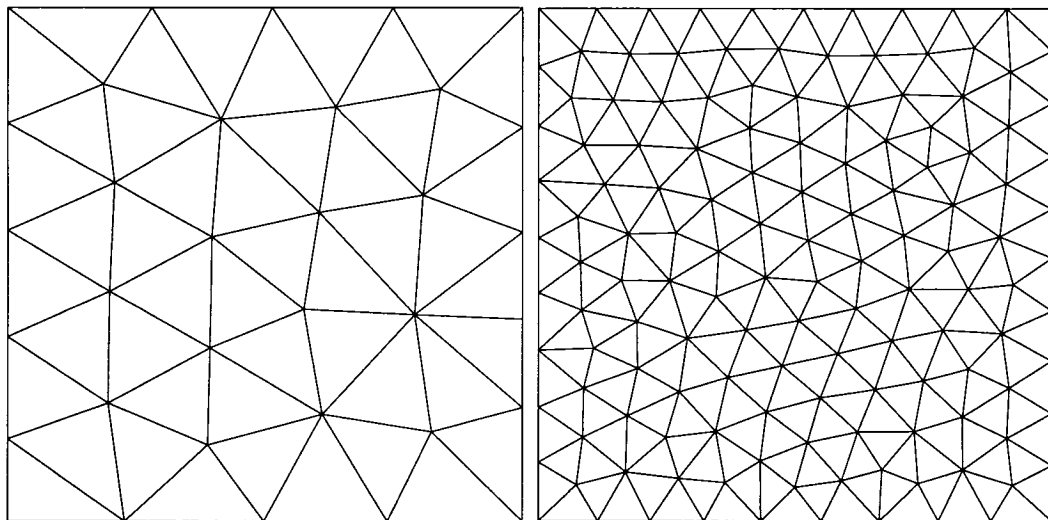


FIGURE 3.3 Exemples de maillages isotropes de Delaunay, *IDD*.

3.1.2.4 Le maillage anisotrope avec angles droits

Pour la construction d'un maillage anisotrope avec angles droits (AAD), on considère aussi un ensemble de rectangles qui sont, ensuite, divisés en deux triangles. On note que les rectangles ne sont pas divisés de la même manière que pour le maillage ADB . Le processus de division se réalise en tenant compte d'une seule diagonale et que toutes les diagonales construites sont parallèles entre elles.

Pour le maillage anisotrope avec angles droits AAD il y a toujours 6 voisins pour chaque sommet interne. En ce qui concerne les sommets appartenant à la frontière, ils ont 2 ou 3 voisins. Dans la construction du maillage AAD on garde le même facteur d'étirement de 10. Des exemples de maillages AAD sont illustrés à la figure 3.4, et les données sur cette famille de maillages on retrouve au tableau 3.3.

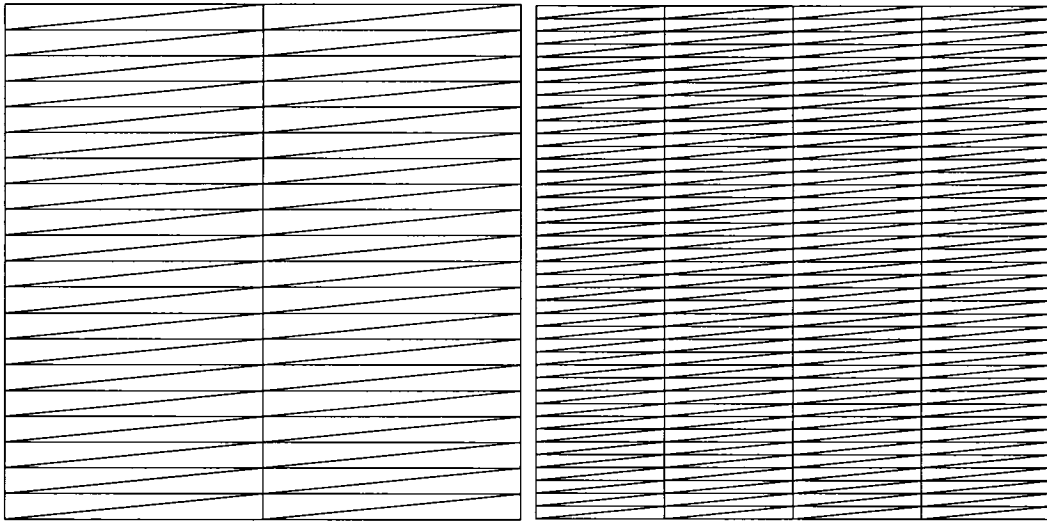


FIGURE 3.4 Exemples de maillages anisotropes avec angles droits, AAD .

3.1.2.5 Le maillage anisotrope avec angles obtus

Le maillage anisotrope avec angles obtus (AAO) est un maillage composé de parallélogrammes divisés en deux triangles, comme le montre la figure 3.5. Pour l'obtention

des triangles obtus étirés, on tient compte de l'étirement proposé et on construit les maillages avec un facteur d'étirement de 10. Les sommets internes pour le maillage *AAO* ont 6 sommets voisins, tandis que sur la frontière, les sommets ont 2, 3 ou 4 voisins. Le tableau 3.3 contient les informations sur les maillages *AAO* :

TABLEAU 3.3 Maillages de type *AAD*, *AAO*, *ADB*

Cas	Nombre de sommets	N_i	N_j
1	2737	17	161
2	5083	23	221
3	10 593	33	321
4	20 746	46	451
5	41 665	65	641
6	81 991	91	901
7	165 249	129	1281
8	329 602	182	1811

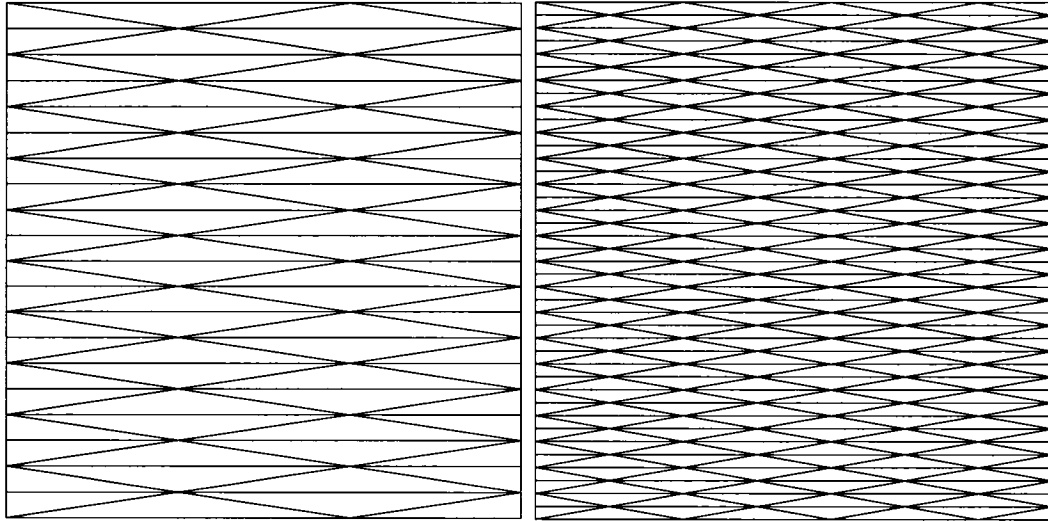


FIGURE 3.5 Exemples de maillages anisotropes avec angles obtus, *AAO*.

3.2 Les fonctions analytiques

Sur chaque type de maillage, présentés ci-dessus, on définit un ensemble de fonctions analytiques. L'ensemble de fonctions analytiques comprend des fonctions simples pour des problèmes réguliers et des fonctions moins régulières ayant de fortes variations localisées, illustrant ainsi les différents types de non-linéarités apparaissant dans des problèmes réels.

Cet ensemble de fonctions analytiques est entièrement connu du point de vue de ses dérivées, ceci permettant à la fois de définir les valeurs exactes des fonctions analytiques à chaque sommet du maillage, ainsi que leurs dérivées secondes et l'étude de la convergence des méthodes de reconstruction du hessien. Les valeurs nodales des fonctions deviennent, ensuite, le point de départ dans la reconstruction numérique des dérivées secondes en utilisant les techniques présentées dans le chapitre 2. Une fois que les dérivées secondes sont reconstruites numériquement, une évaluation de celles-ci, par rapport aux dérivées secondes analytiques connues, s'effectue dans le but d'analyser la convergence des reconstructions du hessien choisies. On précise que le processus de calcul englobe à la fois un maillage, une fonction analytique et une méthode de reconstruction. Pour chaque fonction analytique, ce processus de calcul s'effectue séparément.

Le choix des fonctions analytiques n'est pas facile à faire en tenant compte, d'une part, des comportements réels des problèmes qui peuvent être de type linéaire, polynomiale, exponentielle, etc. et, d'autre part, de la variété des types de fonctions possibles. Cependant, une bonne technique de reconstruction devrait fournir des valeurs exactes des dérivées secondes pour des fonctions simples, comme celles de type quadratique, et présenter des difficultés pour des fonctions complexes. Dans l'esprit de ce qui vient d'être mentionné, un choix de fonctions polynômiales simples, comme celles de type quadratique, semble naturel, tandis que, pour des fonctions plus complexes, on fait référence à *Apel et al. (2004)*, qui suggèrent la fonction décrite par la

relation $u = e^{-kx} + e^{-ky}$. Cette fonction est à peu près constante sur le domaine carré unité, mais au fur et à mesure que la valeur de k augmente, elle présente de fortes variations près de l'origine des axes X et Y . Le comportement de cette fonction représente bien, selon Apel *et al.* (2004), un problème de couche limite laminaire dans un écoulement fluide. On peut voir un exemple de cette fonction et de son comportement près des axes à la figure 3.6.

Ainsi, l'ensemble de fonctions choisies satisfaisant également les hypothèses de la sec-

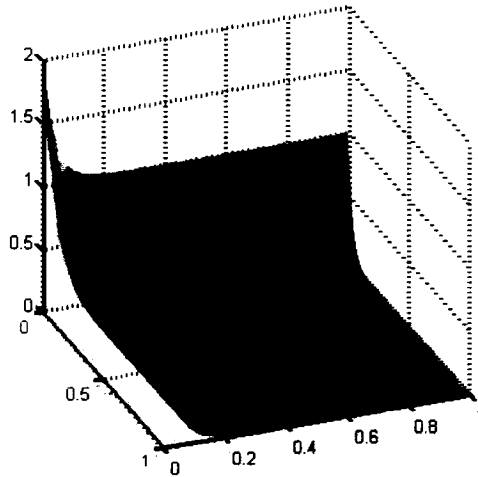


FIGURE 3.6 Fonction $f(x, y) = e^{-25x} + e^{-25y}$ sur le carré unité.

tion 2.5.2, contient à la fois des fonctions analytiques polynômiales et exponentielles :

- fonctions polynômiales :
 - $u_1(x, y) = x^2$, $u_2(x, y) = y^2$, $u_3(x, y) = x^2y^2$, $u_4(x, y) = x^2 + y^2$;
- fonctions exponentielles :
 - $u(x, y) = e^{-kx} + e^{-ky}$ pour $k = 1, 2, 3, 4, 5, 25$.

La raison derrière le choix de plusieurs fonctions analytiques quadratiques se justifie par le désir d'étudier un processus de calcul sur un maillage qui est étiré dans une direction préférentielle qui n'est pas tout à fait la même que la direction de croissance de la fonction analytique. En d'autres mots, si un maillage étiré est construit

pour mettre en évidence la propagation d'un phénomène physique dans la direction d'étirement, par exemple X , mais que la propagation réelle du phénomène se produit dans la direction Y , ce maillage pourrait ne pas fournir les résultats escomptés. On considère quand même la fonction u_2 employée sur des maillages étirés selon X pour évaluer la précision du calcul dans ces cas.

Il paraît évident que l'ensemble des fonctions choisies ne peut pas couvrir tous les aspects et la complexité des problèmes réels. On pourrait choisir d'autres fonctions plus complexes que celles-ci et rien ne nous empêche d'en trouver ou d'en ajouter d'autres, mais pour notre part, cet ensemble de fonctions nous satisfait, car avec ces dix fonctions polynômiales et exponentielles, nous touchons quelques-uns des principaux types de non-linéarité rencontrés dans les problèmes réels.

3.3 La taille caractéristique

Nous avons vu, jusqu'à maintenant, comment construire des solutions numériques par les méthodes de reconstruction choisies, afin d'obtenir des approximations des dérivées secondes. Cela revient à appliquer les techniques de résolution pour l'ensemble des maillages et des fonctions faisant partie du plan du travail proposé. Puisque les méthodologies de calcul utilisées font référence à des interpolations linéaires par morceaux appartenant à l'espace V_h^1 , il est important de connaître le comportement de la solution numérique reconstruite dans l'espace de calcul V_h^1 .

Dans la définition de V_h^1 , l'indice h fait référence à la taille des éléments du maillage. Une augmentation de la finesse du maillage signifie une augmentation du nombre d'éléments. Plus les éléments sont nombreux, plus les éléments sont petits et plus h est petit. La dimension de V_h^1 augmente lorsque h diminue, ce qui reflète l'idée qu'un enrichissement de l'espace V_h^1 assure un rapprochement de la solution numérique vers la solution exacte. On dit que la solution numérique converge vers la solution analytique lorsque la taille des éléments h diminue.

Il y a plusieurs façons de définir la taille d'un maillage. Généralement on note h_K la distance maximale entre deux points d'un élément K , pour qu'ensuite h devienne le maximum de tous les h_K pris sur tous les éléments du maillage. Cette façon de définir la taille d'un maillage est rigoureuse pour des maillages présentant une certaine régularité des éléments. D'autre part, quand on prend en considération des maillages anisotropes, une telle définition de la taille h ne reflète pas bien la réalité. Ceci peut se voir géométriquement en tenant compte du fait que dans la construction d'un maillage anisotrope des éléments très grossiers et d'autres très petits peuvent apparaître. Dans ce cas, pour les éléments grossiers, la taille h est grande, tandis que pour les autres, la taille est petite. Ceci nous conduit à parler de la taille d'un maillage anisotrope.

Il n'y a pas de définition standard pour caractériser la taille h , pour des maillages triangulaires anisotropes. Dans ce travail, en 2D, on utilise l'aire du domaine de calcul $\mathcal{A}_\Omega$ divisée par le nombre d'éléments N , ce qui nous donne la valeur moyenne de l'aire d'un élément, $\bar{\mathcal{A}}$, sur le domaine. Ensuite, on prend la racine carrée de $\bar{\mathcal{A}}$, ce qui donne une moyenne de la longueur caractéristique de l'élément et, ainsi, on définit h comme étant

$$h = (\bar{\mathcal{A}})^{1/2} = (\mathcal{A}_\Omega/N)^{1/2}. \quad (3.1)$$

Cette idée peut être étendue à la dimension d avec $\mathcal{S}_\Omega$ le volume de Ω dans $\mathbb{R}^d$:

$$h = (\mathcal{S}_\Omega/N)^{1/d}.$$

3.4 La norme et la convergence

Quelques études sur le sujet de la reconstruction du hessien ont montré que le comportement habituel des méthodes près des frontières est précaire (voir Hecht (2003), Buscaglia *et al.* (1998)). Pour ce qui est de l'intérieur du domaine, le comportement est acceptable. Près des frontières, l'évaluation numérique des dérivées secondes présente des difficultés à cause de la topologie des sommets, où le support géométrique n'est

pas complet. Il y a des sommets sur les frontières qui sont entourés, par exemple, de seulement 2 éléments, tandis que pour les sommets internes, le support géométrique pourrait contenir, par exemple, un minimum de 4 éléments entourant les sommets internes. Pour mettre en évidence ce type de problème, on évalue séparément l'erreur sur la frontière et à l'intérieur.

Pour analyser la convergence dans l'espace V_h^1 , il faut utiliser une mesure valide dans cet espace. Cette mesure, présentée rigoureusement par la relation (2.4), nous confère, de manière théorique, la méthode de calcul pour l'évaluation de l'erreur. Nous voulons calculer l'erreur donnée par la reconstruction numérique des dérivées d'ordre deux par rapport aux dérivées analytiques. Bien sûr, une évaluation de ces dérivées, à l'aide de l'équation (2.4), ne donne pas d'information sur la convergence de la solution u_h , mais plutôt sur la convergence de ses dérivées, et leur influence sur la solution, ce qui est en accord avec l'objectif de ce travail (voir la section 2.5.2).

La norme L^2 est une mesure très pratique et on la considère pour évaluer les dérivées secondes. Mais comme le hessien est une matrice, on prend en considération la norme matricielle sous la forme de *Frobenius*, qui est définie de la façon suivante :

$$\| H \|_F = \sqrt{\sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n | H_{ij} |^2}. \quad (3.2)$$

Bien sûr, on peut considérer d'autres définitions des normes matricielles comme celles dérivées de la norme vectorielle, $\| H \|_1$, $\| H \|_2$ et $\| H \|_\infty$, mais en tenant compte qu'en fait, toutes les normes sont équivalentes, on garde la façon 3.2 d'évaluer l'erreur. Dans notre cas, la matrice $E_H = H_u - H_h$, où on note $H_h = H(u_h)$ le hessien numérique et $H_u = H(u)$ le hessien analytique, est définie, en 2D, comme une matrice de 2×2 . La mesure de ses valeurs se réalise donc composante par composante, suivant la formulation de *Frobenius* :

$$\| H_u - H_h \|_{L^2}^2 = \sum_{1 \leq i, j \leq 2} \| (H_u)_{i,j} - (H_h)_{i,j} \|_{L^2}^2. \quad (3.3)$$

Ainsi, deux types d'évaluation de norme sont effectuées. Un premier type d'évaluation qui met en évidence le comportement global des méthodes sur le domaine et un deuxième type évalué seulement sur la frontière du domaine. Ainsi, pour le calcul de ces normes on considère le domaine entier (voir figure 3.7.a), et toutes les arêtes formant la frontière du domaine (voir figure 3.7.d).

De plus, on introduit deux évaluations de l'erreur, une sur le domaine interne et une sur tous les éléments touchant la frontière du domaine de calcul. L'introduction de ces deux types d'évaluations de l'erreur est due au fait qu'on veut évaluer la performance des méthodes de reconstruction à l'intérieur du domaine de calcul et près des frontières. De cette façon, on peut observer l'évolution des reconstructions séparément sur le domaine interne et près des frontières, et leur influence dans le contexte de l'estimation d'erreur sur le domaine de calcul. Dans ces cas-ci, il est aussi important d'utiliser des valeurs quantitatives pouvant être comparées, ce qui conduit à adimensionnaliser ces évaluations de l'erreur avec l'aire du support du domaine. Pour ces deux évaluations on prend tous les éléments qui touchent la frontière du domaine (voir figure 3.7.b), et tous les éléments internes (voir figure 3.7.c).

Une fois évaluées, les erreurs sur les domaines considérés sont ensuite divisées par l'aire du domaine d'évaluation (conforme figure 3.7 a, b et c) ou par la longueur de la frontière (conforme figure 3.7.d). On remarque que l'aire du domaine complet qu'on considère est toujours 1 et la longueur de la frontière est toujours 4, tandis que pour les autres cas, les aires varient en fonction de la finesse du maillage. Ensuite, toutes ces évaluations de l'erreur sont représentées sur une échelle logarithmique en fonction de h , sous la forme de graphiques de convergence. Parce que les h choisis pour tous les types de maillages sont suffisamment petits, on s'attend à atteindre les courbes asymptotiques et en ce qui concerne l'ordre de convergence, il peut être calculé à partir de la pente du graphe de convergence. Les graphiques de convergence, illustrés en annexe, montrent l'évolution de l'erreur entre le hessien exact et le hessien numérique, en fonction de la taille h caractéristique du maillage, et l'ordre de convergence. Pour

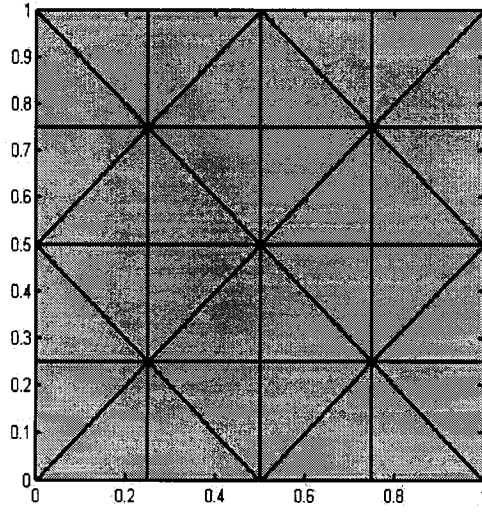
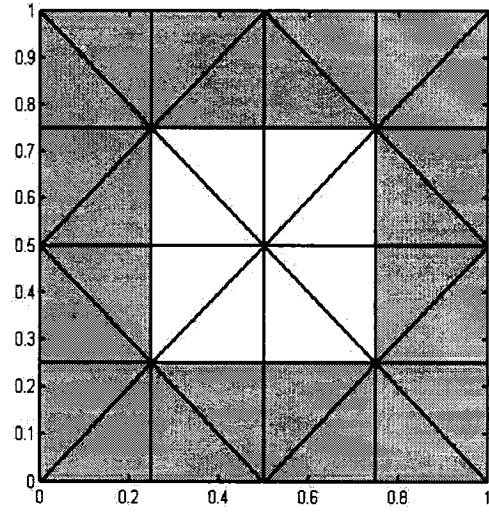
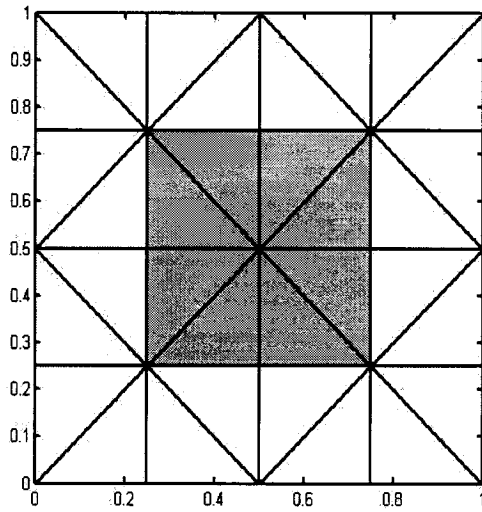
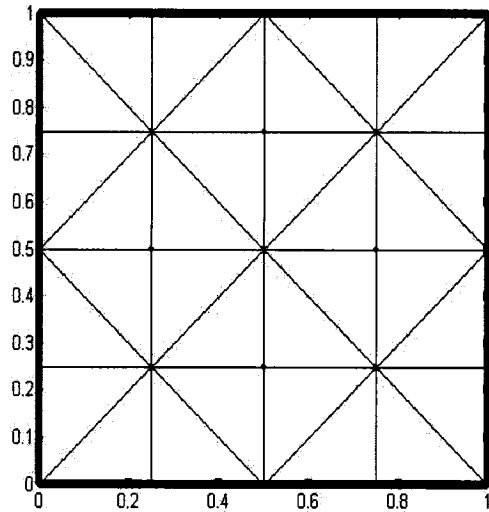
(a) Domaine entier - Ω (b) Domaine frontière - Ω_1 (c) Domaine interne - Ω_2 (d) Frontière - Ω_3

FIGURE 3.7 Les domaines considérés pour l'évaluation de l'erreur.

faciliter l'analyse de la convergence qui sera effectuée dans le chapitre suivant, on note par Ω , le domaine entier et ses sous-domaines par Ω_1 , Ω_2 et Ω_3 , suivant la succession conforme figure 3.7.

3.5 L'environnement de calcul

On vient de passer en revue les aspects théoriques et méthodologiques nécessaires pour comprendre le problème posé. La clarté de toutes ces idées rend possible la création d'un plan systématique ayant comme but l'investigation de la performance de certaines techniques de calcul des dérivées secondes. Ce plan constitue un *protocole d'expérimentation* et il fait l'objet d'une mise en oeuvre sous la forme d'un environnement numérique de test, dont les principales fonctions sont :

- l'exécution complète du processus de calcul pour un cas test ;
- l'automatisation du processus de calcul traitant, à la fois, tous les cas tests ;
- le stockage et l'administration des résultats obtenus ;
- la réalisation et la visualisation graphique de la solution obtenue.

Dans ce contexte, l'exécution complète d'une campagne de tests utilise une quantité considérable de ressources, tant au niveau du temps de calcul qu'au niveau du stockage des données générées. À titre d'exemple, on rappelle que le protocole contient 5 types de maillages et que chacun de ces types contient 8 maillages de plus en plus fins. Par ailleurs, 5 techniques de reconstruction sont évaluées pour 10 fonctions analytiques à l'aide de 4 instruments d'évaluation de l'erreur. Cependant, rien ne nous empêche, par exemple, de changer les éléments constitutifs du protocole. En fait, l'idée est de considérer ce protocole comme un outil facilitant l'investigation d'autres méthodes ou même le développement de nouvelles méthodes de reconstruction.

Comme on vient de le préciser ce protocole permet le passage automatique sur chaque technique de reconstruction allant de la manipulation des structures des données d'entrée de type maillage jusqu'à la visualisation graphique des résultats. La construction de ce protocole est réalisée sous la forme d'un module C++ contenant un ensemble de classes d'objets suffisamment riches et extensibles, permettant d'une part l'analyse des techniques de reconstructions considérées, et d'autre part le développement de nouvelles reconstructions. Une description du protocole est faite en annexe.

CHAPITRE 4

LES RÉSULTATS NUMÉRIQUES

Toutes les caractéristiques théoriques et pratiques détaillées dans les chapitres précédents ont préparé le «terrain» pour la présentation des problèmes des méthodes de reconstruction du hessien que nous avons observés. Ces problèmes nous ont amené à regarder en profondeur les méthodologies de calcul des techniques de reconstruction des dérivées secondes et à les comparer du point de vue de leur performance. C'est donc dans ce chapitre que nous proposons de montrer la performance des méthodes de reconstruction en s'appuyant sur leurs comportements et leurs sensibilités.

Ce chapitre est organisé en quatre sections. Dans la section 4.1 sont présentés les problèmes identifiés en utilisant le remailleur **OORT** développé à l'École Polytechnique de Montréal. La deuxième section est consacrée à la validation des implantations des méthodes de reconstruction proposées. Des résultats numériques exacts pour des champs analytiques simple permettent de valider les reconstructions proposées. Dans la section 4.3, nous entamons la présentation comparative des méthodes de reconstruction en proposant l'analyse des résultats numériques obtenus pour le cas de la fonction analytique $u_{10} = e^{-25x} + e^{-25y}$, considérée comme étant représentative pour la plupart des cas testés. Dans cette section, nous nous consacrons à l'étude de chaque type de reconstruction en tenant compte des caractéristiques topologiques et géométriques des maillages tests utilisés. La même analyse est reprise dans la dernière section où nous présentons les aspects généraux des méthodes de reconstruction.

4.1 La reconstruction du hessien dans *OORT*

Le point de départ de ce travail repose sur les expériences numériques effectués avec le remailleur **OORT**, (**O**bject-**O**riented **R**emeshing **T**oolkit) développé à l'École Polytechnique de Montréal. Le remailleur **OORT** est utilisé dans l'implantation du processus d'adaptation de maillages. Dans le contexte de **OORT**, le hessien numérique est reconstruit à partir de la solution numérique en utilisant la méthode de la simple approximation linéaire, *SAL*. Premièrement, le gradient de la solution numérique est reconstruit par la technique de *ZZ*. Ensuite la reconstruction linéaire du gradient est dérivée pour obtenir les dérivées secondes. Les expériences numériques effectuées à l'aide de ce type de reconstruction montrent que les problèmes rencontrés s'identifient comme des sensibilités liées à la construction du maillage. Dans cette idée, nous présentons d'abord les résultats numériques obtenus avec **OORT**.

Prenons comme exemple les fonctions analytiques de type quadratique, u_1 , u_2 et u_4 , pour lesquelles les dérivées secondes analytiques sont faciles à calculer. Pour la fonction u_1 , on trouve le hessien analytique $\mathcal{H}_{u_1}$, qui a comme composantes $(\mathcal{H}_{xx}, \mathcal{H}_{xy}, \mathcal{H}_{yx}, \mathcal{H}_{yy}) = (2, 0, 0, 0)$. Comme la fonction u_1 est une fonction simple, on s'attend à des résultats numériques exacts.

On peut voir, à la figure 4.1 et à la figure 4.2 le comportement de la méthode *SAL* sur des maillages isotropes de *Delaunay*, *IDD*, et sur des maillages isotropes en drapeau britannique, *IDB*. Pour les maillages de *Delaunay* (voir figure 4.1), les résultats numériques montrent que la méthode *SAL* donne des résultats s'approchant de la valeur analytique. On remarque dans cette figure que les valeurs reconstruites des dérivées secondes aux sommets du maillage de type *IDD* varient entre 1,8 et 2,2. On observe aussi que pour des maillages de type *IDB* (voir figure 4.2), les valeurs reconstruites du hessien $\mathcal{H}_{u_1}^{xx}$ qui devraient s'approcher de 2, varient en réalité de 1,8 à 3. En ce qui concerne le comportement de la méthode *SAL* sur des maillages avec des éléments étirés et des angles obtus (*AAO*) on observe, à la figure 4.3, que près des frontières les

valeurs nodales du hessien reconstruit sont de 1,8, tandis que à l'intérieur du domaine les valeurs nodales reconstruites sont exactes.

L'analyse de ces tests numériques nous amène à conclure que la méthode *SAL* est sensible à la valence topologique du maillage utilisé et que son comportement près des frontières est précaire.

Des expériences numériques similaires ont été reprises pour une autre méthode de reconstruction pour identifier les facteurs pouvant influencer la performance des techniques de reconstructions. La deuxième méthode choisie dans notre analyse est la méthode de reconstruction *DPL2*, qui utilise une double projection dans l'espace L^2 , et de laquelle on s'attendait qu'elle ait des difficultés près des frontières du domaine, (voir Hecht (2003)). Les valeurs reconstruites illustrées aux figures 4.4 et 4.5 correspondent à l'utilisation de la méthode de reconstruction *DPL2* pour la même fonction analytique u_1 .

Pour les maillages isotropes de *Delaunay* (voir figure 4.4), nous observons que les valeurs nodales reconstruites varient de 1, sur les frontières, jusqu'à 2 sur le domaine interne. De plus on remarque que près des frontières du domaine il existe des valeurs nodales reconstruites de 1,5. Ceci nous permet de dire que près des frontières le calcul des dérivées secondes par la technique *DPL2* est influencé par les valeurs reconstruites sur les frontières. On peut dire que tant que la reconstruction du hessien n'est pas «précise» sur les sommets frontières on aura toujours près des frontières des valeurs reconstruites qui sont moins «précises». On retrouve le même comportement pour des maillages isotropes de type *IDB* (voir figure 4.5) et pour des maillages anisotropes de type *AAD* et *AAO* (voir la figure 4.6).

Par conséquent, en analysant les résultats ci-dessus, on observe que, pour la méthode *DPL2* l'imprécision de calcul sur les frontières se propage vers l'intérieur du domaine dans le voisinage de la frontière. Ceci est en accord avec le fait qu'elle dépend clairement du support géométrique entourant les sommets (voir la description de la méthode *DPL2*). Un exemple de ce qu'on vient de mentionner on remarque

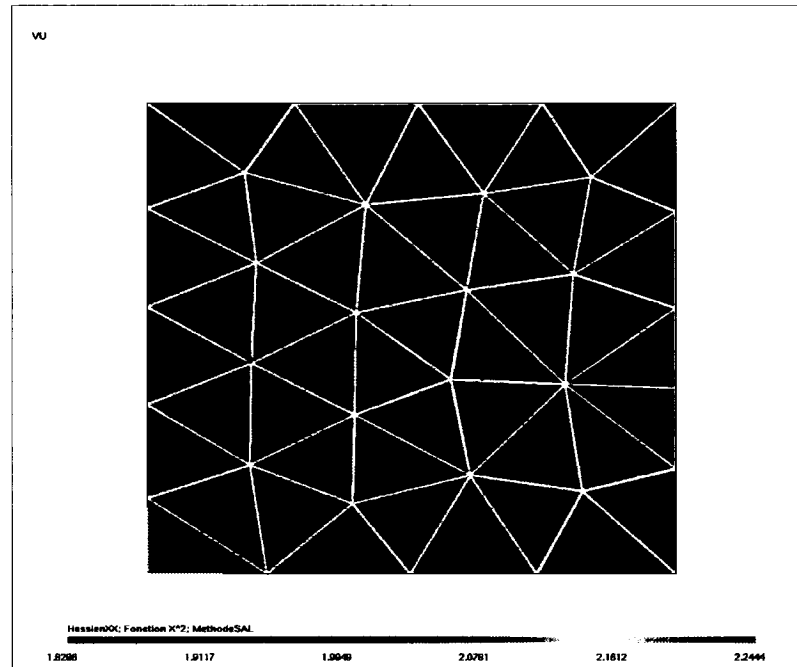
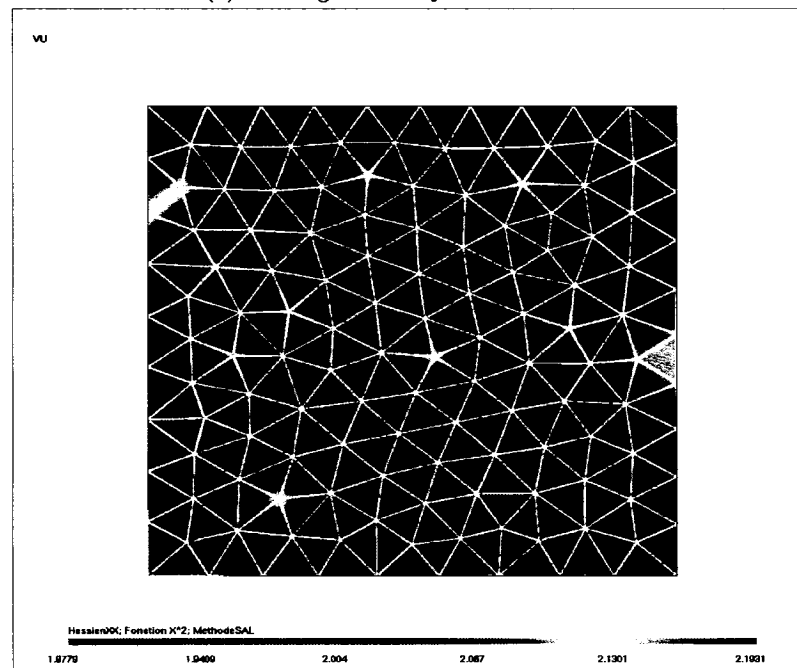
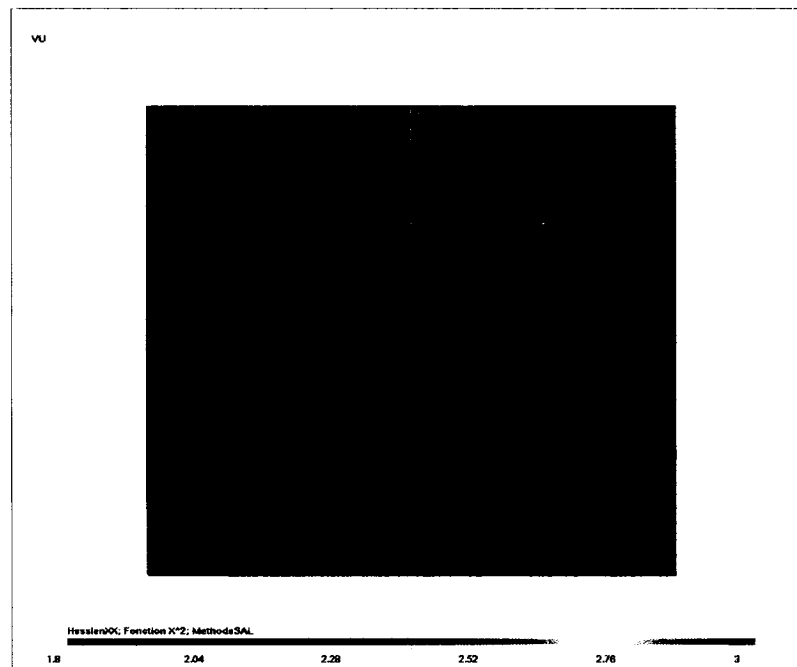
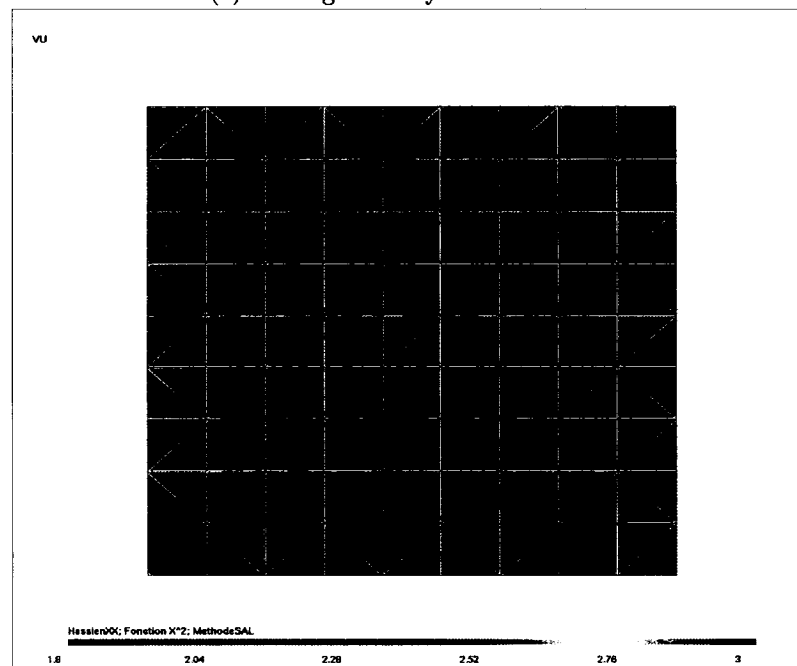
(a) Maillages *IDD* ayant 34 sommets(b) Maillages de *IDD* ayant 138 sommets

FIGURE 4.1 Méthode de reconstruction *SAL* pour la fonction u_1 , sur des maillages isotropes de *Delaunay*.

(a) Maillage *IDB* ayant 25 sommets(b) Maillage *IDB* ayant 100 sommetsFIGURE 4.2 Méthode de reconstruction *SAL* pour la fonction u_1 , sur des maillages isotropes en drapeau britannique.

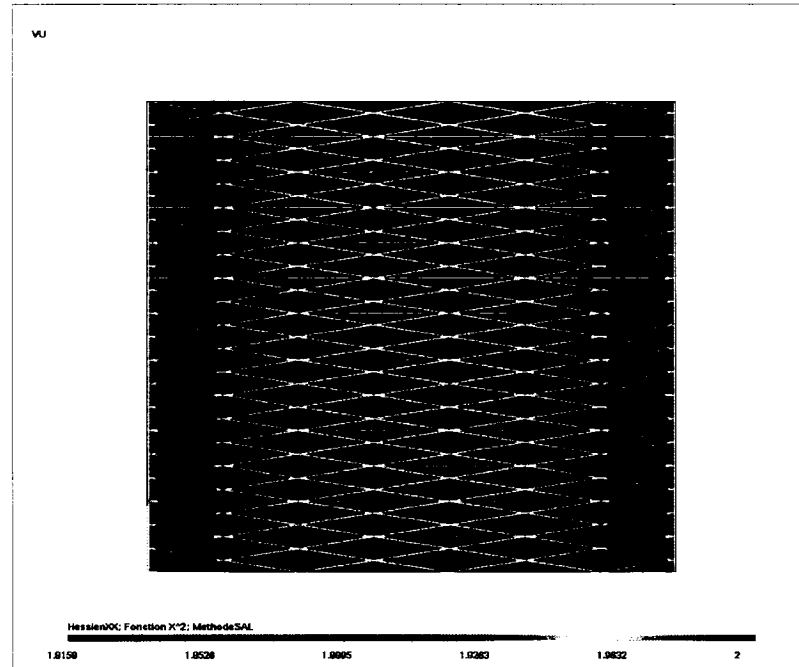


FIGURE 4.3 Méthode de reconstruction *SAL* pour la fonction u_1 , sur des maillages anisotropes avec des angles obtus, *AAO*.

dans le cas du maillage anisotrope de type *AAD*. Sur le maillage tel qu'il est illustré à la figure 4.6.a, il y a deux éléments dans le coin du domaine ou deux sommets-coin pour lesquels la cellule ne contient qu'un seul élément. Nous remarquons que la valeur reconstruite obtenue dans ces cas-ci est autour de 0,6, ce qui nous montre la dépendance de la méthode en fonction du support géométrique autour du sommet.

Les figures présentées ci-dessus montrent le comportement de deux méthodes de reconstructions du hessien, où l'on voit des problèmes autant sur le domaine interne que sur la frontière. Ces aspects nous ont intéressés et font l'objet des paragraphes suivants. En même temps, pour éviter d'alourdir l'analyse du comportement de chaque méthode de reconstruction, on la sépare selon les maillages, les fonctions et les mesures. On rappelle que les évaluations de l'erreur utilisées suivent le comportement de l'erreur sur le domaine Ω entier, le domaine frontière Ω_1 , le domaine interne Ω_2 , et la frontière seulement Ω_3 (voir figure 3.7).

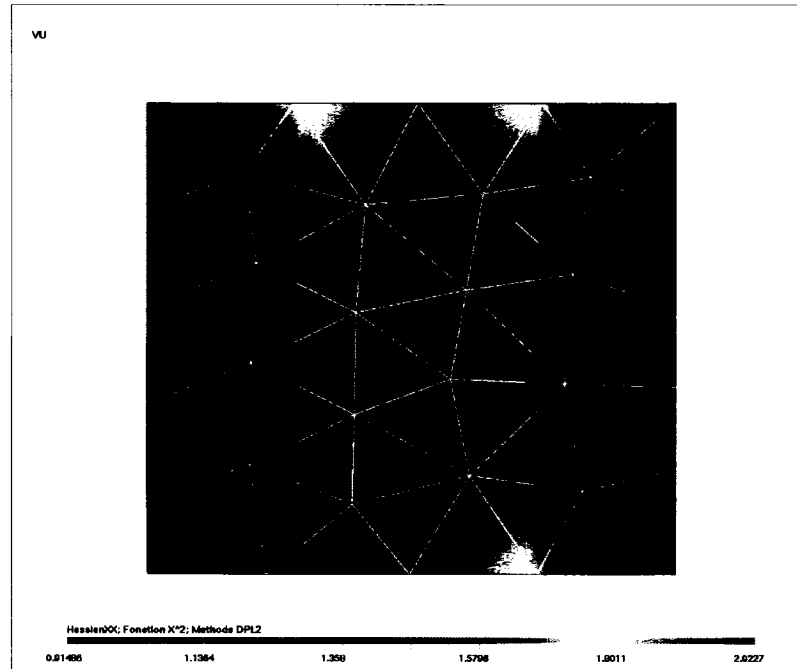
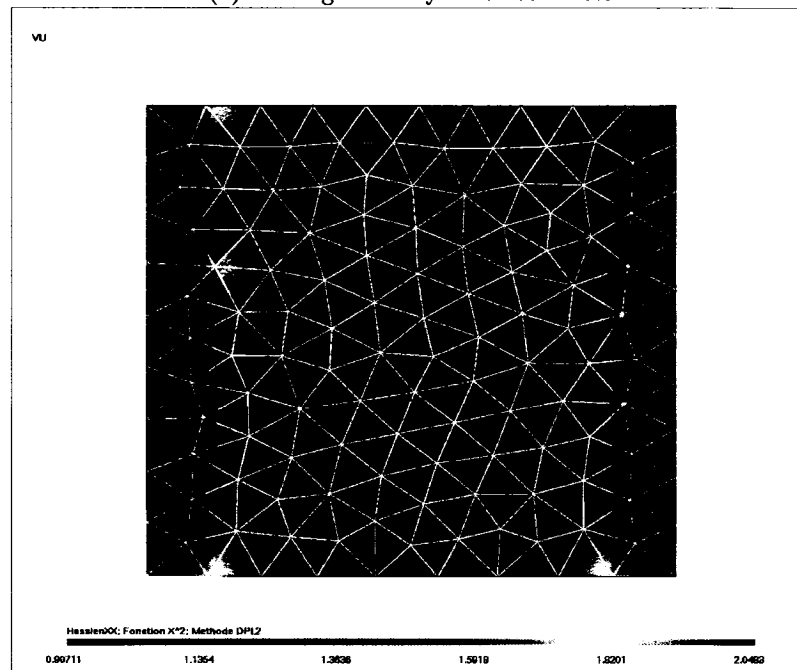
(a) Maillage *IDD* ayant 34 sommets(b) Maillage *IDD* ayant 138 sommets

FIGURE 4.4 Méthode de reconstruction *DPL2* pour la fonction u_1 , sur des maillages isotropes de *Delaunay*.

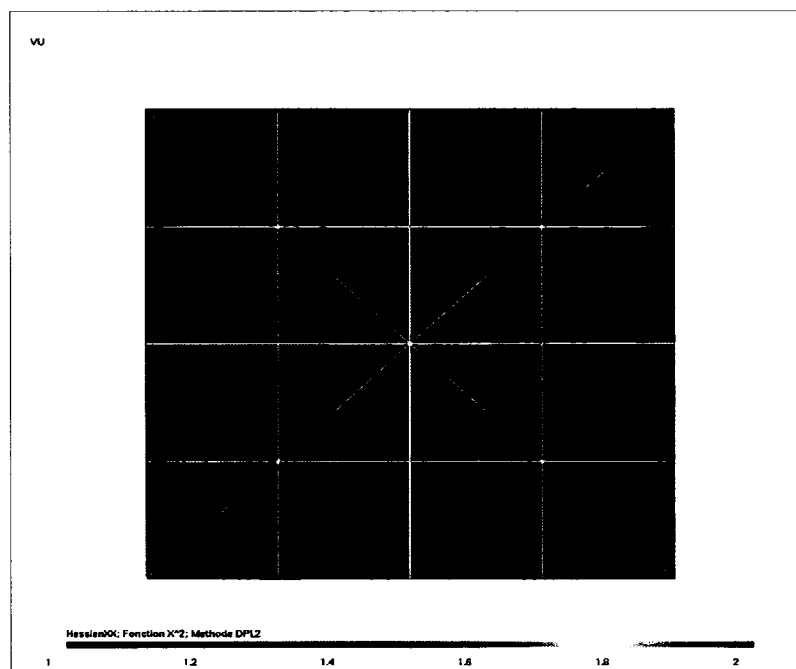
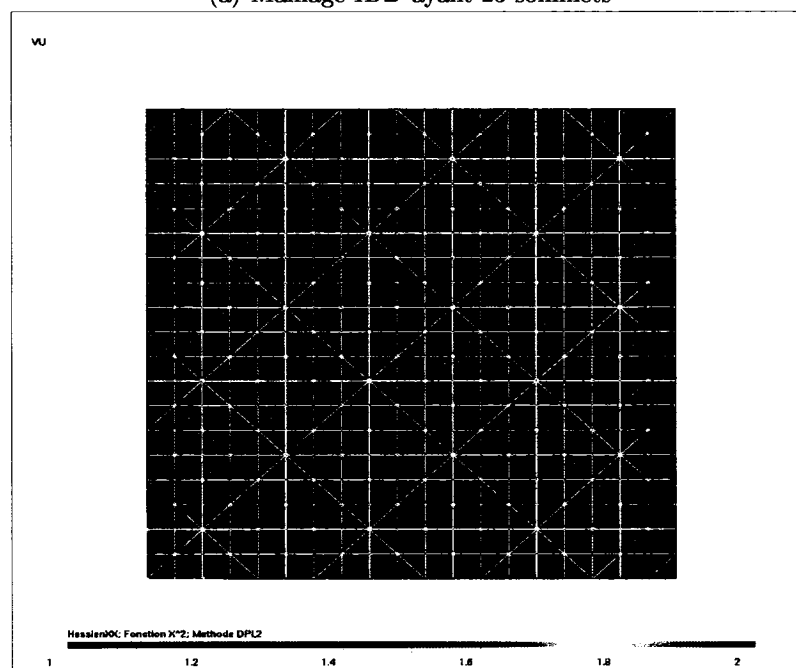
(a) Maillage *IDB* ayant 25 sommets(b) Maillage *IDB* ayant 400 sommets

FIGURE 4.5 Méthode de reconstruction *DPL2* pour la fonction u_1 , sur des maillages isotropes en drapeau britannique.

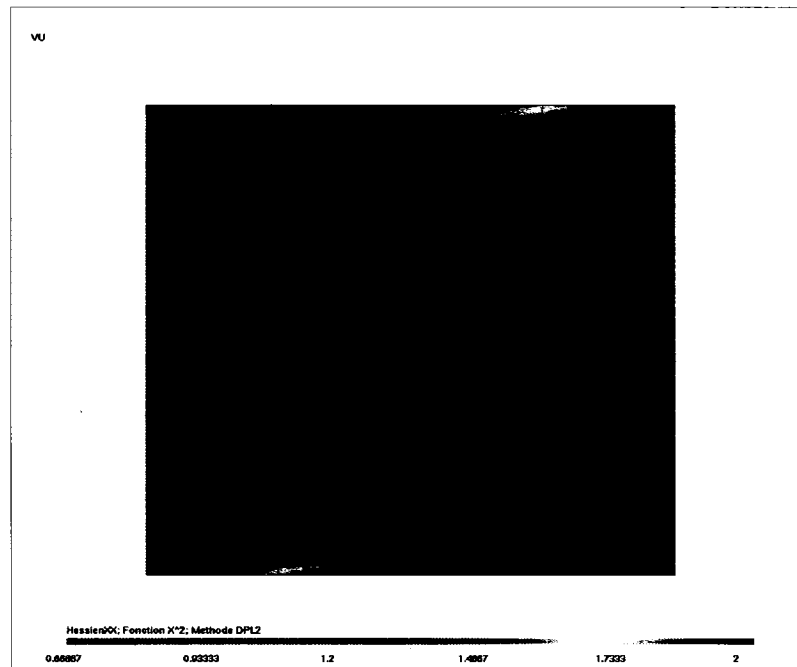
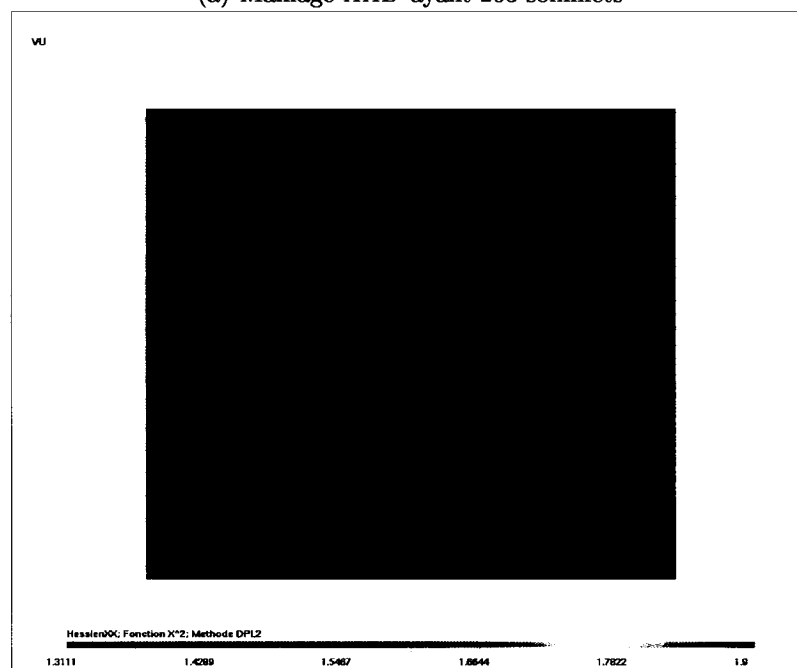
(a) Maillage *AAD* ayant 205 sommets(b) Maillage *AAO* ayant 205 sommets

FIGURE 4.6 Méthode de reconstruction *DPL2* pour la fonction u_1 , sur des maillages anisotropes *AAD* et *AAO*.

4.2 La validation des méthodes de reconstruction

En se basant sur nos observations lors des expériences numériques effectuées pour la reconstruction *SAL* dans le contexte de **OORT**, on présente ici des tests numériques menant à la validation des méthodes de reconstruction qui ne sont pas implémentées dans **OORT**. On fait référence ici aux méthodes de reconstruction *DPL2*, *DAL* et *AQ*. On note que la méthode *DIP* est identique du point de vue algorithmique à la méthode *DPL2*, alors on ne présente que les résultats de la méthode *DPL2*. Dans ce cas, on s'attend à ce que ces méthodes donnent des résultats exacts (jusqu'à la précision machine) pour des fonctions simples sur différents maillages. Si c'est bien le cas, ce sera la démonstration que les implantations sont correctes.

Nous proposons donc de montrer la validité de ces méthodes de reconstruction pour le cas de la fonction linéaire $u = x$, pour laquelle le hessien analytique est nul. Selon les graphes de convergence sur Ω de la figure 4.7, ces techniques de reconstruction se comportent comme prévu, c.-à.-d. le hessien de u est calculé jusqu'à la précision machine et que dans l'évaluation du $\|H_u - H_h\|_{L^2(\Omega)}$ n'intervient que le cumul des erreurs numériques. On note que *AQ* se comporte de la même façon pour des champs analytiques quadratiques, i.e. *AQ* est exacte jusqu'à la précision machine.

4.3 Les résultats numériques pour la fonction $u_{10} = e^{-25x} + e^{-25y}$

Les tests numériques qu'on propose de présenter ci-dessous ont été effectués avec la fonction exponentielle $u_{10} = e^{-25x} + e^{-25y}$ qui est représentative de la plupart des résultats obtenus. Comme on a montré dans les chapitres précédents, les expériences numériques réalisées tiennent compte à la fois de chaque technique de reconstruction, de tous les types de maillages et de l'évaluation de l'erreur qui se réalise sur le domaine Ω entier, et sur ses sous-domaines Ω_1 , Ω_2 et Ω_3 . Chaque méthode de reconstruction est étudiée dans les paragraphes suivants du point de vue de la convergence et de la

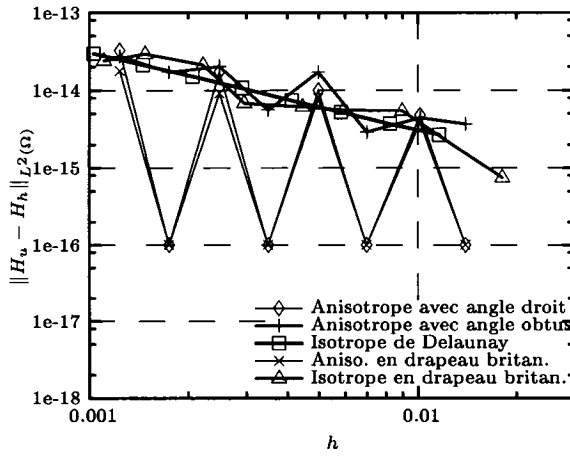
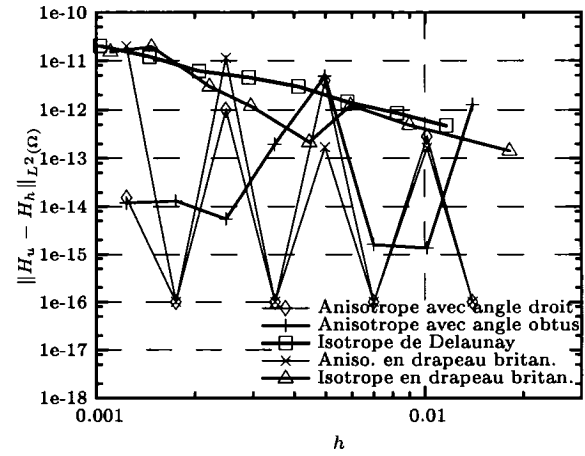
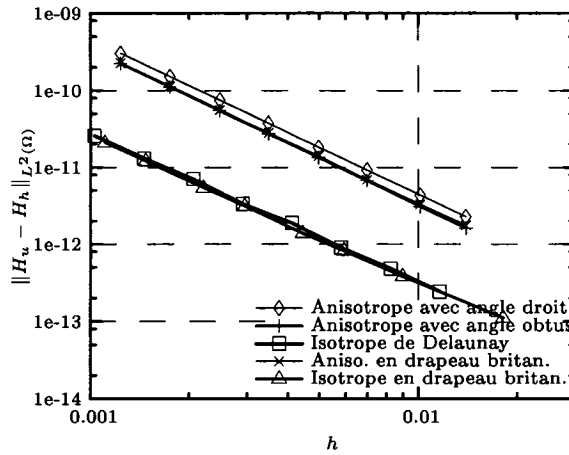
(a) Méthode de reconstruction *DPL2*(b) Méthode de reconstruction *DAL*(c) Méthode de reconstruction *AQ*

FIGURE 4.7 La validation des méthodes de reconstruction *DPL2*, *DAL* et *AQ* pour la fonction $u = x$. Graphes de convergence pour le domaine Ω entier.

robustesse. Ainsi, un point clef dans la comparaison des méthodes de reconstruction des dérivées secondes que nous proposons est l'étude de leurs comportements en fonction des caractéristiques géométriques et topologiques des maillages testés.

4.3.1 La simple approximation linéaire

Comme on a observé à la section 4.1, la méthode *SAL* présente des difficultés qui dépendent de la régularité topologique du maillage. Les résultats numériques obtenus sur tous les types de maillages montrent que la méthode *SAL* présente une convergence dans le cas des maillages ayant une valence topologique interne de 6 autour des sommets et ne converge pas dans d'autres cas. Ces aspects sont montrés à la figure 4.8, où on observe que pour des maillages de type *IDB* et *ADB*, la méthode ne converge pas. Pour des maillages de type Delaunay, pour lesquels on retrouve une valence topologique égale à 6, 7 ou 8, la convergence est erratique, ce qui se voit sur Ω et sur Ω_2 (domaine interne). Dans le cas des maillages ayant une valence uniforme (valence interne de six éléments) autour d'un sommet, la méthode présente une convergence. C'est le cas des maillages *AAD* pour lesquels on trouve une convergence proche de l'ordre $\mathcal{O}(h^{1.0})$ sur Ω et Ω_2 . En ce qui concerne les maillages anisotropes avec des angles obtus, où on retrouve de même une valence topologique interne uniforme, la méthode *SAL* est moins performante que dans le cas des maillages *AAD*, et la convergence atteint est d'ordre $\mathcal{O}(h^{0.2})$ sur le domaine interne. Pour les frontières on observe que le comportement de la méthode *SAL* est comparable à celui du domaine, ou pire.

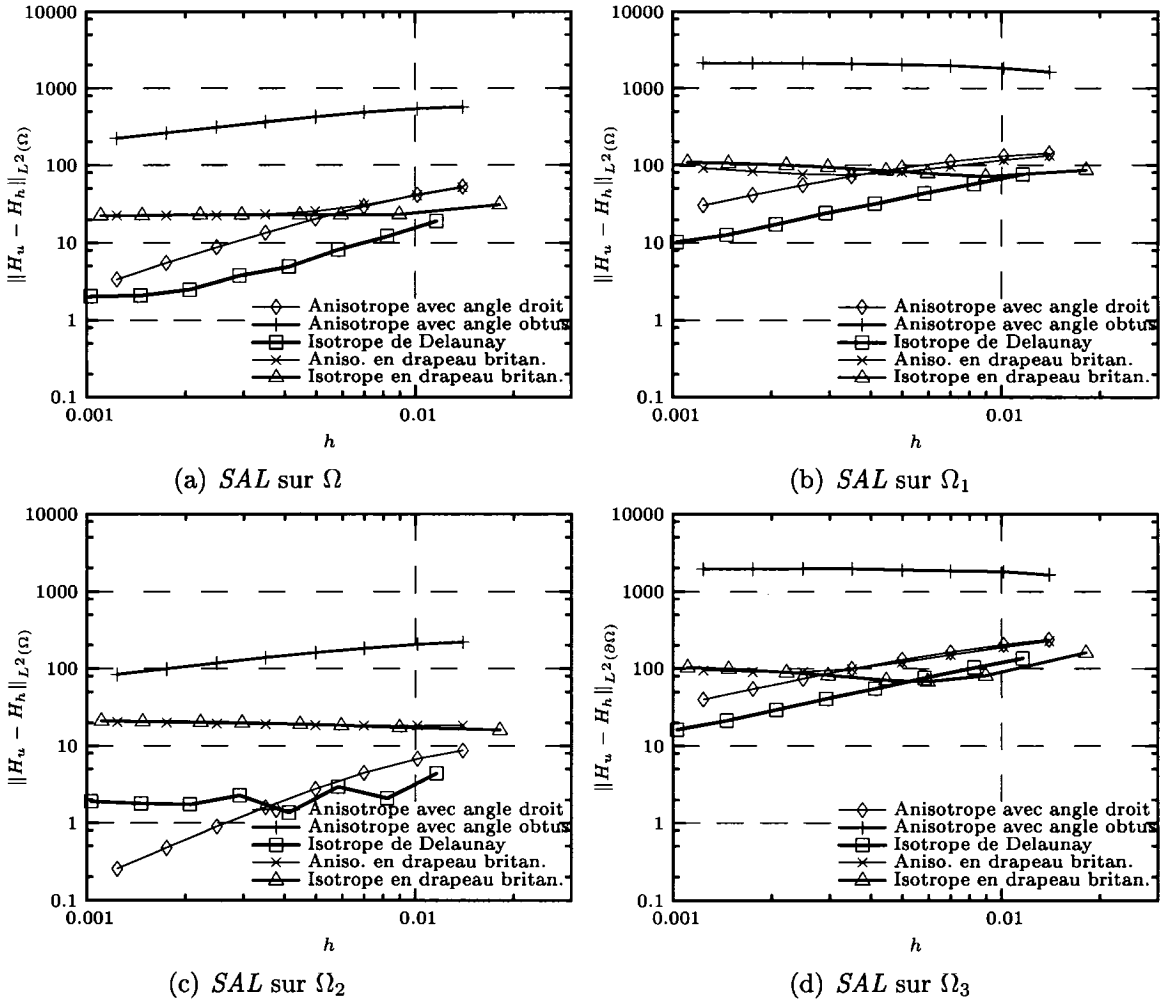


FIGURE 4.8 Graphes de convergence : Méthode *SAL* avec la fonction u_{10} .

4.3.2 L'approximation quadratique

Les expériences numériques effectués sur tous les types de maillages montrent que la méthode AQ présente un ordre de convergence qui ne dépend pas de caractéristiques particulières des maillages, comme celles introduites par la valence topologique autour des sommets, les anisotropies des éléments ou les angles obtus des éléments. Ainsi, la méthode AQ présente une convergence d'ordre $\mathcal{O}(h^{1.2})$ sur Ω_2 et d'ordre $\mathcal{O}(h^{1.0})$ pour les autres domaines. Du point de vue de la précision, on observe que pour les maillages isotropes IDD et IDB , la performance est meilleure, ce qui se voit de même pour les autres champs analytiques testés. Mais ceci n'affecte pas la robustesse de cette méthode. Tous ces aspects sont illustrés à la figure 4.9.

4.3.3 La double projection L^2

La méthode $DPL2$ présente une convergence pour le domaine Ω et le domaine interne Ω_2 , tel qu'illustré à la figure 4.10.a et c. Comme les expériences numériques le montrent pour le domaine Ω , la méthode $DPL2$ présente une convergence indépendante des caractéristiques de construction des maillages. La convergence atteinte est d'ordre $\mathcal{O}(h^{0.5})$ ce qui est en accord avec le travail de Hecht (2003). On retrouve le même comportement pour le domaine interne, tandis que pour les frontières la méthode présente des difficultés évidentes. Il est connu que cette méthode ne converge pas sur les frontières et c'est ce que nous montre la figure 4.10.d, où on observe une convergence très lente d'ordre $\mathcal{O}(h^{0.25})$ sur le bord. En effet, tel que montré à la section 4.1, il-y-a toujours des sommets frontières pour lesquels les valeurs reconstruites du hessien sont mauvaises. Cela se produit indépendamment du raffinement effectué.

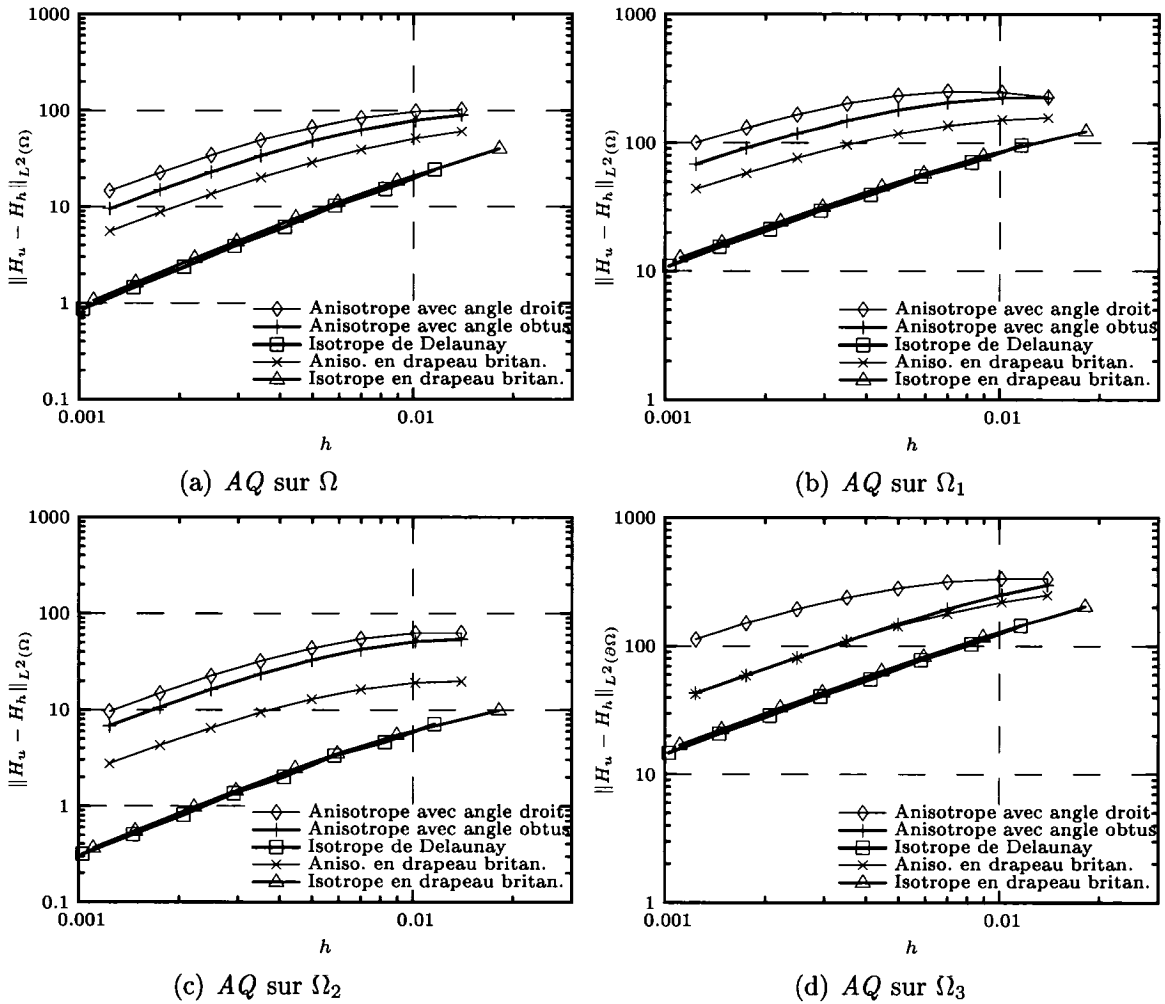
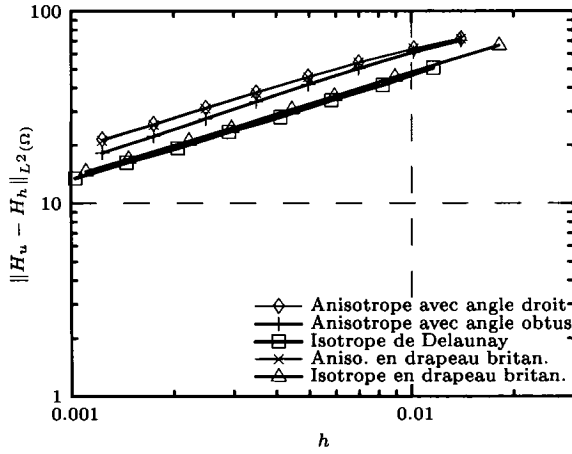
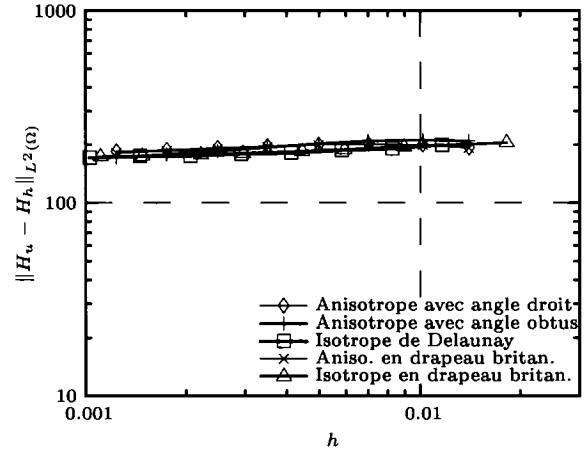
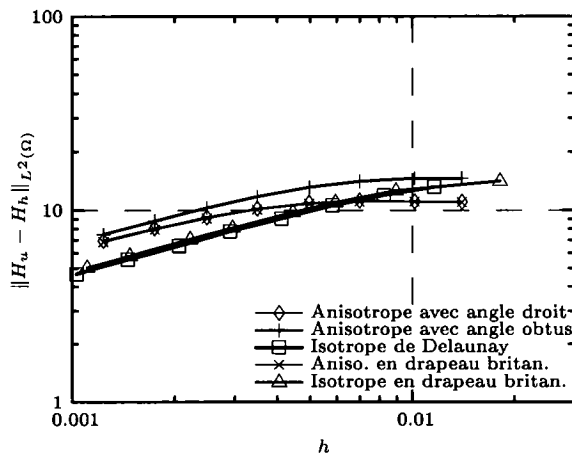
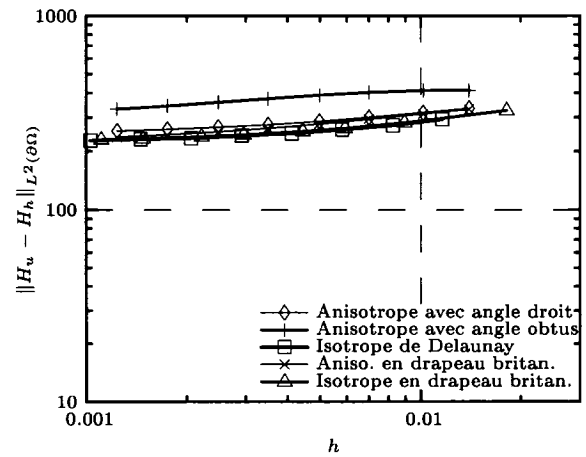


FIGURE 4.9 Graphes de convergence : Méthode AQ avec la fonction u_{10} .

(a) *DPL2* sur Ω (b) *DPL2* sur Ω_1 (c) *DPL2* sur Ω_2 (d) *DPL2* sur Ω_3 FIGURE 4.10 Graphes de convergence : Méthode *DPL2* avec la fonction u_{10} .

4.3.4 La double approximation linéaire

La méthode *DAL* est caractérisée par un comportement comparable à celui de la double projection L^2 sur le domaine entier et sur le domaine interne, où elle a une convergence d'ordre $\mathcal{O}(h^{0.5})$, tandis que sur le bord la «convergence» est à peu près inexistante. On observe de même que la méthode *DAL* (voir la figure 4.11) présente une sensibilité pour les maillages ayant des angles obtus (*AAO*) qui affecte la précision de calcul et la convergence.

4.4 Les caractéristiques générales des résultats numériques

Comme on observe dans la présentation des résultats numériques se trouvant en annexe, les méthodes de reconstruction choisies et analysées présentent des comportements liés principalement à la géométrie des éléments constituant le maillage et à la régularité topologique du maillage. C'est dans cet ordre d'idée que le protocole d'expérimentation proposé ici tient compte des aspects géométriques et topologiques des maillages par l'introduction des anisotropies, des angles obtus et des non-régularités topologiques dans la construction des maillages. De même, les champs analytiques choisis qui s'ajoutent aux critères constructifs du protocole permettent d'une part de valider les méthodes de reconstruction et leur précision de calcul (fonctions polynômiales) et d'autre part d'étudier le comportement de problèmes «réels» (fonctions exponentielles). De plus, les champs analytiques rendent possible l'analyse comparative de la convergence. Il est évident qu'avec tous ces outils, une comparaison peut s'effectuer et c'est ce que nous proposons de faire dans les paragraphes suivants où on présente seulement les caractéristiques générales des résultats numériques :

- La méthode *SAL* présente un comportement qui dépend de la régularité topologique du maillage. En résumant ces comportements, on trouve que dans le cas des maillages *IDB* et *ADB*, la méthode diverge ou présente une convergence pratique-

- ment nulle, allant de l'ordre $\mathcal{O}(h^{0.05})$ à $\mathcal{O}(h^{0.3})$, autant pour les fonctions polynômiales que pour les fonctions exponentielles. Pour les maillages de *Delaunay* (*IDD*) on voit que *SAL* présente une convergence erratique pour les fonctions exponentielles tandis que pour les autres fonctions la convergence est d'ordre $\mathcal{O}(h^{0.3})$ sur Ω . Pour les maillages *AAD*, qui présentent une valence topologique interne uniforme, la méthode *SAL* converge pour les fonctions exponentielles à l'ordre $\mathcal{O}(h^{1.3})$ sur Ω . On voit une convergence sur Ω d'ordre $\mathcal{O}(h^{0.5})$ de même pour les maillages *AAO*. Pour les frontières, *SAL* présente un comportement similaire à celui sur Ω ou pire.
- Pour la méthode *AQ*, on observe qu'elle est exacte (jusqu'à la précision machine) pour les fonctions quadratiques et cela indépendamment du type de maillage. Pour les fonctions exponentielles, on observe une convergence d'ordre $\mathcal{O}(h^{1.0})$ sur Ω_1 et Ω_3 , et d'ordre $\mathcal{O}(h^{1.1})$ à $\mathcal{O}(h^{1.5})$ sur Ω et Ω_2 . Ceci permet de dire qu'elle n'est pas sensible aux caractéristiques particulières des maillages. Sur la base de toutes les expériences numériques effectuées on observe que la reconstruction *AQ* est robuste du point de vue de la convergence. Selon ce travail elle représente le meilleur choix dans la reconstruction du hessien.
 - La méthode *DPL2* donne une convergence qui varie peu pour la plupart des fonctions. Les graphiques montrent que l'ordre de convergence atteint est $\mathcal{O}(h^{0.5})$ pour Ω et Ω_2 et qu'il y a des difficultés près des frontières, où on observe une convergence lente d'ordre $\mathcal{O}(h^{0.1})$ ou inexistante. Ceci s'explique par le fait que cette méthode donne toujours de mauvaises valeurs reconstruites sur les frontières et cela indépendamment du raffinement effectué.
 - De même, *DAL* montre un comportement similaire à celui de la méthode *DPL2*, avec une convergence d'ordre $\mathcal{O}(h^{0.5})$ sur Ω et Ω_2 , et un mauvais comportement près des frontières. On observe de même que *DAL* est moins performante dans le cas des maillages *AAO*, où elle présente des limitations liées aux anisotropies et aux angles obtus introduits dans la construction des maillages.
- Par rapport à la méthode *SAL*, la méthode *DAL* ne présente pas de sensibilité à la

régularité topologique des maillages et on constate que le deuxième lissage de *DAL* élimine un peu les erreurs dues à l'anisotropie ou à la construction du maillage. Par conséquent, les techniques de reconstruction que nous avons analysées dans ce document présentent des limitations liées aux frontières (*SAL*, *DPL2*, *DAL*) ou à la connectivité des éléments du maillage (*SAL*). En même temps, on observe qu'il y a des sensibilités, reliées à l'introduction des angles obtus, pouvant influencer la convergence (*DAL*) ou non (*AQ*). Mais du point de vue de la performance des reconstructions autant sur les frontières que sur le domaine interne, la méthode *AQ* s'avère être la plus robuste des méthodes testées ici.

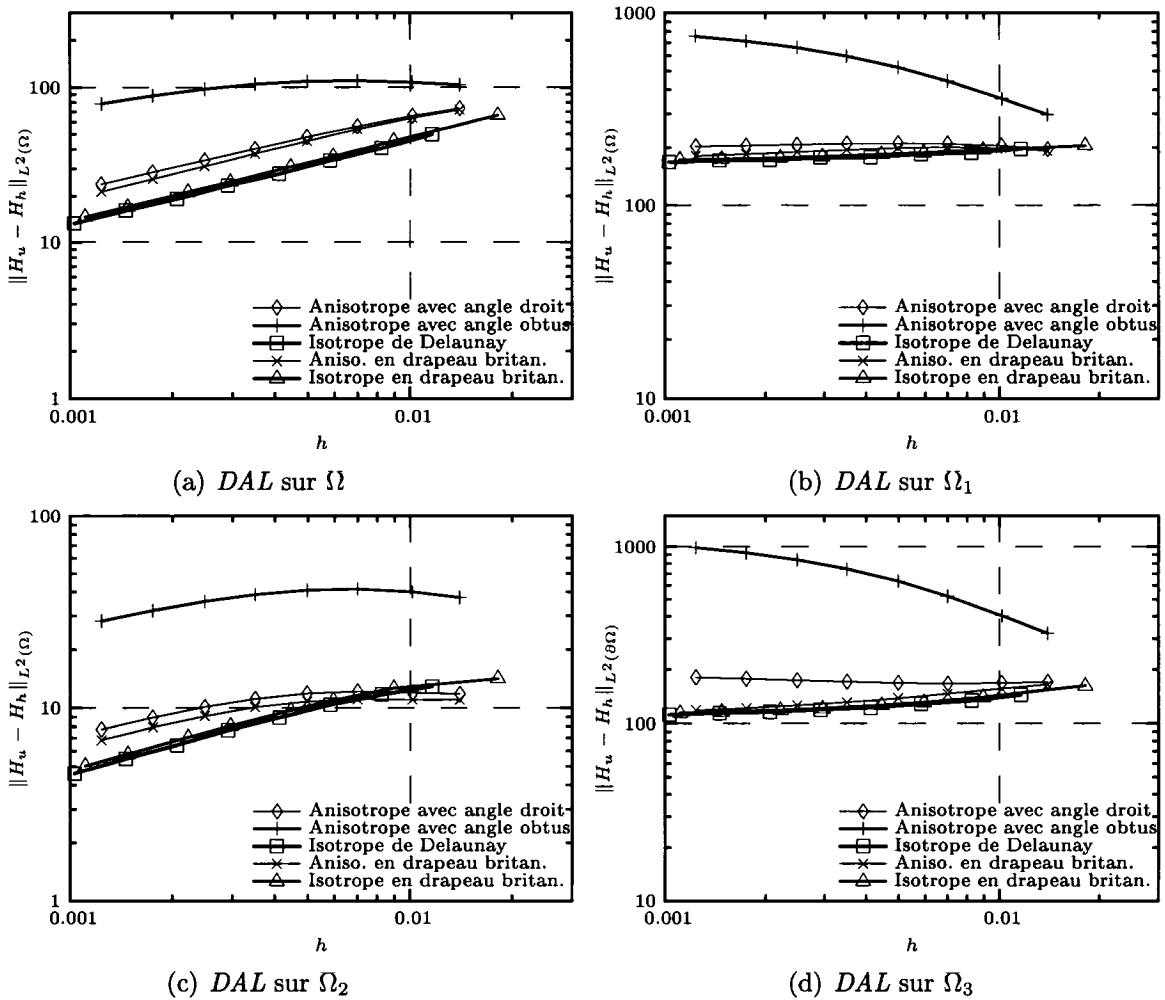


FIGURE 4.11 Graphes de convergence : Méthode *DAL* avec la fonction u_{10} .

CONCLUSION

Dans ce mémoire, nous avons proposé une approche systématique de comparaison des caractéristiques de différentes méthodes de reconstruction des dérivées secondes d'un champ scalaire. Nous avons comparé cinq méthodes de reconstruction publiées récemment et pour lesquelles il n'existait pas de résultats de comparaison. Spécifiquement, nous avons étudié l'influence des caractéristiques géométriques et topologiques des maillages sur chaque méthode de reconstruction, de même que le comportement des méthodes à l'intérieur du domaine et près de la frontière. Au travers de ce travail, quatre contributions principales ont été apportées au domaine d'étude, soit :

- l'analyse détaillée et la comparaison au niveau mathématique, des cinq méthodes de reconstruction,
- l'élaboration d'un protocole systématique de comparaison des méthodes,
- la conception d'un module automatique d'exécution des plans d'expérience, et
- le développement d'un mode de présentation des résultats facilitant la comparaison des méthodes de reconstruction.

Nous avons consacré le chapitre 2 de ce mémoire à la présentation des méthodes de reconstruction des dérivées secondes : la double projection L^2 (*DPL2*) ; la simple approximation linéaire (*SAL*) ; la double approximation linéaire (*DAL*), la double intégration par parties (*DIP*) et l'approximation quadratique (*AQ*). Ces techniques reconstruisent numériquement les dérivées secondes partant d'une solution connue *a priori* aux sommets du maillage. Cette solution est ensuite soumise au processus de calcul spécifique à chaque type de reconstruction à ce que le hessien numérique s'approche du hessien exact. Dans le chapitre 2 nous détaillons chacun des algorithmes de calcul afin de rendre facile l'implantation numérique.

Nous avons observé lors de ce travail que les méthodes de reconstructions ne mènent pas toujours à une bonne évaluation du hessien sur la frontière, car le support des fonctions de base est incomplet. Il est donc préférable, dans ces cas, d'effectuer un

traitement particulier près des frontières. L'un des objectifs principaux de la recherche était d'étudier chaque méthode telle qu'elle avait été présentée par ses auteurs. Pour cette raison, à part la méthodologie spécifique à chacune des méthodes, nous n'avons pas utilisé de traitement spécial près des frontières. Finalement, il s'avère que l'idée de présenter systématiquement des techniques de reconstructions du hessien est nouvelle car, à notre connaissance, il n'existe aucune publication les présentant de cette façon. L'étude des techniques de reconstruction nous a amené à orienter nos recherches vers des aspects pratiques concernant la mise en oeuvre d'une approche de comparaison. Afin de rendre possible et efficace une comparaison, nous sommes arrivés à la conclusion qu'il est judicieux de considérer la construction d'un protocole d'expérimentation permettant d'observer de manière ciblée la robustesse des méthodes de reconstruction. Ainsi, nous avons défini au chapitre 3 les critères de construction du protocole en fonction de l'objectif recherché, soit la performance des méthodes de reconstructions à l'intérieur du domaine et près de la frontière par rapport aux caractéristiques des maillages. Nous avons donc considéré comme des éléments constitutifs du protocole, outre les méthodes de reconstruction elles-mêmes, les maillages, les fonctions et la mesure de l'erreur. Pour donner une certaine rigueur à la comparaison proposée, nous avons choisi une variété de maillages assez fins et de fonctions analytiques. Quant à l'analyse de la convergence nous avons considéré quatre évaluations de l'erreur autant sur la frontière que sur le domaine, offrant ainsi une image détaillée des comportements des méthodes de reconstructions près des frontières. À notre connaissance, l'idée de comparer numériquement des méthodes de reconstruction et la mise en place de critères de mesure sont originaux.

L'approche de comparaison que nous venons de mentionner n'est possible que sur la base d'un module automatique d'exécution des plans d'expériences. La création du module automatisant les calculs fait également l'objet d'une discussion au chapitre 3 où nous avons présenté l'environnement de calcul pour la réalisation du protocole d'expérimentation. C'est donc de façon automatique et en passant systématiquement

par tous les éléments constituant le protocole que les calculs s'effectuent. Ce module se révèle être un instrument d'analyse des méthodes de reconstruction proposées qui peut également servir au développement d'autres méthodes de reconstruction. Il a été conçu spécifiquement pour cette recherche, et constitue une contribution qui facilite l'intégration et la comparaison de différentes méthodes de reconstruction.

Afin d'analyser les méthodes de reconstruction au travers du processus de comparaison, nous avons développé un mode particulier de présentation des résultats répondant aux besoins de cette recherche. La présentation des résultats favorise la compréhension et la comparaison de la robustesse de chacune des méthodes de reconstruction en mettant en évidence leurs comportements à l'intérieur du domaine et près des frontières. Les graphiques des résultats obtenus permettent de conclure qu'il existe des différences importantes de précision quant aux reconstructions numériques tant sur le domaine interne que près des frontières, qui sont étroitement liés aux caractéristiques des maillages. De plus, les graphiques de convergence montrent que la méthode AQ , est très robuste sur la frontière et sur le domaine, ce qui signifie qu'elle est, selon cette recherche, le meilleur choix pour la reconstruction du hessien.

Ce travail nous a donc permis de proposer, sous la forme d'un protocole d'expérimentation, une méthodologie originale de comparaison des méthodes de reconstruction des dérivées secondes. Nous en avons montré l'efficacité lors de son application au travers des expériences effectuées. Par conséquent, il s'avère que ce protocole satisfait l'objectif recherché, à savoir mieux connaître les reconstructions du hessien par rapport aux maillages et identifier la meilleure reconstruction des dérivées secondes. Comme travaux futurs, on pourrait ajouter au protocole d'expérimentation de nouvelles reconstructions, ou d'autres normes ou fonctions (monômes de degré 3, fonctions périodiques de différentes fréquences), ou des méthodes spéciales de traitement des frontières. On pourrait également envisager d'autres évaluations de l'erreur près de la frontière pour remplacer les calculs faits sur Ω_1 . Par exemple, nous pourrions utiliser un domaine ayant une couche d'éléments additionnelle vers l'intérieur du domaine.

RÉFÉRENCES

- ALAUZET, F. (2003). *Adaptation de maillage anisotrope en trois dimensions. Application aux simulations instationnaires en mécanique des fluides*. Thèse de doctorat, Université, Montpellier.
- APEL, T., GROSMAN, S., JIMACK, P. ET MEYER, A. (2004). A new methodology for anisotropic mesh refinement based upon error gradients. *Applied Numerical Mathematics*, 50, 329–341.
- BABUŠKA, I. ET RHEINBOLDT, W. (1978). Error estimates for adaptive finite element computations. *SIAM Journal of Numerical Analysis*, 15, 736–754.
- BANK, R. ET XU, J. (2003). Asymptotically exact a posteriori error estimators, Part I : grids with superconvergence. *SIAM J. on Numerical Analysis*, 41(6), 2294–2312.
- BUSCAGLIA, G., AGOUZAL, A., RAMIREZ, P. ET DARI, E. (1998). On hessian recovery and anisotropic adaptivity. *ECCOMAS Computational Fluid Dynamics Conference*, 4, 403–407.
- CASTRO-DIAZ, M. J., HECHT, F. ET MOHAMMADI, B. (1995). New progress in anisotropic grid adaptation for inviscid and viscous flows simulations. Rapport technique 2671, Institut National de Recherche en Informatique et en Automatique, France.
- DOMPIERRE, J., LABBÉ, P. ET GUIBAULT, F. (2003). Controlling approximation error. K. J. Bathe, éditeur, *Second M. I. T. Conference on Computational Fluid and Solid Mechanics*. Elsevier, Cambridge, MA, 1929–1932.
- DONOHU, L. D. ET GRIMES, C. (2003). Hessian eigenmaps :locally linear embed-

ding techniques for high-dimensional data. *PNAS*, 100, 5591–5596.

FORTIN, A. ET GARON, A. (2000). *Les éléments finis : de la théorie à la pratique*. École Polytechnique de Montréal.

FREY, P. J., BOROUCHAKI, H. ET GEORGE, P.-L. (1996). Tétraédrisation de Delaunay basée sur une approche frontale. Rapport technique 2882, Institut National de Recherche en Informatique et en Automatique, France.

FREY, P. J. ET GEORGE, P. (1999). *Maillages. Applications aux éléments finis*. Hermes Science Publ. Paris.

GUIBAULT, F., LABBÉ, P. ET DOMPIERRE, J. (2002). Adaptivity works! controlling the interpolation error in 3D. 5th World Conference on Computational Mechanics.

HECHT, F. (2003). Métriques et indicateur d'erreur. Rapport technique, INRIA, CEA, EDF, Paris.

KUNERT, G. (2002). Toward anisotropic mesh construction and error estimation in the finite element method. *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, 18(5), 625–648.

LAUG, P., BOROUCHAKI, H. ET GEORGE, P.-L. (1996). Maillage de courbes gouverné par une carte de métriques. Rapport technique 2818, Institut National de Recherche en Informatique et en Automatique, France.

LESERVOISIER, D., GEORGE, P.-L. ET DERVIEUX, A. (2001). Métrique continue et optimisation de maillage. Rapport technique 4172, Institut National de Recherche en Informatique et en Automatique, France.

LI, B. ET ZHANG, Z. (1999). Analysis of a class of superconvergence patch recovery

techniques for linear and bilinear finite elements. *Numerical methods for partial differential equations*, 15, 151–167.

MACKERLE, J. (2001). Error estimates and adaptive finite element methods : A bibliography (1990-2000). *Engineering Computations*, 18, 802–914.

MANOLE, O., LABBÉ, P., DOMPIERRE, J. ET TRÉPANIER, J.-Y. (2003). Anisotropic hybrid mesh adaptation using a metric field. *16th AIAA Computational Fluid Dynamics Conference*. Orlando, FL, no. AIAA-2003-3822.

PELLETIER, D. (1999). Adaptive finite element computations of complex flows. *10th Int. Conf. on Finite Element in Flow Problems*, 31, 189–202.

PERAIRE, J., VAHDATI, M., MORGAN, K. ET ZIENKIEWICZ, O. C. (1987). Adaptive remeshing for compressible flow computations. *Journal of Computational Physics*, 72, 449–466.

PICASSO, M. (2003). Numerical study of the effectivity index for an anisotropic error indicator based on Zienkiewicz-Zhu error estimator. *Communications in numerical methods in engineering*, 19(1), 13–23.

PICHELIN, E., FORTIN, M. ET BOIVIN, S. (2000). Étude numérique d'estimation d'erreur *a posteriori*. *Revue européenne des éléments finis*, 9, 467–486.

REMACLE, J.-F., LI, X., SHEPHARD, M. S. ET FLAHERTY, J. E. (2000). Anisotropic adaptive simulations of transient flows using discontinuous galerkin method. *Int. J. Numer. Meth. Eng.*, 2.

VALLET, M. (1996). A directional error estimator for CFD. *The fifth International Conference on Numerical Grid Generation in Computational Fluid Dynamics and Related Fields*. Mississippi, USA.

VALLET, M.-G., HECHT, F. ET MANTEL, B. (1991). Anisotropic control of mesh generation based upon a Voronoi type method. A. S. Arcilla, J. Häuser, P. R. Eiseman et J. F. Thompson, éditeurs, *Third International Conference on Numerical Grid Generation in Computational Fluid Dynamics and Related Fields*. North-Holland, Barcelona, Spain, 93–103.

ZHANG, X. (2001). Accuracy Concern for Hessian Metric, Internal node. Rapport technique, CERCA, Montréal.

ZHANG, Z. ET ZHU, J. (1995). Analysis of the superconvergent patch recovery technique and a posteriori error estimator in the finite element method. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 123, 173–187.

ZIENKIEWICZ, O. C. ET WU, J. (1994). Automatic directional refinement in adaptive analysis of compressible flows. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 37, 2189–2210.

ZIENKIEWICZ, O. C. ET ZHU, J. Z. (1987). A simple error estimator and adaptive procedure for practical engineering analysis. *Int. J. Numer. Meth. Eng.*, 24, 337–357.

ZIENKIEWICZ, O. C. ET ZHU, J. Z. (1992). The superconvergent patch recovery and a posteriori error estimates. Part I : The recovery technique. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 33, 1331–1364.

ANNEXE I

La description du programme de reconstruction des dérivées secondes

Comme on l'a précisé à la section 3.5, le protocole d'expérimentation construit sur toutes les hypothèses théoriques et pratiques présentées au chapitre 3, permet de façon itérative le passage automatique sur chaque processus de reconstruction et pour tous les cas tests prévus allant de la manipulation des données d'entrée (maillage) par la méthodologie de calcul jusqu'à la visualisation des graphiques de convergence. L'automatisation du processus s'effectue en deux étapes. La première étape est représentée par l'exécution d'un module informatique touchant toute la partie du processus de calcul qui est ensuite suivie par la manipulation des résultats.

La première partie du protocole d'expérimentation est réalisée par le programme de reconstruction des dérivées secondes - **RDS**. Ce programme contient une série de classes d'objets et de méthodes, décrites sous forme de programmation en langage C++, permettant le développement numérique des reconstructions choisies. De même il permet l'apport des modifications ou l'ajout des fonctionnalités encourageant, ainsi, le développement continu du programme et l'envie de l'utiliser. **RDS** contient, à la fois, un ensemble de classes d'objets gérant des structures simples de données, comme une liste des coordonnées des points, et des structures complexes de données, comme le modèle constituant le maillage et assurant, en tout temps, une interdépendance entre eux. En même temps, des classes fonctionnelles nécessaires à la réalisation de ce travail, font partie de la structure du **RDS**. On énumère, ainsi, l'implantation des techniques de reconstruction, ou l'évaluation de l'erreur, ou la gestion des fichiers d'entrée/sortie. En tout temps, **RDS** travaille avec des fichiers d'entrée/sortie de format *.pie*. Le format *.pie* est le format d'impression pris par convention pour tous les fichiers contenant des objets décrits dans la bibliothèque de calcul **PIRATE**

(Programme Interactif de Résolution et d'Analyse et Traitement par Éléments finis) de l'École Polytechnique de Montréal. Une description détaillée d'un fichier *.pie* sera faite plus loin.

Le programme **RDS** est structuré de façon à contenir des informations auprès des éléments constitutifs d'un maillage et du processus de calcul numérique à implémenter. Cette structure regroupe des classes d'objets décrivant la topologie et la géométrie du maillage et les algorithmes des techniques numériques de reconstruction. En ce qui concerne la topologie et la géométrie du maillage on énumère les classes :

- *Sommet, Arete, Triangle, Maillage,*

et les classes décrivant les algorithmes agissant directement sur ces données ou définissant les fonctions et les mesures sont :

- méthode de reconstruction : classe *SimpleApproximationLineaire,*
- méthode de reconstruction : classe *ApproximationQuadratique,*
- méthode de reconstruction : classe *DoubleProjectionL2,*
- méthode de reconstruction : classe *DoubleApproximationLineaire,*
- méthode de reconstruction : classe *DoubleIntegrationParParties,*
- définition des fonctions : classe *FonctionAnalytique,*
- définition de la mesure : classe *Norme.*

Bien valide que la définition de toutes ces classes ne résout rien s'il n'y a pas de rapport avec d'autres classes directement liées à la fonctionnalité du programme et assurant son exécution : la manipulation de données à l'aide des listes, des itérateurs etc. Comme plusieurs documentations de programmation *OO (orienté objet)* l'ont déjà précisé, quand on définit une classe on définit une structure de données sur laquelle sont déclarées les variables, les prototypes des fonctions ou des méthodes de la classe. Les paragraphes suivants détaillent chaque classe d'objet constituant la structure de données. Les classes décrivant les algorithmes d'implémentation des techniques de reconstruction des dérivées secondes n'y seront pas présentées parce que leurs descriptions ont été faites à la section 2.5.

La deuxième partie du protocole d'expérimentation est construite sur un schéma de shell-script facilitant ainsi l'exécution automatique du protocole. Un shell-script est un fichier texte simple contenant des lignes de commandes décrivant les tâches à effectuer et leur ordre d'exécution. Il est un interpréteur de commandes permettant à la fois la lecture et l'exécution de commandes, la manipulation des fichiers d'entrée/sortie et le contrôle du parcours des commandes lancées. Les commandes contenues dans un shell-script sont écrites de la même manière que celles transmises dans une ligne de commande (dans un shell). Un shell-script permet, de même qu'un langage de programmation, l'utilisation des instructions conditionnelles et itératives, des fonctions ou des variables utilisateur. Aussi, il facilite, grâce aux mécanismes de substitution de paramètres, l'appel itératif d'une commande supportant un changement de paramètres d'entrée. Un shell se termine lorsque la dernière commande finit son exécution. À l'aide d'un shell-script le protocole, donc, s'exécute automatiquement suivant les étapes précisées et l'ordre d'exécution. On rappelle que le protocole est construit pour suivre de proche l'exécution du programme **RDS** passant par tous les maillages, méthodes et fonctions choisis afin d'investiguer la robustesse des méthodes de reconstruction. La figure I.1 résume les principales étapes d'exécution du protocole.

I.1 La description des classes du programme

Le programme **RDS** constitue, en effet, une séquence de calculs correspondante à un échange de valeurs des données modélisées et destinées à être changées au parcours du calcul. Les données sont définies au niveau du code de calcul et l'échange lui-même est décrit à ce niveau. La structure des données définie dans le cadre du programme **RDS** s'appuie sur une structure de type maillage qui constitue le paramètre d'entrée du programme. Le maillage d'entrée fournit la représentation géométrique et topologique du domaine de calcul et contient des informations correspondantes à ses entités constitutifs : sommets, arêtes, triangles. D'autre part, les résultats, vus comme l'en-

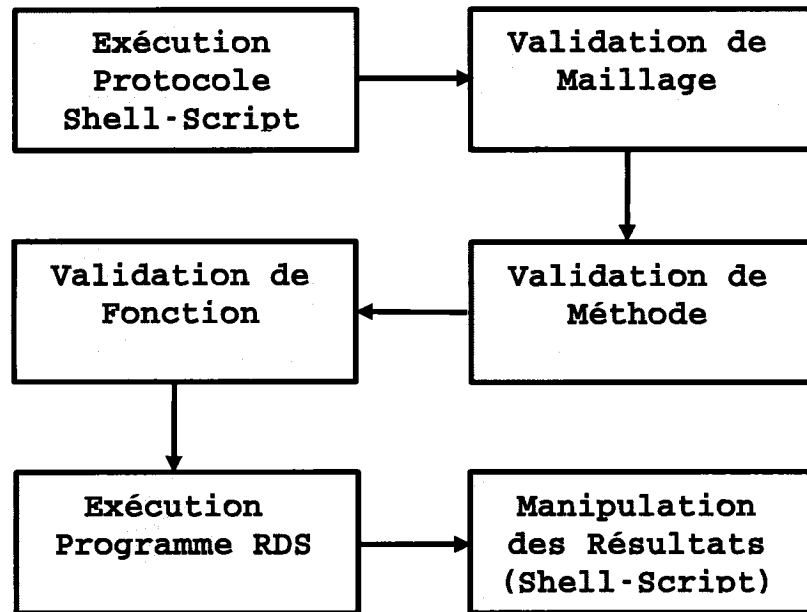


FIGURE I.1 Schéma d'exécution du protocole expérimentale

semble des valeurs trouvées à la suite de la séquence de calcul effectuée, sont définis eux-mêmes sur les entités constitutifs du maillage. Entre les éléments constitutifs du maillage et le processus de calcul existe, en tout temps, une corrélation facilitant l'accès aux informations définies sur les entités du maillage.

I.1.1 La classe *Sommet*

Un sommet est associé à un point qui est l'entité géométrique définie par ses coordonnées dans l'espace de définition. On précise qu'on fait une différence entre la description d'un sommet et d'un noeud. Le sommet représente l'entité topologique dans la structure du maillage, tandis que le noeud peut, très bien, être un noeud-sommet ou un noeud de calcul.

Un objet instancié de cette classe donne accès à des informations correspondantes

aux éléments connectés directement au sommet, i.e. la liste des arêtes et des triangles connectés au sommet, ou à la position spatiale du sommet par rapport au maillage, i.e. le sommet est sommet interne ou sommet frontière.

La gestion des résultats pour l'objet de type sommet se réalise par la définition et la manipulation des champs scalaires comprenant les composantes du gradient $((\nabla_x)_S, (\nabla_y)_S)$ et les composantes du hessien au sommet $((\mathcal{H}_{xx})_S, (\mathcal{H}_{xy})_S, (\mathcal{H}_{yx})_S, (\mathcal{H}_{yy})_S)$. En tout temps l'accès aux informations se référant à ces résultats est assuré. Ces champs scalaires font l'objet des algorithmes de reconstruction des dérivées secondes. D'autres fonctions membres à cette classe sont ajoutées afin de créer des fonctionnalités pratiques à la manipulation des données au moment où on instancie un objet de type sommet : l'évaluation de l'aire support d'un sommet, ou l'évaluation du champ analytique nodale, la création et la gestion des listes des sommets permettant l'accès aux informations nodales des sommets voisins des voisins d'un sommet, ou la mise à jour des données au niveau nodale.

I.1.2 La classe *Arete*

Une arête est constituée par 2 sommets ce qui dit que la connectivité d'un objet *Arete* est décrite par deux objets de type *Sommet*. Du point de vue géométrique l'arête est, dans notre cas, le segment à deux sommets. L'arête à deux sommets est orientée, où l'ordre dans lequel sont donnés les sommets dans la connectivité définit l'orientation implicite de l'arête. L'arête repose sur les deux sommets qui la construisent et a accès, en tout temps, à la structure d'un objet de type sommet. D'autre fonctionnalités ajoutées à cette classe permettent de calculer, entre autres, la longueur de l'arête, la normale de l'arête, ou d'avoir accès aux sommets, aux triangles qui l'entourent et de spécifier l'endroit de l'arête par rapport à la frontière du maillage.

I.1.3 La classe *Triangle*

Un triangle est constitué par 3 sommets, ce qui dit que la connectivité d'un objet *Triangle* est décrite par trois objets de type *Sommet*. Le triangle de dimension 2 est orienté. L'orientation est donnée en connectivité nodale où la liste des sommets définit le sens de parcours. Une fois que la liste de connectivité des sommets est connue, l'accès à la structure de la classe *Sommet* est établi. D'autre part, la gestion des résultats se réalise, de la même façon qu'à la classe *Sommet*, par la définition et la manipulation des champs scalaires comprenant les composantes du gradient $((\nabla_x)_T, (\nabla_y)_T)$ et les composantes du hessien au triangle $((\mathcal{H}_{xx})_T, (\mathcal{H}_{xy})_T, (\mathcal{H}_{yx})_T, (\mathcal{H}_{yy})_T)$. De même on s'assure que l'accès à ce type d'informations se réalise en tout temps. La classe *Triangle* est enrichie par des fonctions calculant l'aire d'un triangle ou gérant la position caractéristique d'un triangle par rapport à la frontière du maillage ou, de même, manipulant des données des arêtes ou des sommets qui le constituent.

I.1.4 La classe *Maillage*

Cette classe définit la structure et les propriétés d'un maillage. Le maillage contient toutes les informations utiles aux calculs. Il contrôle et manipule les données par la connectivité descendante car il englobe dans sa structure les listes de triangles, d'arêtes et de sommets et toutes leurs propriétés. Cette structure de données fournit la description du maillage qui permet l'administration des données et l'accès aux informations se trouvant au plus bas niveau de la structure. De plus un objet *Maillage* a le droit d'ajouter et d'effacer des objets faisant partie de sa structure. Une fois un objet est ajouté et/ou effacé, cette opération se propage dans la structure du maillage jusqu'au moment où l'objet primaire est ajouté et/ou effacé.

I.1.5 La classe *Norme*

Cette classe est constituée par des fonctions prototypes calculant les normes en L_2 de l'erreur apparaissant entre les dérivées secondes analytiques et celles reconstruites. Ces fonctions agissent sur l'intégration numérique, sur le triangle et sur l'arête. Conformément à cela deux fonctions de calcul de la norme sur un triangle, utilisant 12 points d'intégration, et sur une arête, utilisant 3 points d'intégration, sont définies. On ajoute de plus des fonctions évaluant la norme sur une liste d'arêtes ou de triangles.

I.1.6 La classe *FonctionAnalytique*

Cette classe décrit les dix champs analytiques utilisés dans le processus de calcul. On définit dans le cadre de cette classe des fonctions prototypes permettant de manipuler les valeurs analytiques nodales des champs analytiques ainsi que leurs dérivées. Une instance de cette classe se réalise au moment où on s'intéresse à savoir les valeurs analytiques nodales qui constituent le point de départ du processus de calcul de reconstruction, ou les valeurs du hessien analytique pour l'évaluation de l'erreur.

ANNEXE II

Paramètres du programme *RDS*

Rappelons que le programme de reconstruction des dérivées secondes **RDS** fait appel à plusieurs *entrées* comme ceux de type géométrie, maillage, méthode de reconstruction et fonction pour qu'à la suite du processus de calcul il puisse fournir les *sorties* formant la solution et l'erreur. L'exécution du **RDS** se réalise en ligne de commande. La syntaxe de la commande contient les paramètres décrits au tableau II.1 :

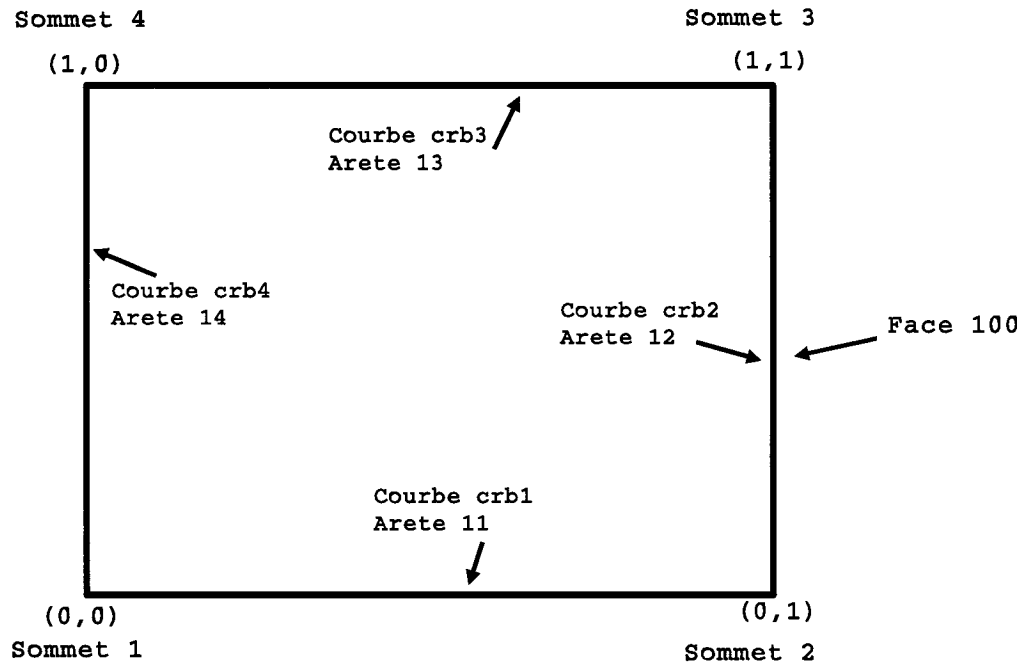
RDS [Opt_1] [Opt_2] [Fic_Données] -o [Fic_Solution] [Fic_Maillage] [Fic_Géométrie]

On remarque dans la description des paramètres du programme qu'on travail beaucoup avec un format spécial de fichier. À part du choix de la méthode ou de la fonction, les autres paramètres d'entrée et le fichier sortie représentent des fichiers décrits en format *.pie*. On fait référence ici aux fichiers d'entrée, *[Fic_Maillage]*, *[Fic_Géométrie]* et de sortie, *[Fic_Solution]*.

Ce format de fichier est utilisé afin de faciliter l'accès à des informations ou outils numériques des bibliothèques **PIRATE** et **OORT** de l'École Polytechnique de Montréal, ou le développement de nouveaux modules informatiques interagissant avec ceux-ci.

Le format *.pie* est le format d'impression pour un objet décrivant, par exemple, le maillage ou la solution. Les fichiers portant l'extension *.pie* respectent ce format d'impression. Comme exemple de fichier *.pie* on choisit celui décrit par *[Fic_Géométrie]*. Ce fichier contient la définition de la géométrie du domaine de calcul choisi ou, plus simplement, la *géométrie*. La construction d'une géométrie entame la construction de plusieurs éléments sousjacents. La figure II.1 montre la structure de la géométrie utilisée. En format *.pie* chaque élément construisant la géométrie du domaine

FIGURE II.1 Géométrie carré



s'identifie de façon claire en commençant par la *géométrie* elle-même, qui possède dans sa construction syntactique un *identificateur*. Comme on voit dans l'exemple *geometrie.pie*, l'identificateur de la géométrie est *carre(2)*, signifiant que le domaine de travail est le carré en 2D. Tous les éléments intervenant dans la construction de la géométrie sont brièvement présentés au tableau II.3 et à la figure II.1, tandis qu'au tableau II.2, on retrouve une description détaillée de chacun des éléments constituant la géométrie de base de la construction des maillages utilisés.

TABLEAU II.1 Description des paramètres d'entrée

Paramètres RDS	Signification
<i>Opt_1, Opt_2</i>	Des arguments optionnels des commandes-utilisateur de type chaîne de caractères précisant les paramètres d'entrée de type méthode de reconstruction et fonction. Les chaînes de caractères formant chaque argument optionnel sont spécifiées au début du programme par un fichier de type <i>Help</i> décrivant la syntaxe de la ligne de commande du RDS . Ex : <i>[Opt_1] = [DPL2]</i> , ou <i>[AQ]</i> , ou <i>[DIP]</i> , ou <i>[DAL]</i> , ce qui s'identifie comme la méthode de la double projection L^2 , ou l'approximation quadratique, ou la double intégration par parties, ou la double approximation linéaire, et <i>[Opt_2] = [f1]</i> , ce qui s'identifie comme la fonction quadratique x^2 . Toutes ces options sont formulées dans le <i>Help</i> du programme.
<i>Fic_Données</i>	Fichier sortie de type <i>.dat</i> contenant les résultats obtenus à la suite du processus de calcul et utilisés, ensuite, à l'analyse de l'erreur et de l'ordre de convergence. Ce fichier sert à l'administration et visualisation de la convergence se réalisant à l'aide de Gnuplot .
<i>Fic_Solution</i>	Fichier sortie contenant la solution. Ce fichier de type <i>.pie</i> regroupe tous les éléments constituant la structure de données et de plus, la solution obtenue. La solution donne des informations-résultats sur le calcul effectué en passant à RDS les paramètres d'entrée <i>[Opt_1, Opt_2]</i> .
<i>Fic_Maillage</i>	Fichier entrée de données. Ce fichier <i>.pie</i> groupe les éléments formant la structure de données d'entrée : coordonnées des sommets, connectivité des éléments etc.
<i>Fic_Géométrie</i>	Fichier <i>.pie</i> contenant la géométrie du domaine à mailler. Il regroupe les éléments géométriques (point, courbe), topologiques (sommets, arête, face).

TABLEAU II.2 Description du fichier .pie

Champ	Signification
<i>Champ Type Id()</i> =Valeur	Un champ correspondant à un tableau de valeurs est utilisé pour spécifier les coordonnées des noeuds du maillage, la connectivité, etc. Chaque champ possède un identificateur de référence <i>Id</i> et un <i>Type</i> correspondant aux types standards définis en C. Le type par défaut est le <i>double</i> . Pour la géométrie utilisée, ce champ définit les valeurs réelles des coordonnées.
<i>Courbe Id([K], Id_{Noeuds})</i>	L'élément <i>Courbe</i> est défini par son <i>Id</i> , son ordre <i>K</i> (optionnel) et un ensemble d'identificateurs de points. La valeur 2 de <i>K</i> correspond à des segments de droite.
<i>Sommet Num(CourbeId(T))</i>	Le <i>Sommet</i> définit l'entité topologique correspondant à un noeud. Son identificateur, <i>Num</i> , est un entier et le paramètre <i>T</i> précise sa position sur la courbe. Par exemple, le premier sommet est construit sur les coordonnées du premier point du <i>crb1</i> .
<i>Arete Num(CourbeId)=L_{Som}</i>	L' <i>Arête</i> d'identificateur entier <i>Num</i> définit l'entité topologique correspondant à une courbe. Sa description contient une liste de sommets <i>L_{Som}</i> et la courbe <i>CourbeId</i> sur laquelle ceux-ci reposent. Par exemple, la première arête d'identificateur 11, est construite sur la courbe <i>crb1</i> qui est formée par les sommets 1 et 2.
<i>Face Num()</i> =L _{Arete}	La <i>Face</i> d'identificateur <i>Num</i> , définit l'entité topologique correspondant à une surface et elle contient la liste d'arêtes constitutives <i>L_{Arete}</i> .
<i>Propriete</i>	Le champ <i>Propriété</i> définit les caractéristiques particulières de la géométrie.
<i>Zone Id(interp)</i>	La <i>Zone</i> regroupe tous les éléments constituant la géométrie. Chaque <i>Zone</i> s'identifie par <i>Id</i> et par interpolant (<i>LagrTrian03</i> signifie une interpolation de <i>Lagrange</i> sur le triangle à trois noeuds). Le <i>Maillage</i> peut contenir plusieurs <i>Zones</i> .

TABLEAU II.3 Fichier *geometrie.pie*

```

Champ<double> Coo() = { 0 0; 1 0; 1 1; 0 1};
Geometrie carre(2) = {
  Courbe crb1( 2, [<int> 1 2 ], Coo%2 );
  Courbe crb2( 2, [<int> 2 3 ], Coo%2 );
  Courbe crb3( 2, [<int> 3 4 ], Coo%2 );
  Courbe crb4( 2, [<int> 4 1 ], Coo%2 );

  Sommet 1( crb1( 0 ) );
  Sommet 2( crb2( 0 ) );
  Sommet 3( crb3( 0 ) );
  Sommet 4( crb4( 0 ) );

  Arete 11( crb1 ) = { 1 2 };
  Arete 12( crb2 ) = { 2 3 };
  Arete 13( crb3 ) = { 3 4 };
  Arete 14( crb4 ) = { 4 1 };

  Face 100()= { 11 12 13 14 };
};
Proprietes{
  Arete carre.11("NOMBRE_POINTS" "320" );
  Arete carre.12("NOMBRE_POINTS" "320" );
  Arete carre.13("NOMBRE_POINTS" "320" );
  Arete carre.14("NOMBRE_POINTS" "320" );
};
Maillage MonMaillage() = {

  Zone Zone1( LagrTrian03 );

  MM_STRATEGIE_TRANSFINIE2D( { 100 }, { Zone1 } );
};

```

ANNEXE III

Présentation des résultats numériques

Dans les annexes suivantes nous présentons les résultats numériques obtenus pour quelques cas test (champs analytiques) considérés à la section 3.2. On illustre, donc, les tests effectués pour les fonctions polynomiales $u_1 = x^2$, $u_2 = y^2$ et $u_3 = x^2y^2$, et les fonctions exponentielles $u_{7,9,10} = e^{-kx} + e^{-ky}$ pour $k = 3, 5, 25$. On a choisi seulement ces fonctions exponentielles en considérant qu'elles sont représentatives de la plupart des fonctions exponentielles.

Pour chaque cas-test on illustre dans les graphiques suivants les résultats obtenus avec les méthodes de reconstruction des dérivées secondes testées : la simple approximation linéaire *SAL*, la double approximation linéaire *DAL*, l'approximation quadratique *AQ*, et la double projection L^2 , *DPL2*. On note que les résultats numériques obtenus avec la méthode de reconstruction de la double intégration par parties *DIP*, sont identiques aux résultats de la double projection L^2 (voir le chapitre 2, la section 2.5.8), alors que dans les annexes suivantes on ne présente que les résultats de la méthode *DPL2*.

Pour chaque cas test on présente, sur échelle logarithmique, les évaluations de l'erreur et leur évolution sur les domaines Ω , Ω_1 , Ω_2 et Ω_3 , définis au chapitre 3 à la section 3.4. De plus, mentionnons que les graphiques de convergence suivants illustrent à la fois le comportement d'une seule méthode sur tous les types de maillages considérés, et ceci dans le cas d'une seule fonction analytique.

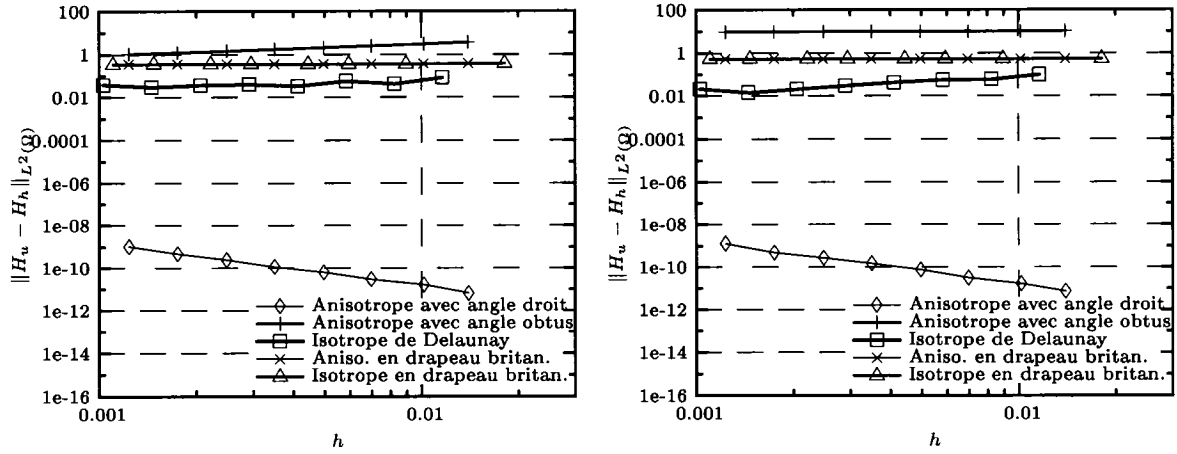


FIGURE III.1 Gauche : 1* ; droite : 2*.

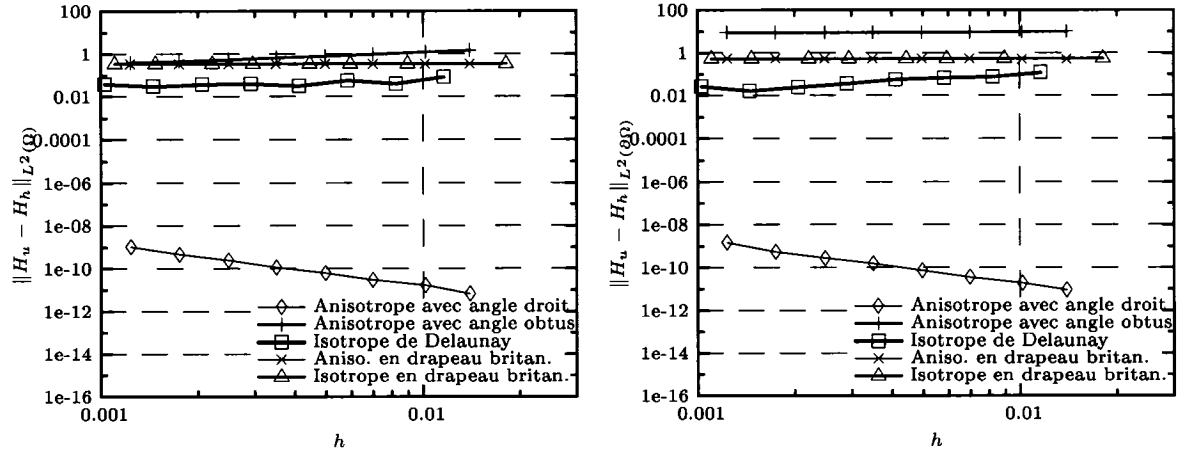


FIGURE III.2 Gauche : 3* ; droite : 4*.

Graphe de convergence : fonction $u_1 = x^2$; méthode *SAL*.

1* Sur le domaine de calcul - Ω ;

2* Sur tous les éléments appartenant à la frontière du domaine - Ω_1 ;

3* Sur tous les éléments appartenant au domaine interne - Ω_2 ;

4* Sur la frontière du domaine - Ω_3 .

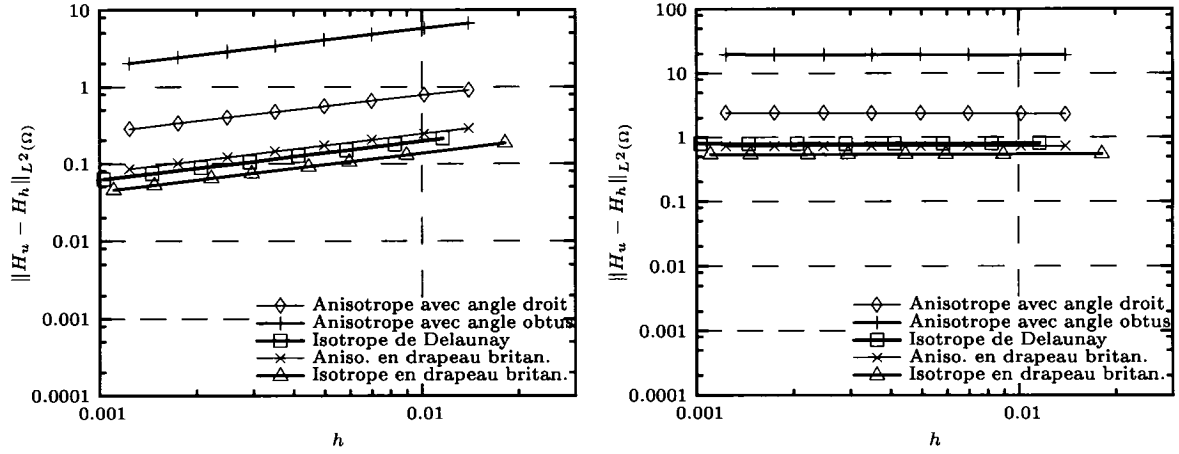


FIGURE III.3 Gauche : 1* ; droite : 2*.

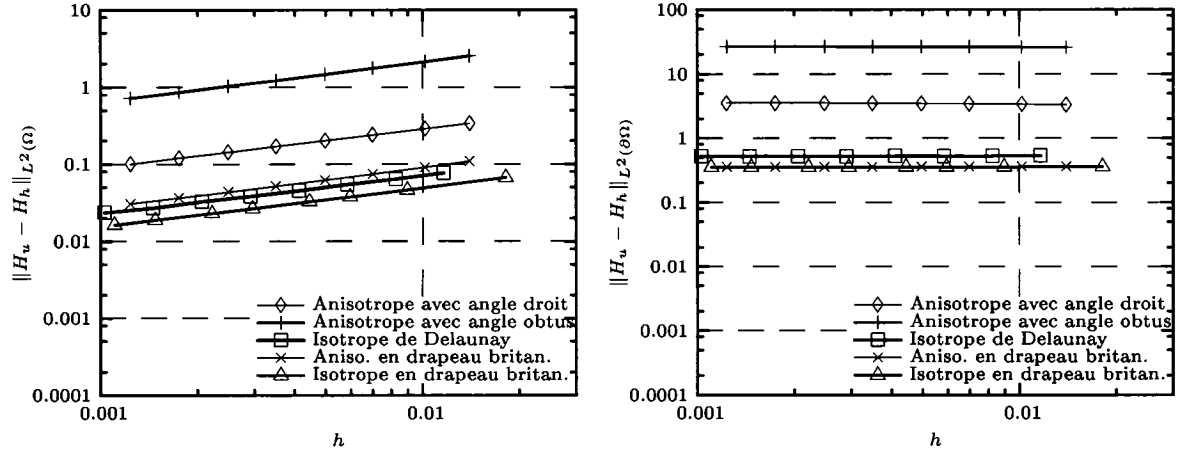


FIGURE III.4 Gauche : 3* ; droite : 4*.

Graphe de convergence : fonction $u_1 = x^2$; méthode *DAL*.

- 1* Sur le domaine de calcul - Ω ;
- 2* Sur tous les éléments appartenant à la frontière du domaine - Ω_1 ;
- 3* Sur tous les éléments appartenant au domaine interne - Ω_2 ;
- 4* Sur la frontière du domaine - Ω_3 .

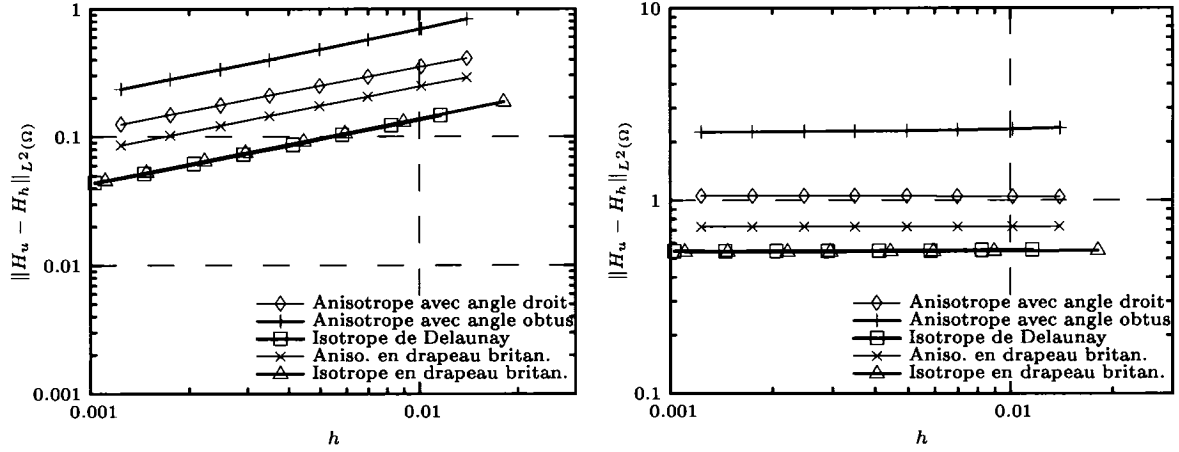


FIGURE III.5 Gauche : 1* ; droite : 2*.

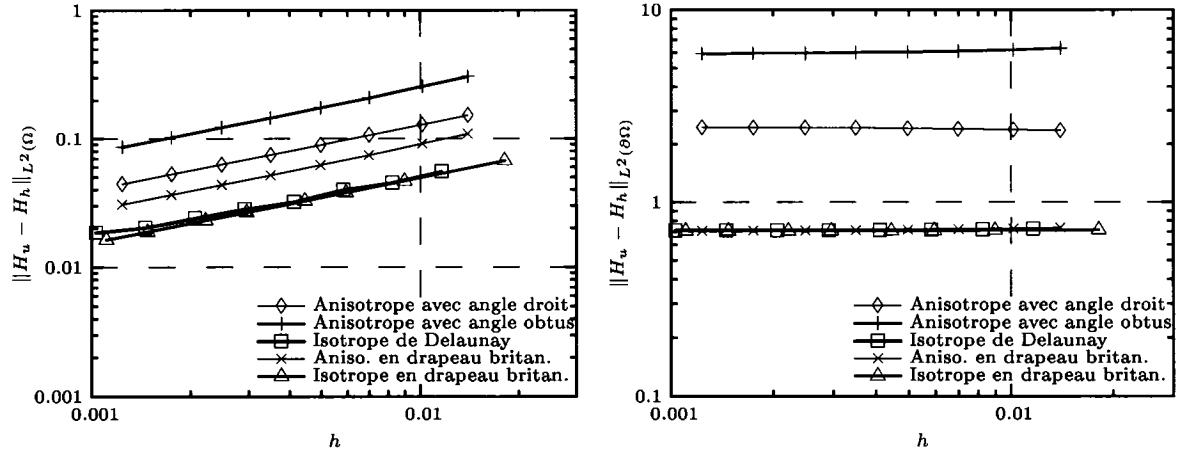


FIGURE III.6 Gauche : 3* ; droite : 4*.

Graphe de convergence : fonction $u_1 = x^2$; méthode *DPL2*.

1* Sur le domaine de calcul - Ω ;

2* Sur tous les éléments appartenant à la frontière du domaine - Ω_1 ;

3* Sur tous les éléments appartenant au domaine interne - Ω_2 ;

4* Sur la frontière du domaine - Ω_3 .

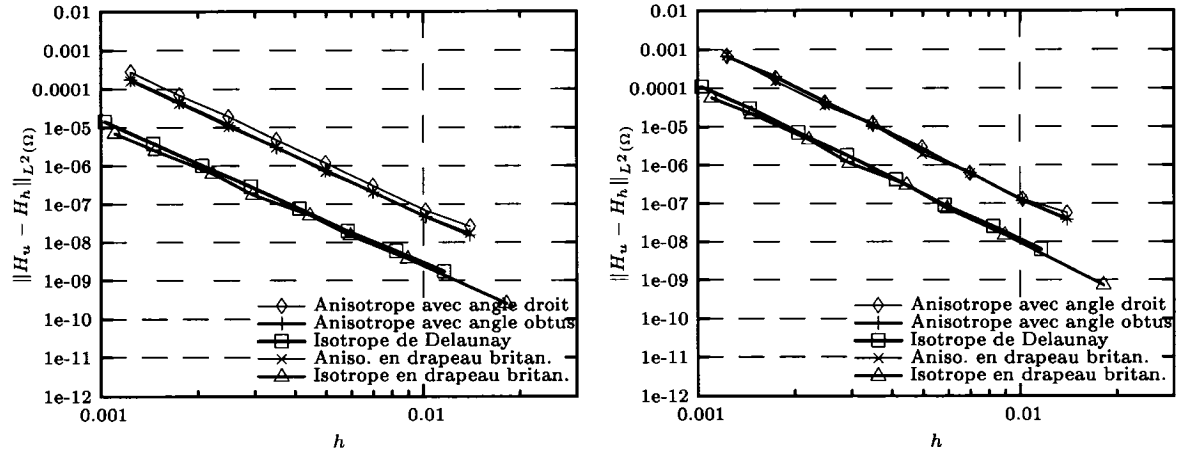


FIGURE III.7 Gauche : 1* ; droite : 2*.

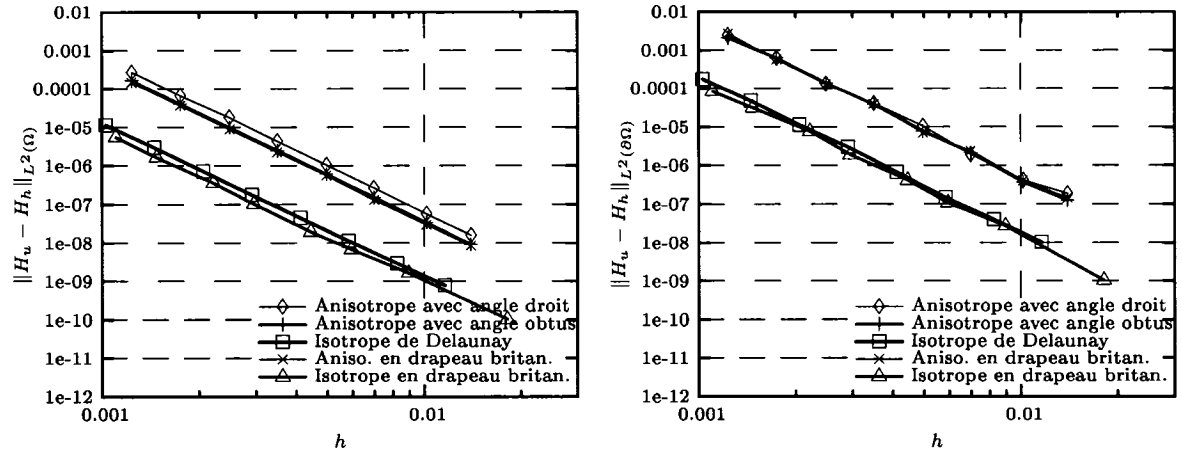


FIGURE III.8 Gauche : 3* ; droite : 4*.

Graphe de convergence : fonction $u_1 = x^2$; méthode AQ .

- 1* Sur le domaine de calcul - Ω ;
- 2* Sur tous les éléments appartenant à la frontière du domaine - Ω_1 ;
- 3* Sur tous les éléments appartenant au domaine interne - Ω_2 ;
- 4* Sur la frontière du domaine - Ω_3 .

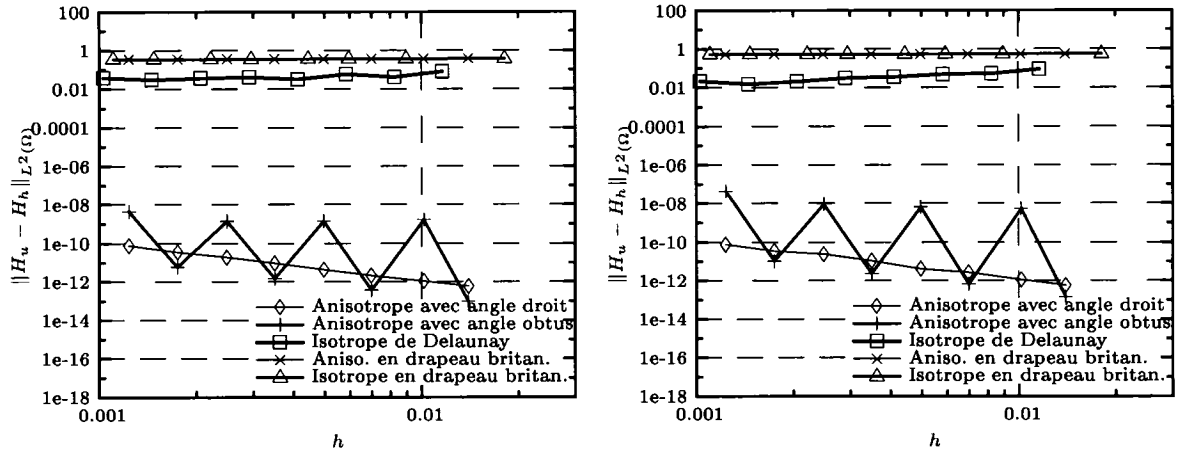


FIGURE III.9 Gauche : 1* ; droite : 2*.

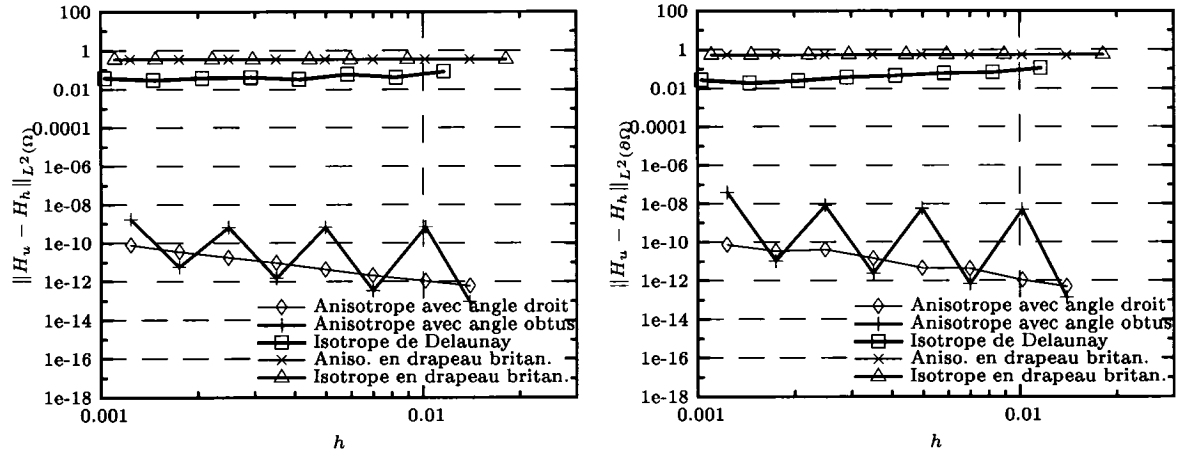


FIGURE III.10 Gauche : 3* ; droite : 4*.

Graphe de convergence : fonction $u_2 = y^2$; méthode *SAL*.

- 1* Sur le domaine de calcul - Ω ;
- 2* Sur tous les éléments appartenant à la frontière du domaine - Ω_1 ;
- 3* Sur tous les éléments appartenant au domaine interne - Ω_2 ;
- 4* Sur la frontière du domaine - Ω_3 .

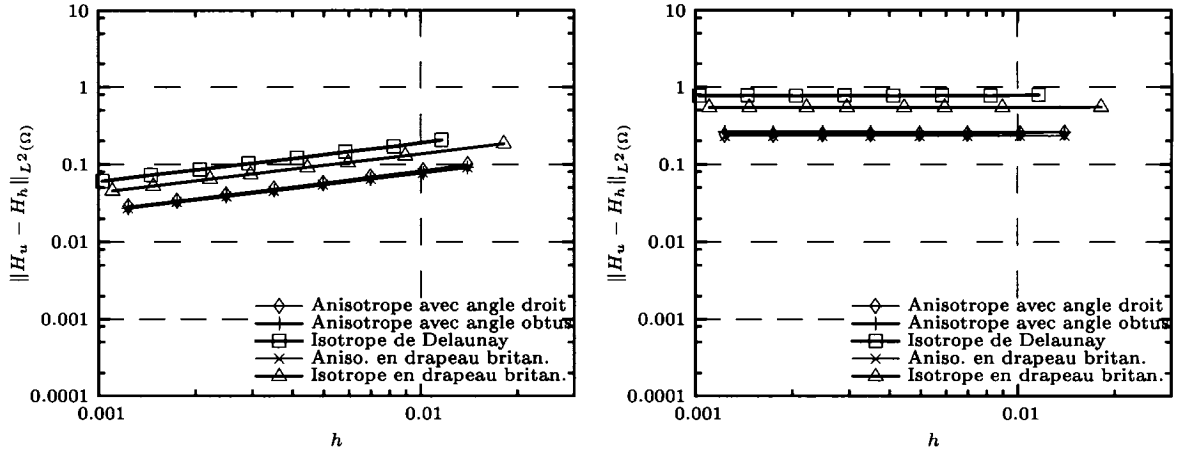


FIGURE III.11 Gauche : 1* ; droite : 2*.

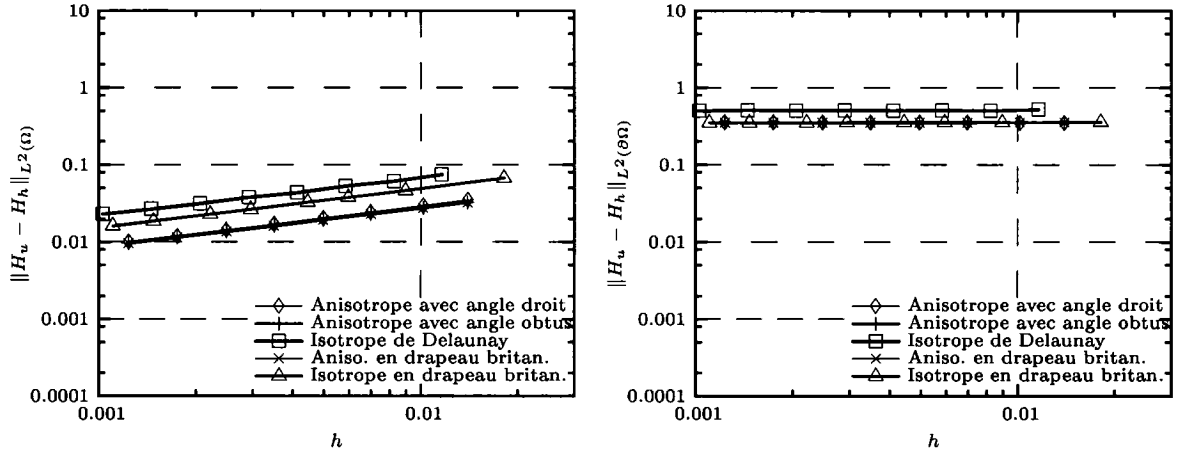


FIGURE III.12 Gauche : 3* ; droite : 4*.

Graphe de convergence : fonction $u_2 = y^2$; méthode *DAL*.

- 1* Sur le domaine de calcul - Ω ;
- 2* Sur tous les éléments appartenant à la frontière du domaine - Ω_1 ;
- 3* Sur tous les éléments appartenant au domaine interne - Ω_2 ;
- 4* Sur la frontière du domaine - Ω_3 .

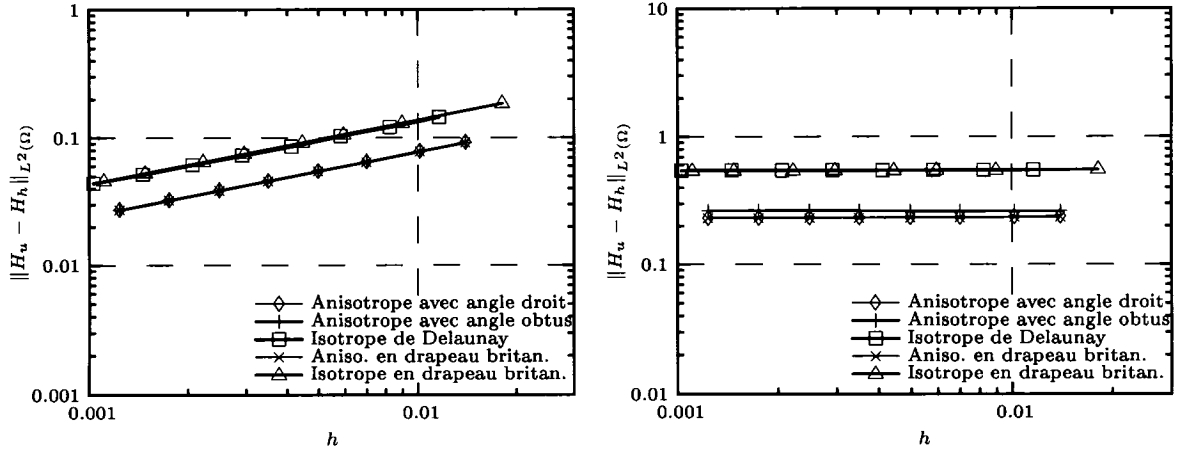


FIGURE III.13 Gauche : 1* ; droite : 2*.

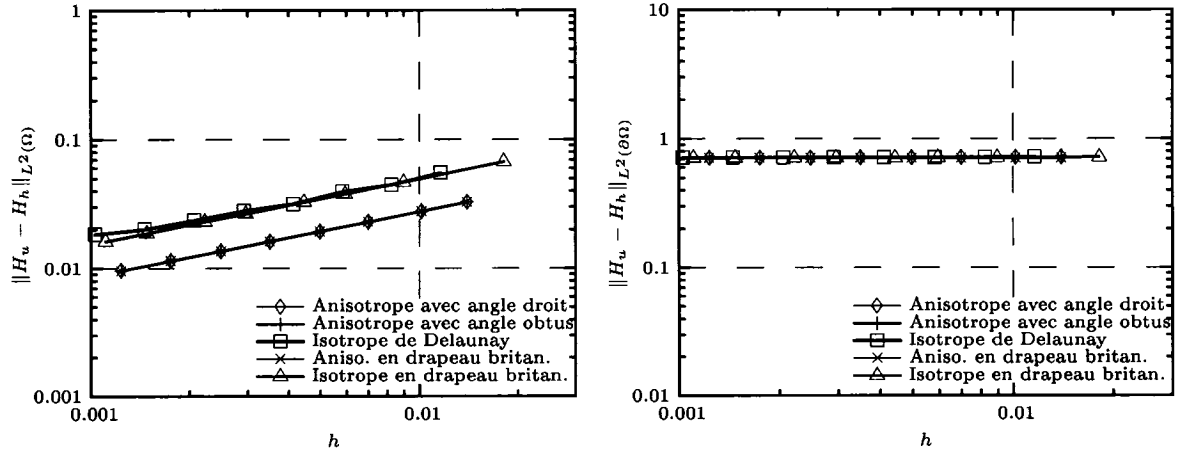


FIGURE III.14 Gauche : 3* ; droite : 4*.

Graphe de convergence : fonction $u_2 = y^2$; méthode *DPL2*.

- 1* Sur le domaine de calcul - Ω ;
- 2* Sur tous les éléments appartenant à la frontière du domaine - Ω_1 ;
- 3* Sur tous les éléments appartenant au domaine interne - Ω_2 ;
- 4* Sur la frontière du domaine - Ω_3 .

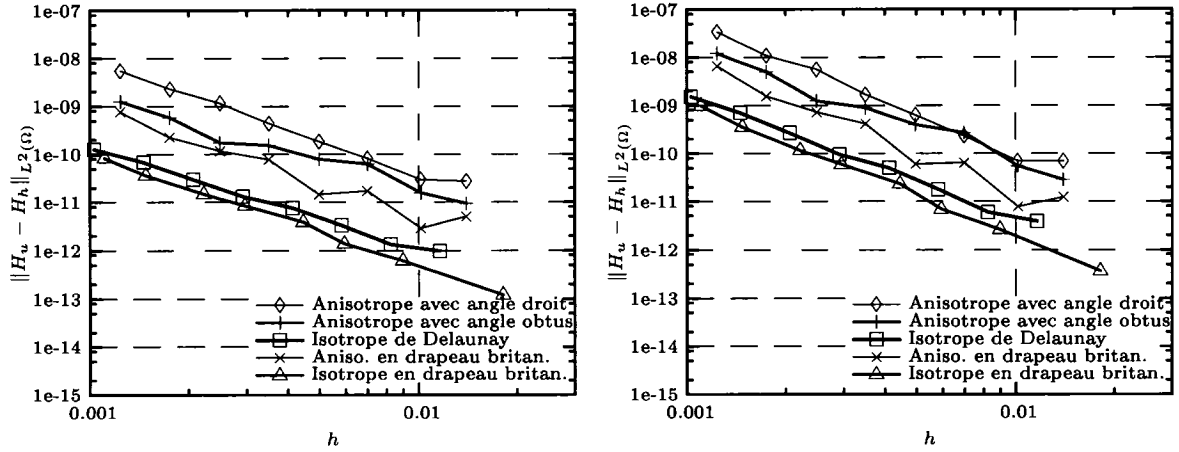


FIGURE III.15 Gauche : 1* ; droite : 2*.

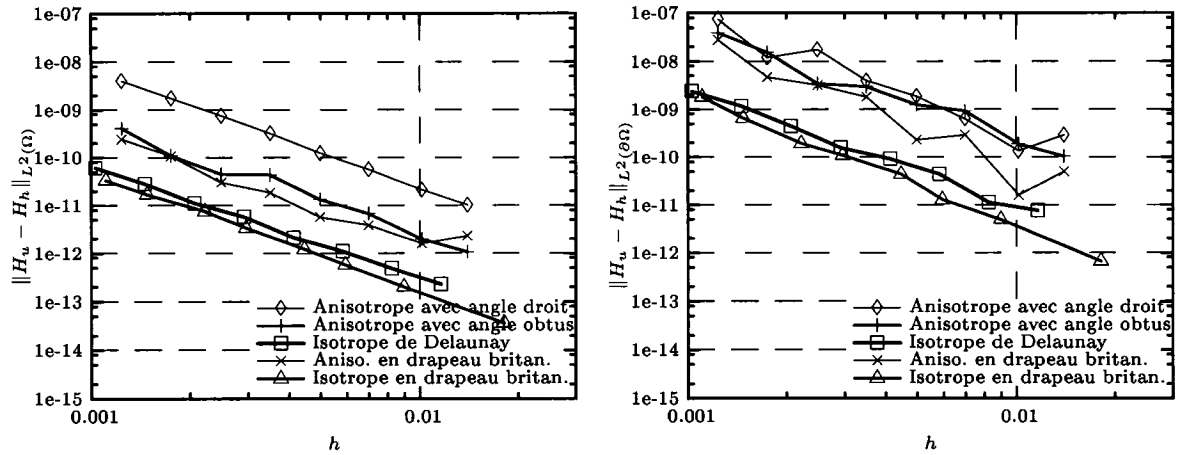


FIGURE III.16 Gauche : 3* ; droite : 4*.

Graphe de convergence : fonction $u_2 = y^2$; méthode AQ .

- 1* Sur le domaine de calcul - Ω ;
- 2* Sur tous les éléments appartenant à la frontière du domaine - Ω_1 ;
- 3* Sur tous les éléments appartenant au domaine interne - Ω_2 ;
- 4* Sur la frontière du domaine - Ω_3 .

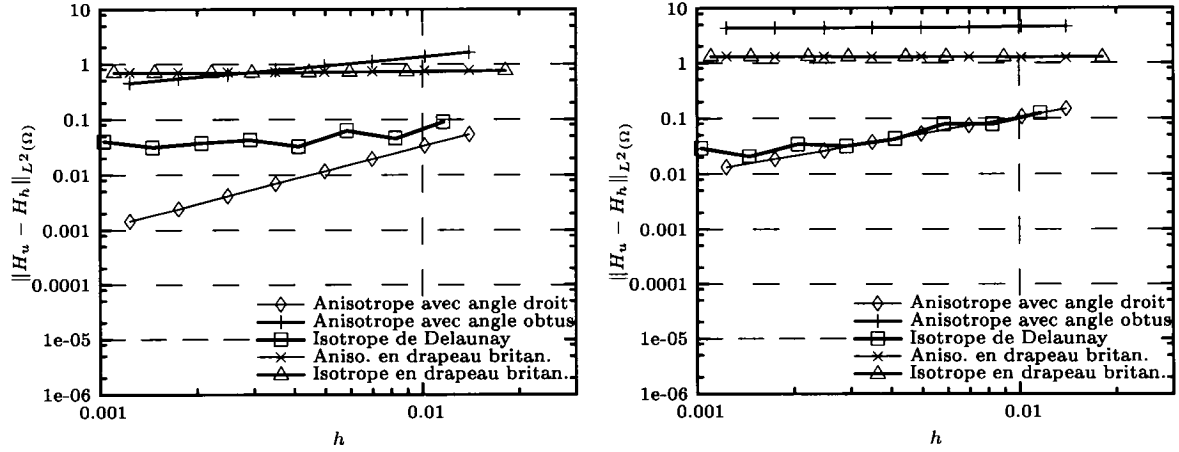


FIGURE III.17 Gauche : 1* ; droite : 2*.

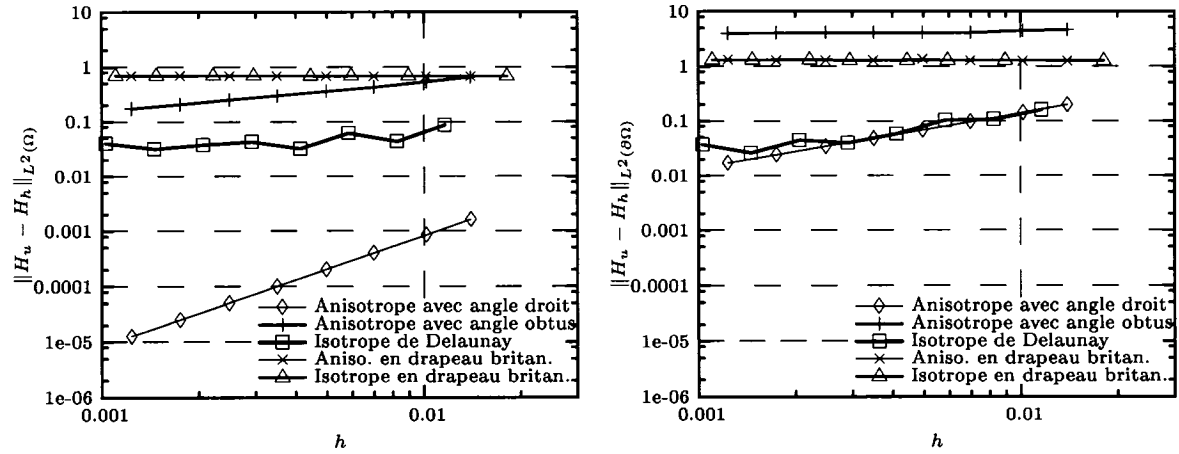


FIGURE III.18 Gauche : 3* ; droite : 4*.

Graphe de convergence : fonction $u_3 = x^2y^2$; méthode *SAL*.

- 1* Sur le domaine de calcul - Ω ;
- 2* Sur tous les éléments appartenant à la frontière du domaine - Ω_1 ;
- 3* Sur tous les éléments appartenant au domaine interne - Ω_2 ;
- 4* Sur la frontière du domaine - Ω_3 .

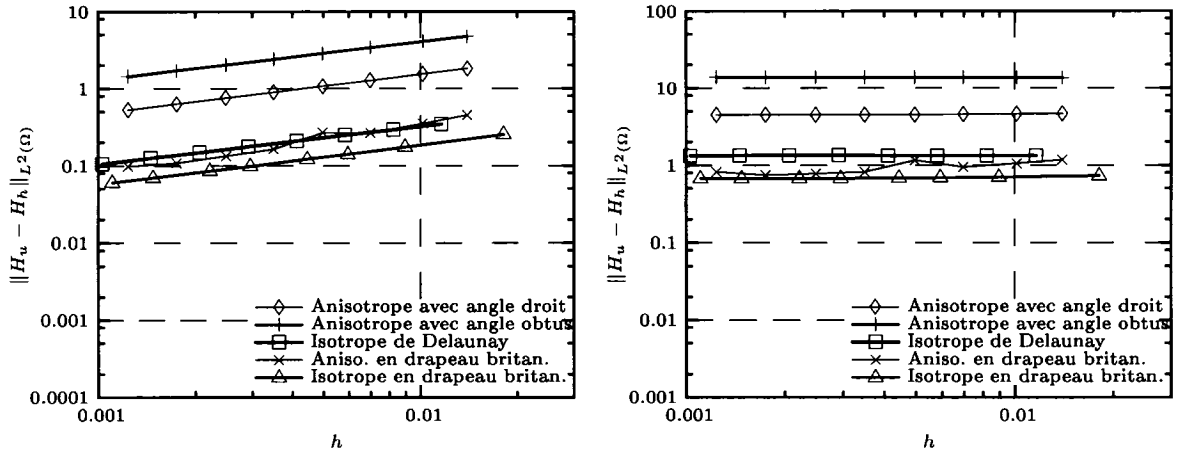


FIGURE III.19 Gauche : 1* ; droite : 2*.

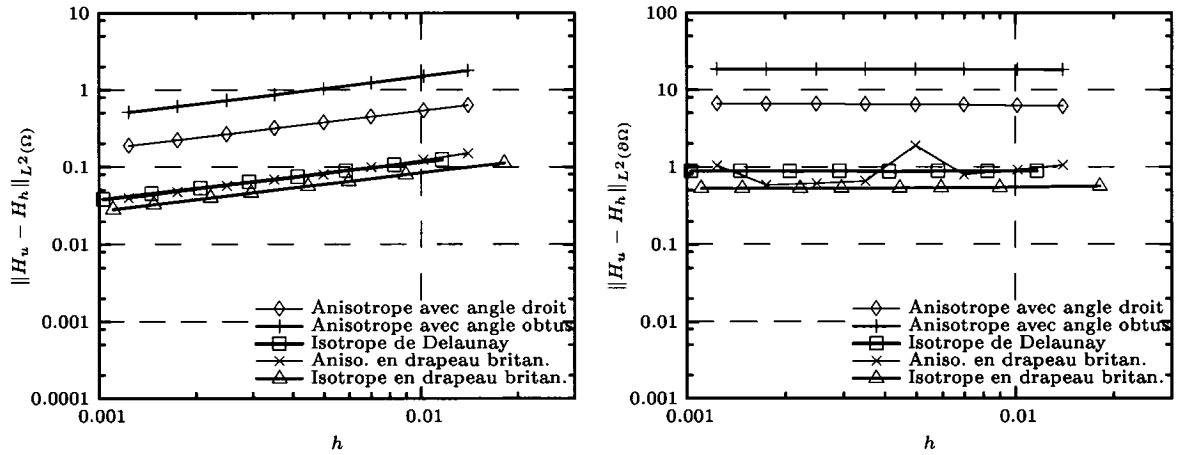


FIGURE III.20 Gauche : 3* ; droite : 4*.

Graphe de convergence : fonction $u_3 = x^2y^2$; méthode *DAL*.

- 1* Sur le domaine de calcul - Ω ;
- 2* Sur tous les éléments appartenant à la frontière du domaine - Ω_1 ;
- 3* Sur tous les éléments appartenant au domaine interne - Ω_2 ;
- 4* Sur la frontière du domaine - Ω_3 .

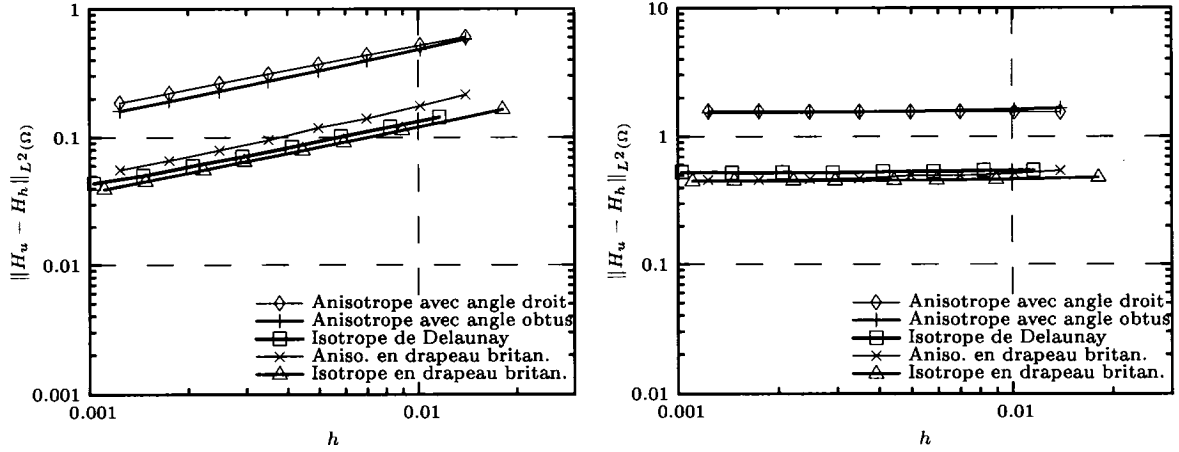


FIGURE III.21 Gauche : 1* ; droite : 2*.

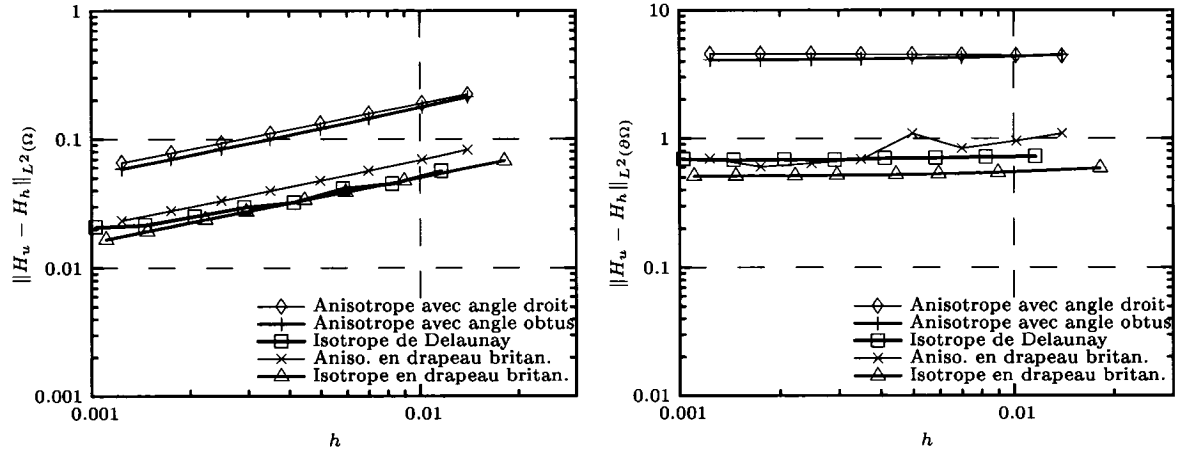


FIGURE III.22 Gauche : 3* ; droite : 4*.

Graphe de convergence : fonction $u_3 = x^2y^2$; méthode *DPL2*.

- 1* Sur le domaine de calcul - Ω ;
- 2* Sur tous les éléments appartenant à la frontière du domaine - Ω_1 ;
- 3* Sur tous les éléments appartenant au domaine interne - Ω_2 ;
- 4* Sur la frontière du domaine - Ω_3 .

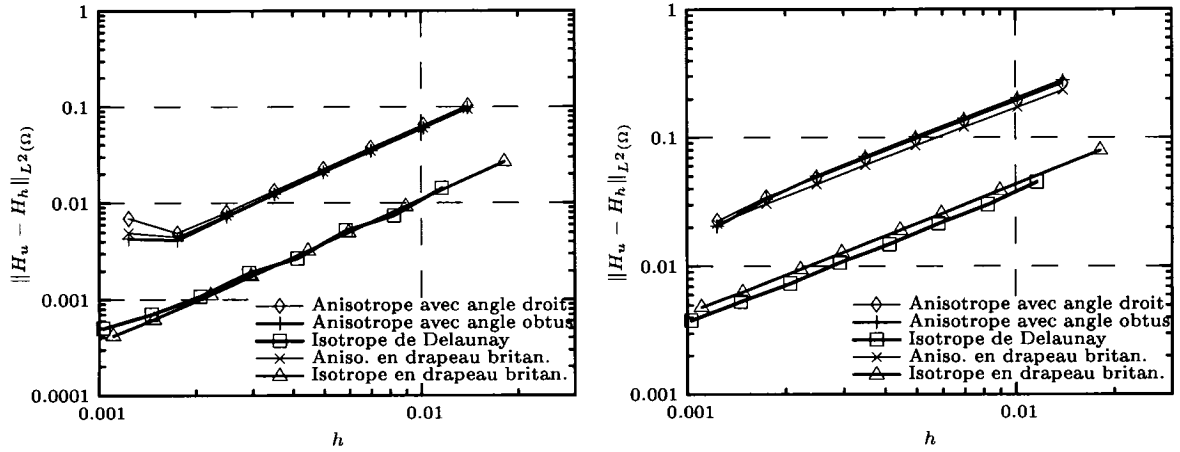


FIGURE III.23 Gauche : 1* ; droite : 2*.

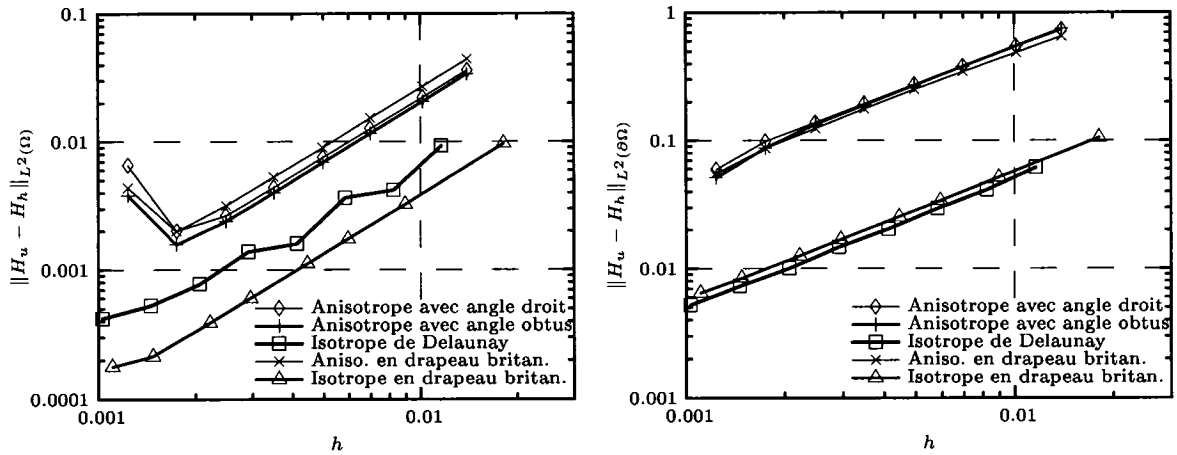


FIGURE III.24 Gauche : 3* ; droite : 4*.

Graphe de convergence : fonction $u_3 = x^2y^2$; méthode AQ .

1* Sur le domaine de calcul - Ω ;

2* Sur tous les éléments appartenant à la frontière du domaine - Ω_1 ;

3* Sur tous les éléments appartenant au domaine interne - Ω_2 ;

4* Sur la frontière du domaine - Ω_3 .

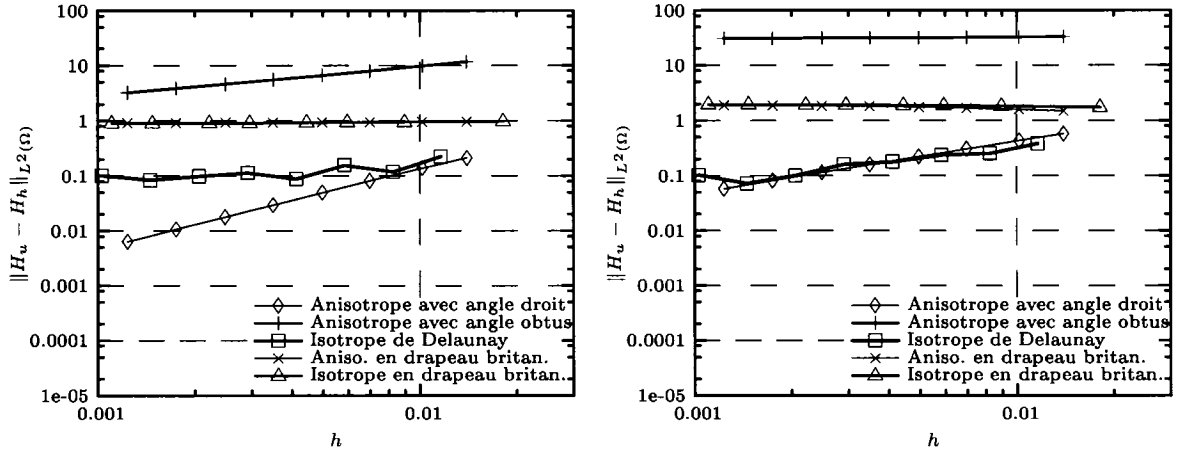


FIGURE III.25 Gauche : 1* ; droite : 2*.

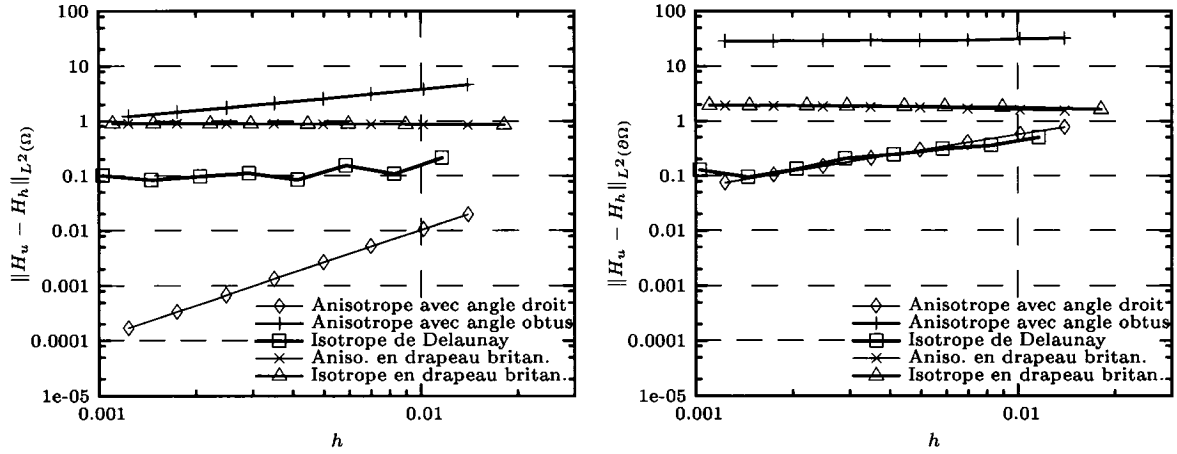


FIGURE III.26 Gauche : 3* ; droite : 4*.

Graphe de convergence : fonction $u_7 = e^{-3x} + e^{-3y}$; méthode *SAL*.

- 1* Sur le domaine de calcul - Ω ;
- 2* Sur tous les éléments appartenant à la frontière du domaine - Ω_1 ;
- 3* Sur tous les éléments appartenant au domaine interne - Ω_2 ;
- 4* Sur la frontière du domaine - Ω_3 .

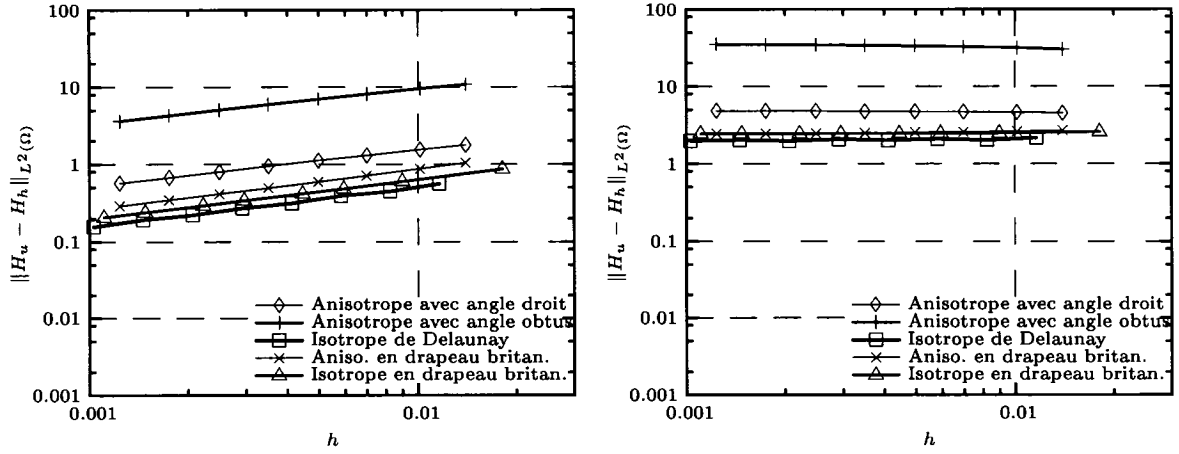


FIGURE III.27 Gauche : 1* ; droite : 2*.

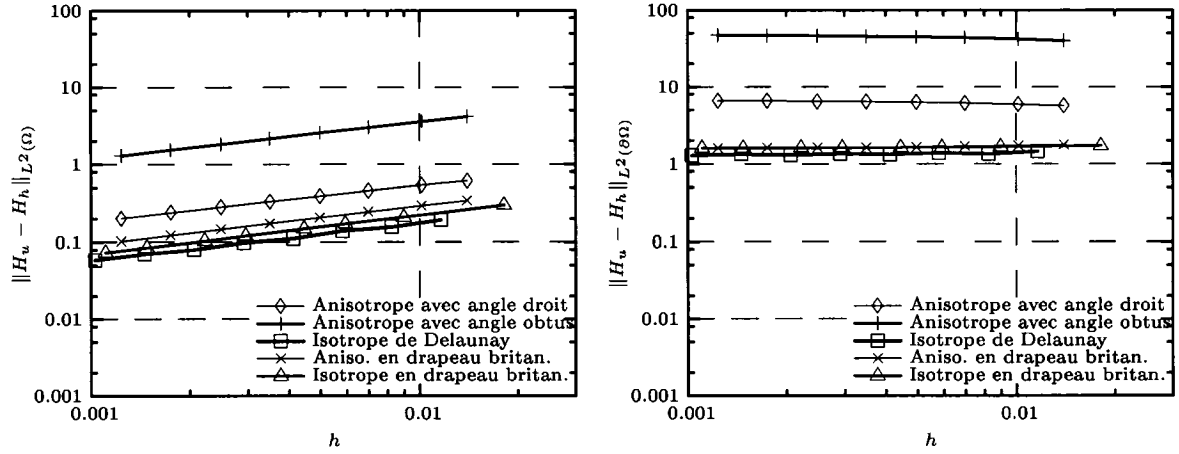


FIGURE III.28 Gauche : 3* ; droite : 4*.

Graphe de convergence : fonction $u_7 = e^{-3x} + e^{-3y}$; méthode *DAL*.

- 1* Sur le domaine de calcul - Ω ;
- 2* Sur tous les éléments appartenant à la frontière du domaine - Ω_1 ;
- 3* Sur tous les éléments appartenant au domaine interne - Ω_2 ;
- 4* Sur la frontière du domaine - Ω_3 .

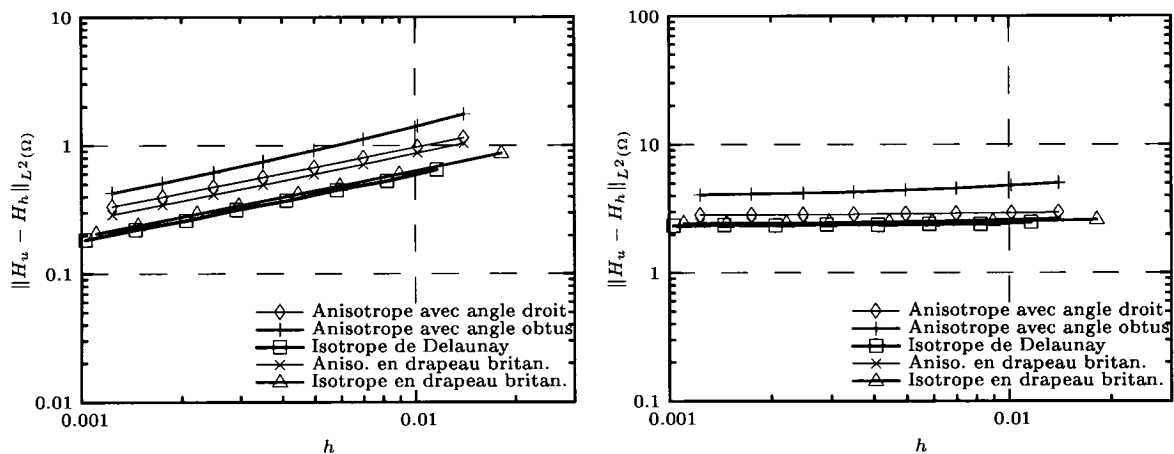


FIGURE III.29 Gauche : 1* ; droite : 2*.

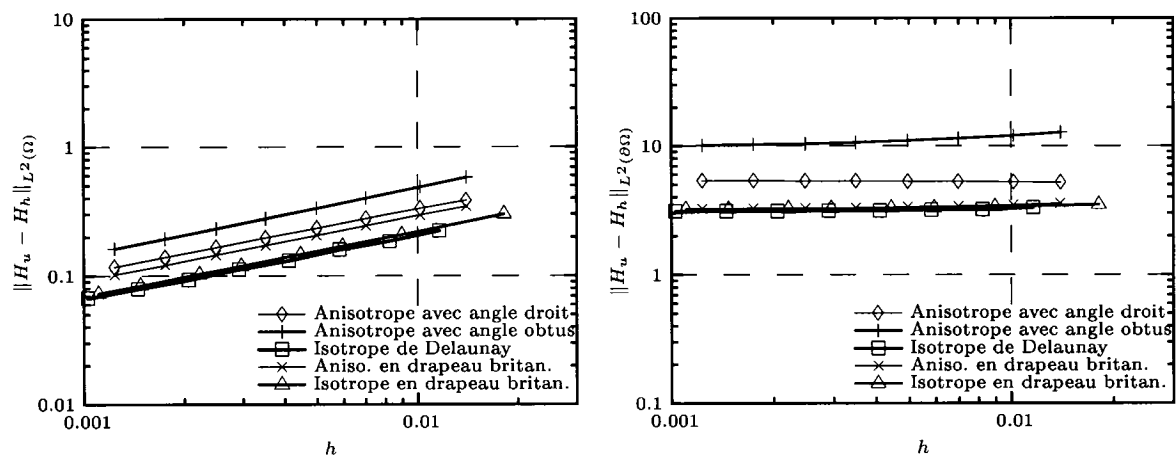


FIGURE III.30 Gauche : 3* ; droite : 4*.

Graphe de convergence : fonction $u_7 = e^{-3x} + e^{-3y}$; méthode *DPL2*.

- 1* Sur le domaine de calcul - Ω ;
- 2* Sur tous les éléments appartenant à la frontière du domaine - Ω_1 ;
- 3* Sur tous les éléments appartenant au domaine interne - Ω_2 ;
- 4* Sur la frontière du domaine - Ω_3 .

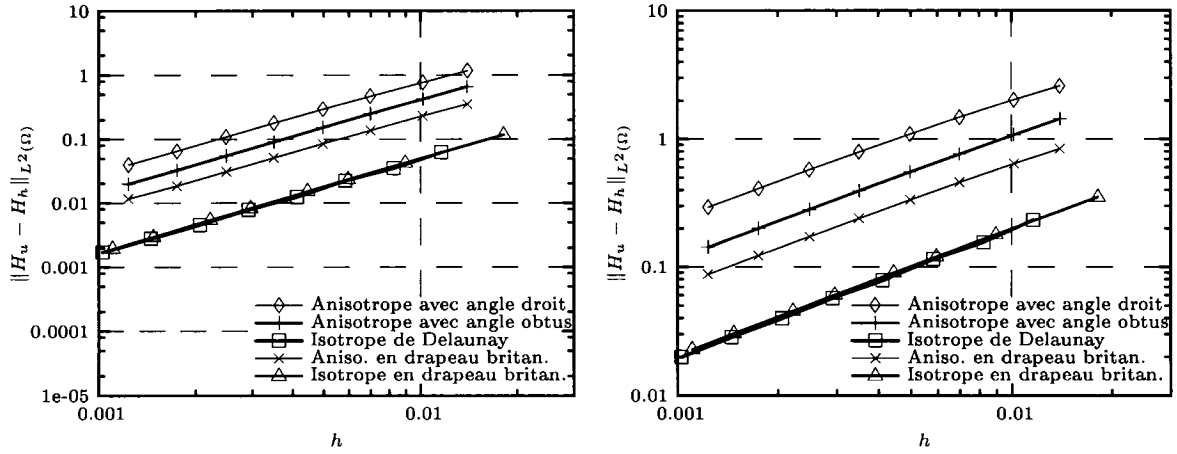


FIGURE III.31 Gauche : 1* ; droite : 2*.

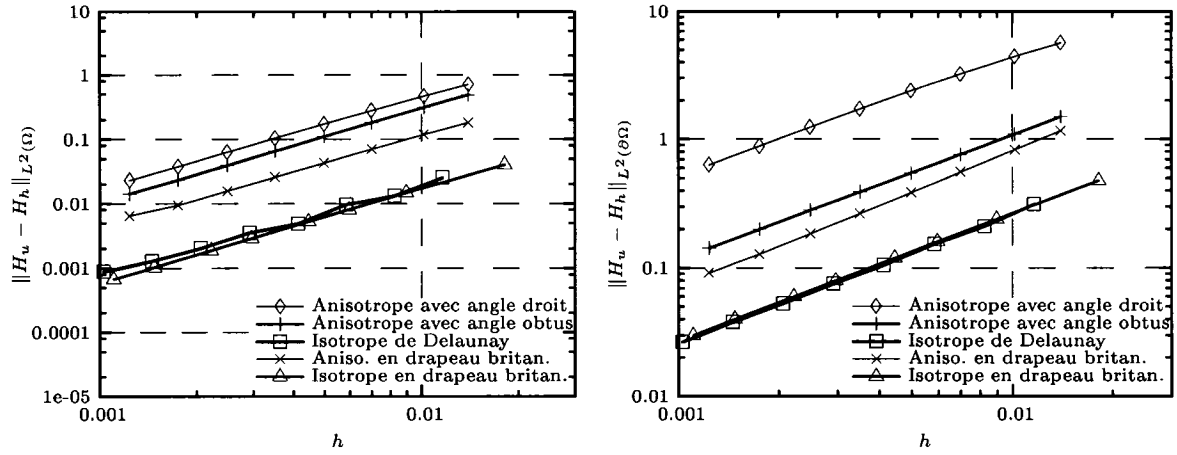


FIGURE III.32 Gauche : 3* ; droite : 4*.

Graphe de convergence : fonction $u_7 = e^{-3x} + e^{-3y}$; méthode AQ .

1* Sur le domaine de calcul - Ω ;

2* Sur tous les éléments appartenant à la frontière du domaine - Ω_1 ;

3* Sur tous les éléments appartenant au domaine interne - Ω_2 ;

4* Sur la frontière du domaine - Ω_3 .

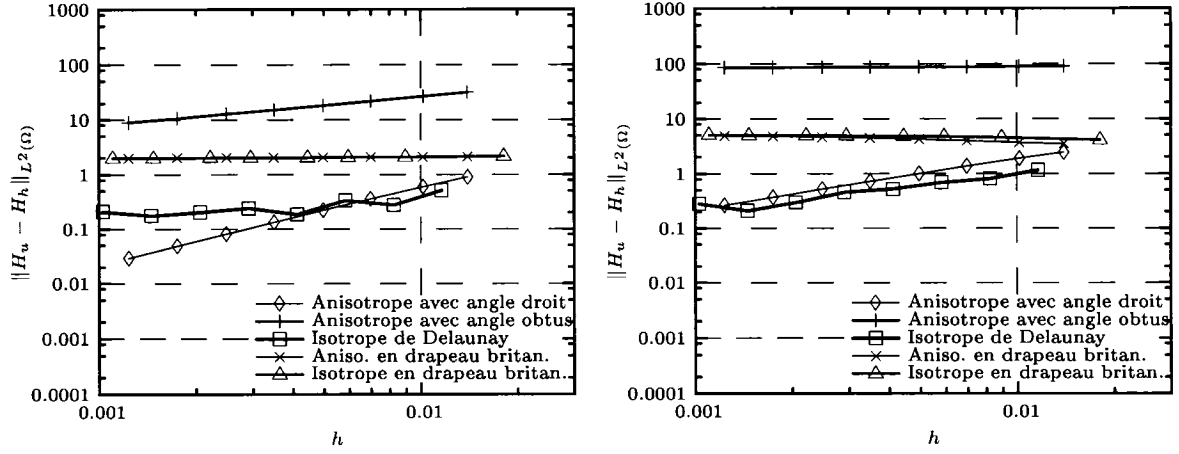


FIGURE III.33 Gauche : 1* ; droite : 2*.

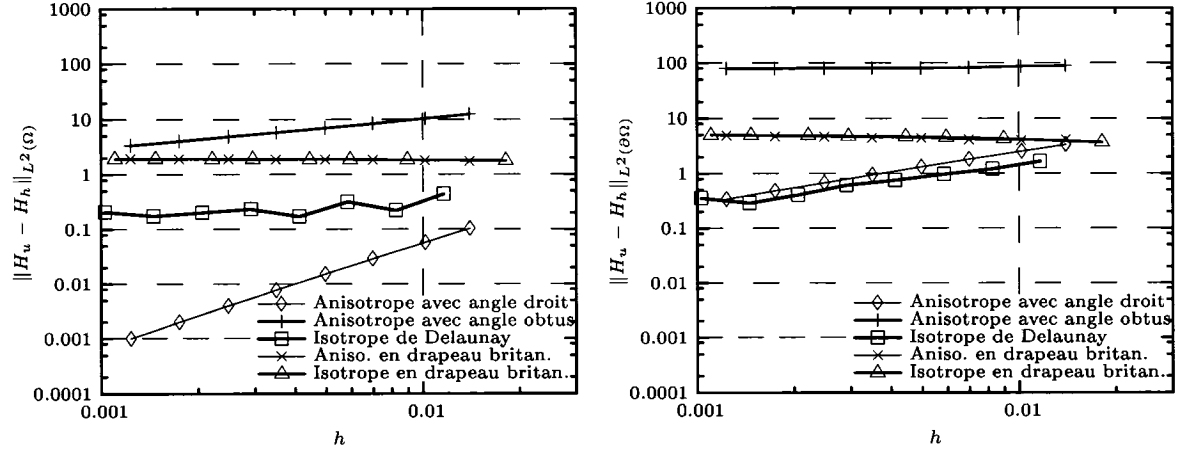


FIGURE III.34 Gauche : 3* ; droite : 4*.

Graphe de convergence : fonction $u_9 = e^{-5x} + e^{-5y}$; méthode *SAL*.

1* Sur le domaine de calcul - Ω ;

2* Sur tous les éléments appartenant à la frontière du domaine - Ω_1 ;

3* Sur tous les éléments appartenant au domaine interne - Ω_2 ;

4* Sur la frontière du domaine - Ω_3 .

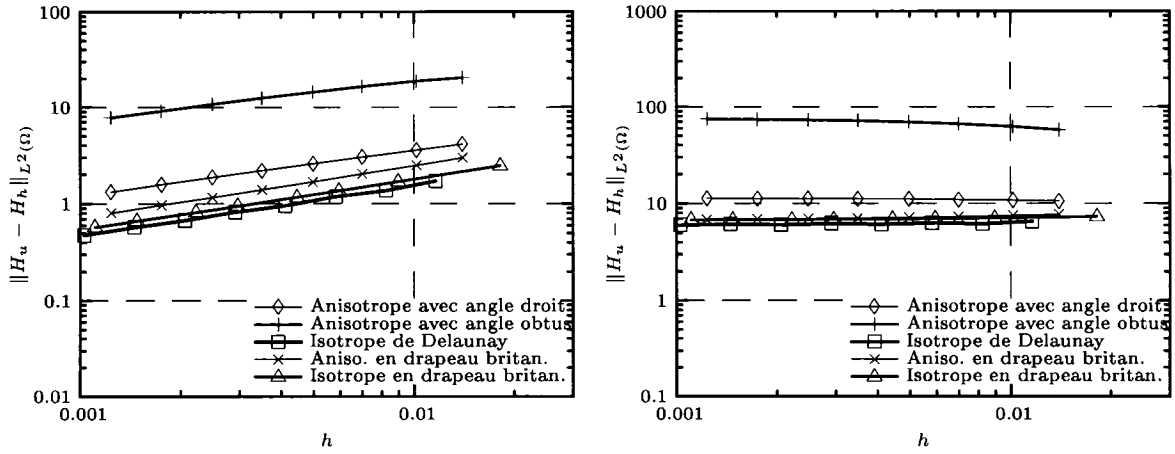


FIGURE III.35 Gauche : 1* ; droite : 2*.

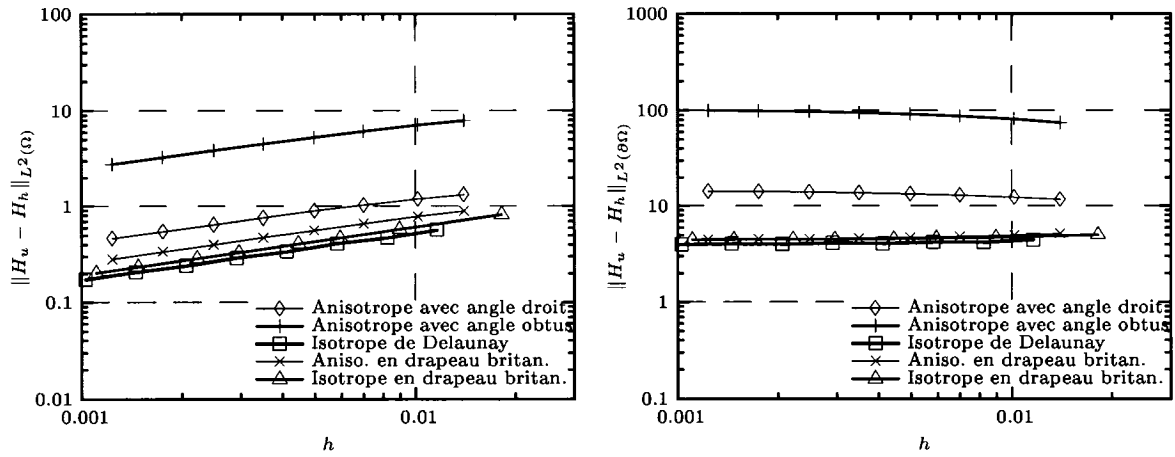


FIGURE III.36 Gauche : 3* ; droite : 4*.

Graphe de convergence : fonction $u_9 = e^{-5x} + e^{-5y}$; méthode *DAL*.

1* Sur le domaine de calcul - Ω ;

2* Sur tous les éléments appartenant à la frontière du domaine - Ω_1 ;

3* Sur tous les éléments appartenant au domaine interne - Ω_2 ;

4* Sur la frontière du domaine - Ω_3 .

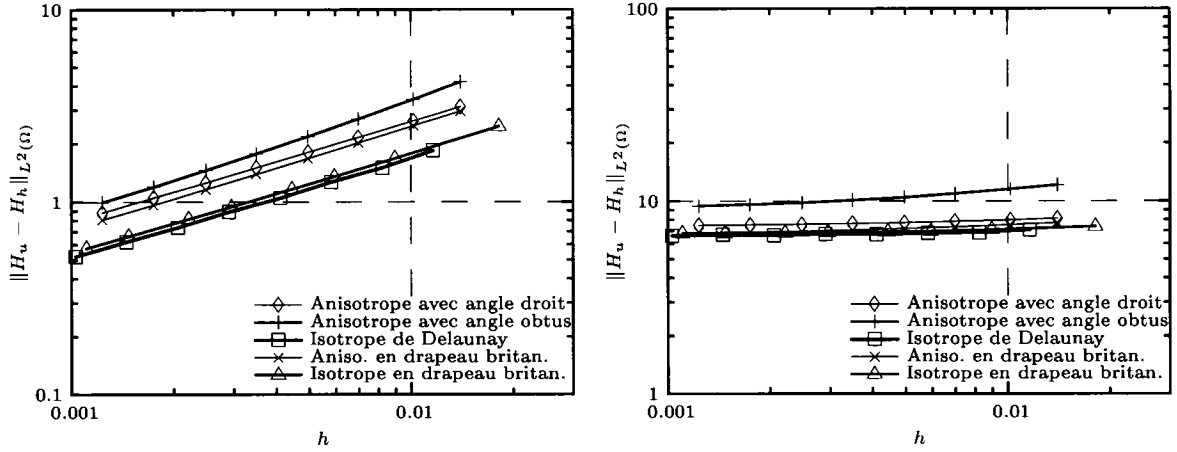


FIGURE III.37 Gauche : 1* ; droite : 2*.

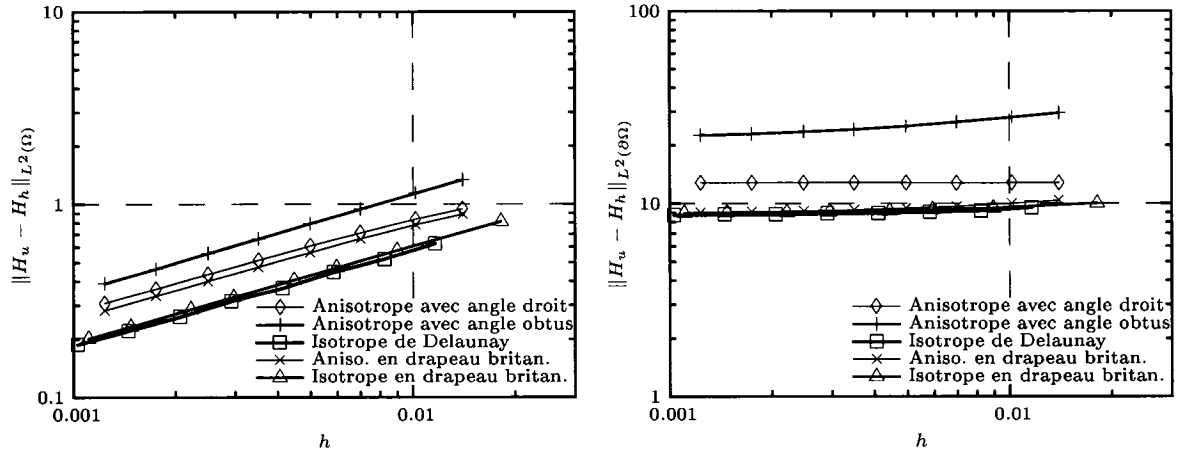


FIGURE III.38 Gauche : 3* ; droite : 4*.

Graphe de convergence : fonction $u_9 = e^{-5x} + e^{-5y}$; méthode *DPL2*.

1* Sur le domaine de calcul - Ω ;

2* Sur tous les éléments appartenant à la frontière du domaine - Ω_1 ;

3* Sur tous les éléments appartenant au domaine interne - Ω_2 ;

4* Sur la frontière du domaine - Ω_3 .

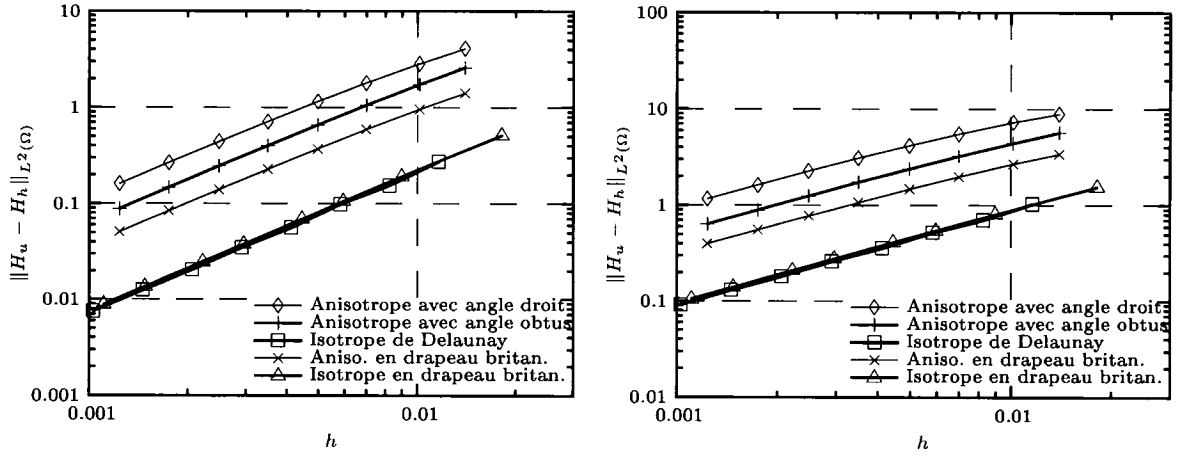


FIGURE III.39 Gauche : 1* ; droite : 2*.

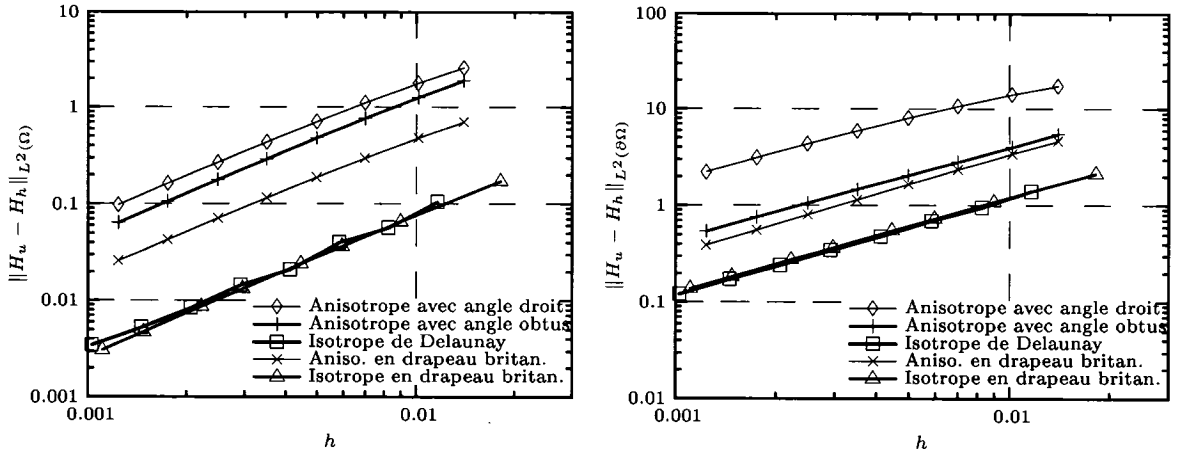


FIGURE III.40 Gauche : 3* ; droite : 4*.

Graphe de convergence : fonction $u_9 = e^{-5x} + e^{-5y}$; méthode AQ .

1* Sur le domaine de calcul - Ω ;

2* Sur tous les éléments appartenant à la frontière du domaine - Ω_1 ;

3* Sur tous les éléments appartenant au domaine interne - Ω_2 ;

4* Sur la frontière du domaine - Ω_3 .

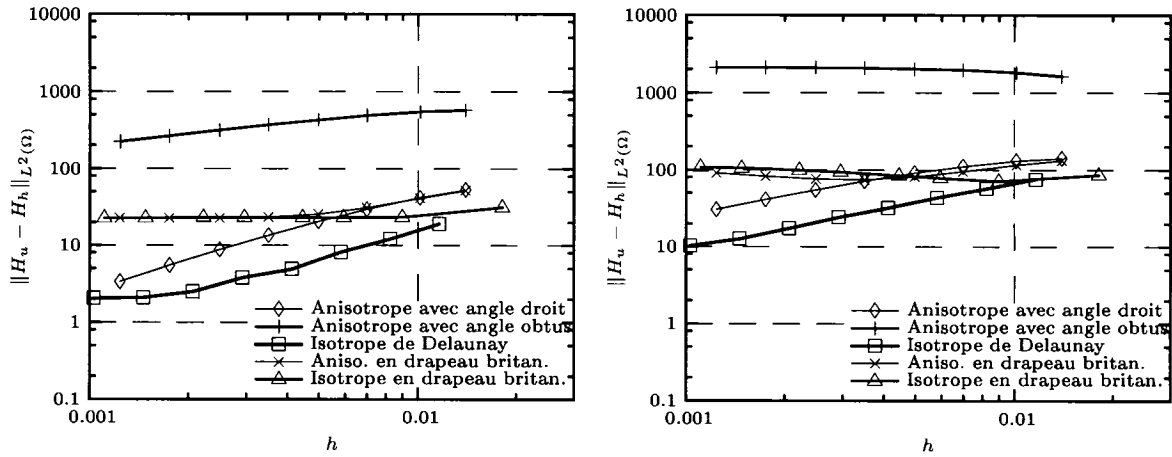


FIGURE III.41 Gauche : 1* ; droite : 2*.

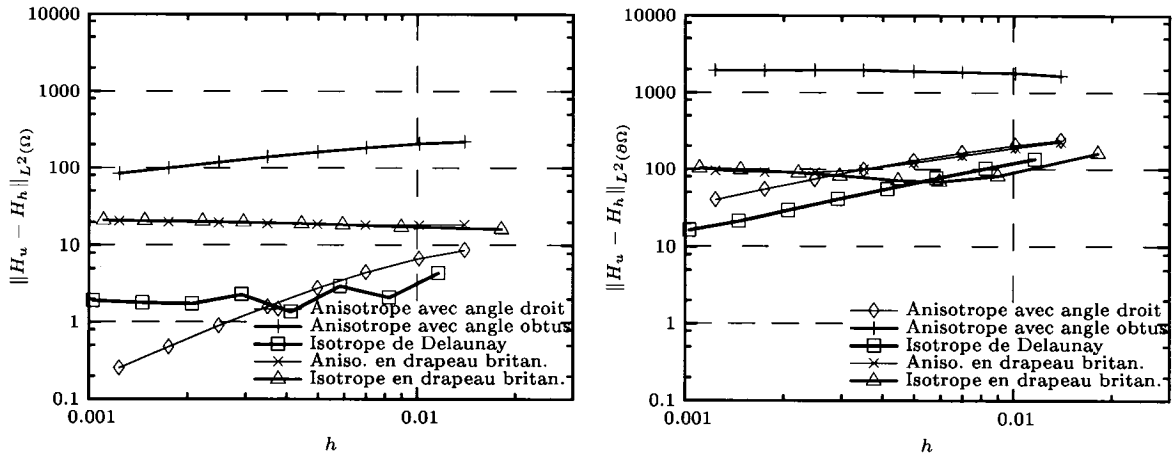


FIGURE III.42 Gauche : 3* ; droite : 4*.

Graphe de convergence : fonction $u_{10} = e^{-25x} + e^{-25y}$; méthode *SAL*.

1* Sur le domaine de calcul - Ω ;

2* Sur tous les éléments appartenant à la frontière du domaine - Ω_1 ;

3* Sur tous les éléments appartenant au domaine interne - Ω_2 ;

4* Sur la frontière du domaine - Ω_3 .

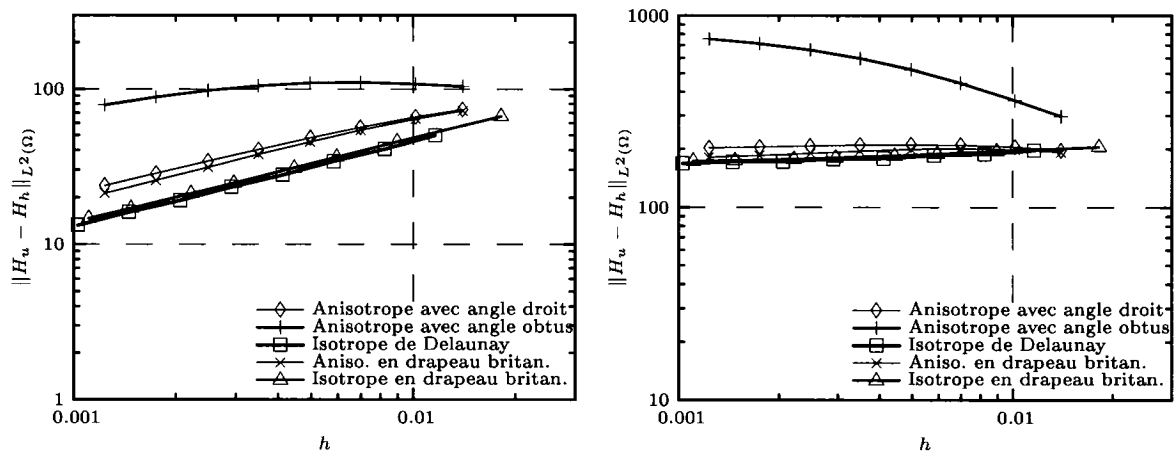


FIGURE III.43 Gauche : 1* ; droite : 2*.

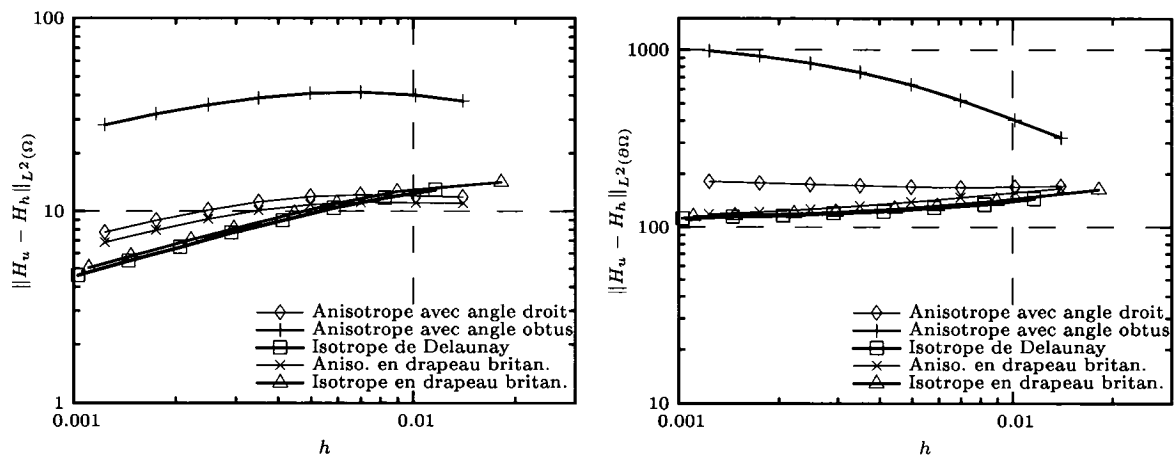


FIGURE III.44 Gauche : 3* ; droite : 4*.

Graphe de convergence : fonction $u_{10} = e^{-25x} + e^{-25y}$; méthode *DAL*.

1* Sur le domaine de calcul - Ω ;

2* Sur tous les éléments appartenant à la frontière du domaine - Ω_1 ;

3* Sur tous les éléments appartenant au domaine interne - Ω_2 ;

4* Sur la frontière du domaine - Ω_3 .

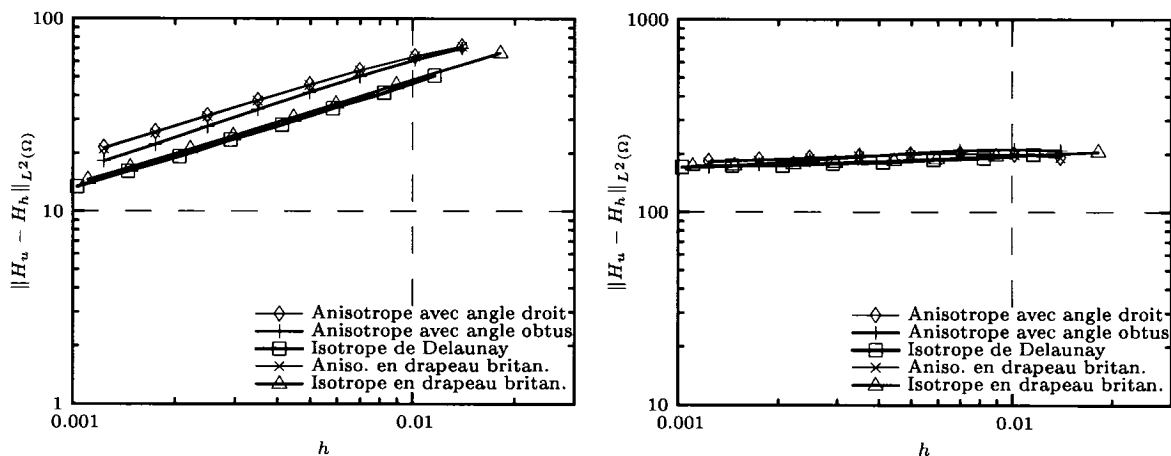


FIGURE III.45 Gauche : 1* ; droite : 2*.

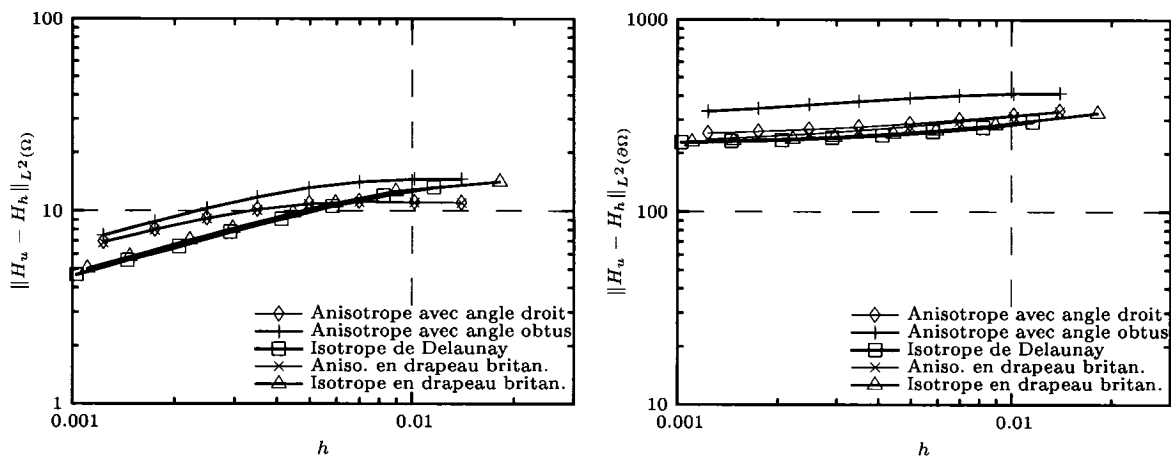


FIGURE III.46 Gauche : 3* ; droite : 4*.

Graphe de convergence : fonction $u_{10} = e^{-25x} + e^{-25y}$; méthode *DPL2*.

1* Sur le domaine de calcul - Ω ;

2* Sur tous les éléments appartenant à la frontière du domaine - Ω_1 ;

3* Sur tous les éléments appartenant au domaine interne - Ω_2 ;

4* Sur la frontière du domaine - Ω_3 .

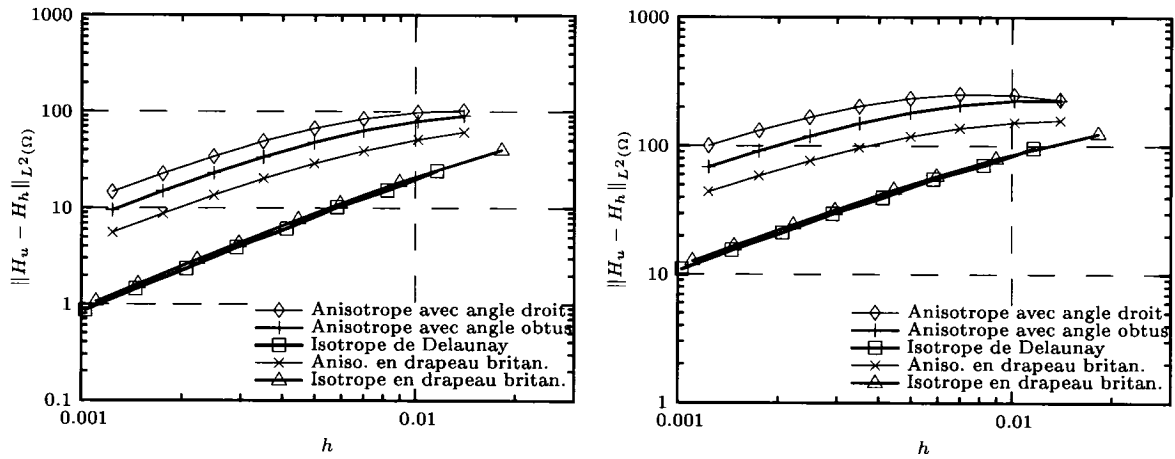


FIGURE III.47 Gauche : 1* ; droite : 2*.

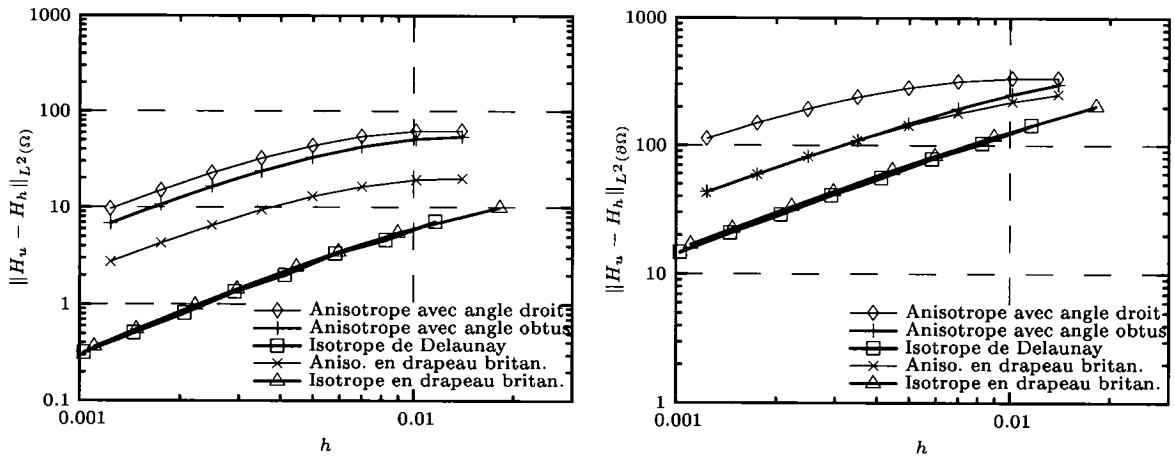


FIGURE III.48 Gauche : 3* ; droite : 4*.

Graphe de convergence : fonction $u_{10} = e^{-25x} + e^{-25y}$; méthode AQ .

- 1* Sur le domaine de calcul - Ω ;
- 2* Sur tous les éléments appartenant à la frontière du domaine - Ω_1 ;
- 3* Sur tous les éléments appartenant au domaine interne - Ω_2 ;
- 4* Sur la frontière du domaine - Ω_3 .