Étude numérique d'estimations d'erreur a posteriori

Élisabeth Pichelin* - Michel Fortin* - Sylvain Boivin**

* GIREF, Département de Mathématiques et Statistiques Pavillon Pouliot, Université Laval, Québec, GIK 7P4, Canada

RÉSUMÉ. Soit $u \in V$ la solution exacte d'un problème variationnel approchée par $u_h \in V_h$, V_h étant un espace d'approximation à préciser. L'estimation a posteriori de l'erreur $||u-u_h||$ permet en particulier de mesurer la précision (locale) de u_h . Nous présentons les idées de base de deux types d'estimateurs : l'un basé sur l'erreur d'interpolation et l'autre basé sur une décomposition hiérarchique de l'espace d'approximation. Pour un problème elliptique discrétisé par une méthode éléments finis, nous comparons des résultats numériques pour illustrer la robustesse et l'exactitude des estimateurs. Ces estimateurs peuvent être utilisés pour des techniques d'adaptation automatique de maillage.

ABSTRACT. Let $u \in V$ be the exact solution of a variational problem, which is approximated by some $u_h \in V_h$, V_h being a suitable approximation space. A posteriori estimation of the error $||u-u_h||$ measures the (local) quality of u_h . Basic ideas for two kinds of error estimates are presented: one lies on interpolation error, the other on a hierarchical basis. For a given elliptic boundary value problem approximated by a finite element method, some numerical results are given to show and compare the effectiveness and efficiency of the estimates. These estimates can be used in a self-adaptive mesh modification process.

MOTS-CLÉS: estimateurs d'erreur a posteriori, erreur d'interpolation, fonctions hiérarchiques, méthode éléments finis.

KEY WORDS: a posteriori error estimates, interpolation error, hierarchical basis, finite element method.

^{**} Département d'Informatique et de Mathématique Université de Québec à Chicoutimi, G7H 2B1, Canada

1. Introduction

Depuis les premiers travaux effectués par Babuška et Rheinboldt [BAB 78], l'importance des estimateurs d'erreur a posteriori est bien établie et suscite un intérêt grandissant. Non seulement les estimateurs a posteriori mesurent la qualité de la solution calculée, mais ils fournissent aussi une information pour contrôler les algorithmes d'adaptation de maillage. Par exemple, dans le domaine de la mécanique des fluides compressibles, [BAB 86, FOR 96, PER 87] font état des multiples avantages de ces méthodes. Ces travaux mettent en évidence la haute précision des solutions obtenues, l'automatisation de la méthode numérique et les économies réalisées en terme de fiabilité et de temps de calcul. Le développement de l'estimation a posteriori a été motivé principalement par trois raisons:

- 1. La première est la nécessité d'établir la précision des résultats obtenus par un calcul éléments (ou volumes) finis: quel crédit leur accorder? Tous les phénomènes qui interviennent sont-ils bien pris en compte dans la modélisation?
- 2. Le second objectif est de permettre à quiconque d'utiliser un code de calcul. Il est souhaitable que l'utilisateur d'un logiciel de simulation n'ait pas à intervenir dans la construction du maillage pour obtenir la précision de calcul qui lui est nécessaire.
- 3. Enfin, le troisième axe d'étude des estimateurs d'erreur est plus particulièrement orienté vers les problèmes tridimensionnels pour lesquels la taille des maillages est limitée par la place mémoire disponible et le coût de la résolution.

Ces spécifications font apparaître deux problèmes duaux : estimer la précision de la solution obtenue sur les paramètres principaux de la simulation et proposer des moyens de calculer une nouvelle solution qui respecte une précision minimale. Le premier problème est véritablement celui de l'estimation d'erreur alors que le second concerne les méthodes adaptatives.

Entre le problème physique initial et le résultat d'un calcul numérique, plusieurs causes d'erreur s'enchaînent: les erreurs introduites lors de la modélisation du problème réel par une formulation mathématique, lors de la simplification de cette formulation pour un traitement numérique, lors de l'entrée des données dans le modèle, lors du passage au modèle numérique discret et enfin lors de la résolution sur ordinateur avec les erreurs d'arrondis. Le seul type d'erreur pris en compte ici est l'erreur de discrétisation. Un estimateur d'erreur a posteriori est alors une approximation de l'erreur entre la solution exacte (inconnue) et celle du problème discret.

Les propriétés d'un bon estimateur sont de définir des bornes supérieure et inférieure de l'erreur. La borne supérieure permet d'assurer que la solution numérique atteint une tolérance donnée. La borne inférieure garantit que l'erreur n'est pas surestimée.

De plus, dans le but de contrôler les maillages, nous avons besoin d'un indicateur local de l'erreur commise de manière à définir les zones qui doivent être raffinées ou déraffinées. Un indicateur local doit permettre de construire un maillage optimal, c'est-à-dire qui minimise le nombre de degrés de liberté du maillage pour une précision donnée. Pour un problème sans singularité, Babuška et Rheinboldt [BAB 78] montrent que le maillage est optimal si l'erreur est uniformément répartie.

Trois approches principales peuvent être distinguées dans le développement des estimateurs *a posteriori* [BAN 91, BAR 91, ZIE 88, VER 89]: les méthodes basées sur un post-traitement, sur le résidu ou sur l'erreur d'interpolation. Notre étude expérimentale présente et compare les deux dernières techniques pour différentes méthodes de calcul et en connexion avec un procédé d'adaptation. Les approches suggérées ici définissent des estimateurs d'erreur locaux sur les arêtes du maillage, plutôt que par élément.

Afin de rendre plus claires les techniques employées, nous nous appuyons sur le problème modèle du laplacien présenté au paragraphe suivant. Puis chacun des estimateurs d'erreur *a posteriori* est défini ainsi que ses méthodes de calcul. Les propriétes et les comportements numériques des estimateurs seront alors discutées.

2. Cadre général

2.1. Espaces d'éléments finis

Une triangulation (conforme) $\mathcal T$ d'un domaine $\Omega\subset \mathbb R^2$ est une partition de Ω en N sous-domaines T telle que :

$$\overline{\Omega} = \bigcup_{j=1}^N \overline{T_j},$$

— pour $i \neq j$ l'ensemble $\overline{T_i} \cap \overline{T_j}$ est vide ou contient un sommet ou une arête commune.

Sur une triangulation \mathcal{T} , définissons un espace d'éléments finis V_h par un ensemble de fonctions de base $\{\varphi_n\}_{n\in\mathcal{N}}$ où \mathcal{N} est l'ensemble des nœuds de \mathcal{T} . Ces points permettent de définir les fonctions de base par :

$$\varphi_n(n') = c_n \delta_{nn'}, \quad \varphi_n \in P_k(T)$$

où c_n est un facteur d'échelle approprié et $P_k(T)$ est l'espace des fonctions polynomiales de degré inférieur ou égal à k par élément.

Notons \mathcal{N}^{∂} l'ensemble $\mathcal{N} \cap \partial \Omega$ et $\mathring{V}_h = \left\{ \varphi \in V_h \; ; \; \varphi(n) = 0 \; \forall n \in \mathcal{N}^{\partial} \right\}$ le sousespace de V_h des fonctions s'annulant sur la frontière.

2.2. Le problème modèle

470

Soit $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ un domaine ouvert de frontière polygonale $\partial\Omega$. Nous considérons le problème elliptique suivant :

$$\begin{aligned}
-\nabla \cdot (a(x)\nabla u(x)) &= f & \text{dans } \Omega \\
u &= u^d & \text{sur } \partial\Omega
\end{aligned} [1]$$

où $f \in L^2(\Omega)$ et $u^d \in H^{\frac{1}{2}}(\partial \Omega)$ sont des fonctions données.

On introduit l'espace de Sobolev $V=\left\{u\in H^1(\Omega)\;;\; u=u^d\; {\rm sur}\;\partial\Omega\right\}$. La formulation faible associée au problème (1) est :

Trouver $u \in V$ tel que :

$$\int_{\Omega} a \nabla u \nabla v \, dx = \int_{\Omega} f v \, dx \quad \forall v \in \mathring{V}.$$
 [2]

Notons $a(\cdot, \cdot)$ la forme bilinéaire $a(u, v) = \int_{\Omega} a \nabla u \nabla v \, dx$.

Pour s'assurer que le problème (2) admet une solution unique, nous supposons que la forme bilinéaire $a(\cdot, \cdot)$ satisfait la condition de continuité:

$$|a(u,v)| \leqslant c |||u|||_V |||v|||_V \quad \forall u \in V, \forall v \in V$$

où $||| \cdot |||_V$ est une norme en énergie dans l'espace V.

La solution du problème (2) est approchée par une méthode d'éléments finis. Soit \mathcal{T} une triangulation de Ω . Nous approchons l'espace continu V dans \mathcal{T} par un sous-espace de dimension finie $V_h \subset V$. Le problème discret s'écrit alors :

Trouver $u_h \in V_h$ tel que:

$$\int_{\Omega} a \nabla u_h \nabla \varphi \, dx = \int_{\Omega} f \varphi \, dx \quad \forall \varphi \in \mathring{V}_h. \tag{3}$$

Par abus de notation, nous écrivons les intégrales sur Ω pour le problème discret alors qu'elles sont évaluées sur la triangulation \mathcal{T} .

L'espace de discrétisation considéré V_h est l'espace des fonctions continues sur le domaine et linéaires par élément du maillage.

3. Estimateurs basés sur l'erreur d'interpolation

3.1. Idée générale

La propriété fondamentale de la méthode des éléments finis est que plus la taille des éléments diminue, plus l'erreur de discrétisation est faible. L'analyse numérique nous donne des résultats d'estimations d'erreur *a priori* concernant cette convergence en fonction du type d'interpolation utilisée. *A priori*, nous avons la majoration suivante:

$$||u-u_h|| \leqslant c ||u-\pi_h u||$$

où $\pi_h u$ est l'interpolation de la solution u sur l'espace éléments finis V_h . Ainsi le contrôle de l'erreur d'interpolation amène à un contrôle de l'erreur sur la solution elle-même. Les résultats expérimentaux présentés plus loin montrent que le lien est beaucoup plus fort que la simple majoration a priori et que l'utilisation de l'erreur d'interpolation fournit un bon estimateur.

L'estimateur employé ici est dérivé de la théorie de l'interpolation par éléments finis. La solution est développée en une série de Taylor et le premier terme d'ordre supérieur négligé par les fonctions d'interpolation est utilisé comme indicateur d'erreur. Pour une approximation linéaire, ce terme est proportionnel à la dérivée seconde de la solution.

Pour des raisons de simplicité, l'estimation de l'erreur d'interpolation est d'abord illustré dans le cas unidimensionnel, puis appliqué en dimension 2.

Soit u une fonction approchée sur l'intervalle I = [0, h] par son interpolée πu_h linéaire par intervalle, exacte aux extrémités. En utilisant un développement de Taylor d'ordre 2, l'erreur d'interpolation en un point $x \in I$ est donnée par :

$$(u - \pi u_h)(x) = \frac{x^2 - xh}{2} u''(x).$$
 [4]

Peraire *et al.* [PER 87] évaluent l'erreur d'interpolation élémentaire sur l'intervalle *I* par :

$$E_{I} = \left(\frac{1}{h} \int_{0}^{h} (u - \pi u_{h})^{2}(x) dx\right)^{\frac{1}{2}}$$

qui est une valeur moyenne de $(u - \pi u_h)$ sur I. On peut intégrer exactement cette expression si u est une fonction quadratique (u'') constante sur I:

$$E_I = |u''|_I \left(\frac{1}{4h} \int_0^h x^2 (x-h)^2 dx\right)^{\frac{1}{2}}$$
$$= |u''|_I \frac{h^2}{\sqrt{120}}.$$

Même si u n'est pas quadratique, on peut considérer que l'erreur E_I est proportionnelle au produit de h^2 par la dérivée seconde de u.

En pratique, ni u, ni ses dérivées ne sont des données accessibles mais on connaît une solution approchée, assimilée à $\pi_h u$ si elle est linéaire par intervalle. $\pi_h u$ n'est pas dérivable partout et, là où elle l'est, sa dérivée seconde n'apporte aucune information pour l'estimation $((\pi_h u)'' = 0)$. Cependant il est toujours possible de définir un opérateur de dérivée seconde par un schéma aux différences finies. Ainsi, l'erreur d'interpolation E_I peut être évaluée par l'estimateur d'erreur:

$$\mathcal{E}(I) = c h_I^2 |D_I^2(\pi_h u)|$$
 [5]

où h_I est la longueur de l'intervalle I et D_I^2 est un opérateur approché de dérivée seconde de l'espace des fonctions continues linéaires par intervalle sur chaque intervalle de discrétisation.

En dimension 2, la fonction u est interpolée sur un maillage triangulaire par la fonction $\pi_h u$, continue, linéaire par élément et qui prend les mêmes valeurs que u aux sommets. Le rôle de la dérivée seconde est maintenant joué par la matrice hessienne :

$$H = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} & \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} \\ \\ \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} & \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \end{pmatrix}.$$

Si x est un vecteur unitaire, la dérivée seconde de u dans la direction x s'écrit :

$$\frac{\partial^2 u}{\partial \mathbf{x}^2} = \mathbf{x}^\mathsf{T} H \mathbf{x}.$$

De même qu'en dimension 1, u n'est pas connue en général et ses dérivées secondes sont évaluées à partir de $\pi_h u$. Cela nécessite la définition d'opérateurs discrets D^{ij} , i, j = 1 ou 2, agissant sur les fonctions continues et linéaires par élément, qui permettent d'approcher H par la matrice :

$$\widehat{H} = \left(D^{ij}(\pi_h u) \right)_{i,j=1...2}.$$

On remarque cependant que l'erreur unidimensionnelle (4) ne se justifie que lorsque $\pi_h u$ est l'interpolé de u sur l'intervalle I. En dimension supérieure à 1, $\pi_h u$ est l'interpolé sur l'espace des fonctions continues sur le domaine et linéaires par élément, ayant les mêmes valeurs que u aux sommets. Les seuls segments sur lesquels l'estimateur 1D (5) reste valable sont les arêtes du maillage.

3.2. Méthodes de calcul

L'estimateur basé sur l'erreur d'interpolation ne nous permet d'obtenir qu'une majoration locale de l'erreur de discrétisation. Mais il faut garder en mémoire qu'un estimateur d'erreur est utilisé pour fournir une indication sur l'erreur relative et que son calcul ne doit pas avoir un coût exagéré par rapport au temps total de calcul de la solution.

Il nous faut à présent expliciter le calcul des opérateurs de dérivées secondes. Pour évaluer la matrice hessienne, on utilise la solution en éléments finis u_h . Or u_h est continue sur le domaine et linéaire par élément, donc n'est pas deux fois dérivable.

3.2.1. Estimateur \mathcal{E}_1 : calcul du hessien par formulation faible

Nous définissons l'estimateur en 2D par extension de l'estimateur 1D (5). Soit a une arête de longueur h_a , supportée par un vecteur unitaire \mathbf{x}_a quelconque. L'erreur d'interpolation linéaire de u sur a peut être estimée par :

$$\mathcal{E}_1(a) = h_a^2 |\mathbf{x}_a^\mathsf{T} \widehat{H} \mathbf{x}_a| \tag{6}$$

La première méthode de calcul du hessien consiste à projeter les dérivées secondes de u sur l'espace des fonctions linéaires par élément. Après une intégration par partie, la formulation faible permettant d'obtenir une approximation continue des dérivées secondes s'écrit pour tout $\hat{H}_{ij} \in V_h$:

$$\int_{\Omega} \widehat{H}_{ij} \, \varphi \, dx = -\int_{\Omega} \frac{\partial u_h}{\partial x_i} \frac{\partial \varphi}{\partial x_j} \, dx \quad \forall \varphi \in \mathring{V}_h$$
 [7]

En raison de l'absence de conditions aux limites, les valeurs aux bords sont obtenues par une méthode d'extrapolation.

La matrice de masse du problème (7) est une matrice à diagonale dominante et est bien conditionnée.

Condensation de la matrice masse (mass lumping).

Cette technique conduit à une expression simple pour le calcul de \hat{H}_{ij} en chaque sommet s de la triangulation:

$$\widehat{H}_{ij}(s) = -\frac{\int_{\Omega_s} \frac{\partial u_h}{\partial x_i} \frac{\partial \varphi_s}{\partial x_j} dx}{\int_{\Omega_s} \varphi_s dx}$$

où Ω_s représente l'ensemble des éléments ayant le sommet s en commun et φ_s est la fonction d'interpolation du sommet s. Toutefois, cette méthode entraîne une diffusion comme nous le verrons lors de la comparaison des résultats numériques au paragraphe 5.

Résolution du problème global.

En utilisant les valeurs aux bords obtenues par la méthode précédente comme conditions aux limites, le problème (7) est résolu à l'aide de la méthode du gradient conjugué. La vitesse de convergence de cette méthode est améliorée ici en utilisant une préconditionneur diagonal (figure 1).

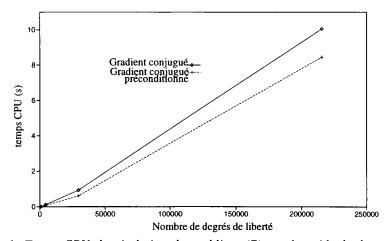


Figure 1. Temps CPU de résolution du problème (7) par la méthode du gradient conjugué

3.2.2. Estimateur \mathcal{E}_2 : valeurs absolues du hessien

Dans le cadre de l'adaptation de maillage, il est plus classique de considérer une matrice M symétrique définie positive ([BES 92, BOR 95, VAL 92]). La construction de la matrice M s'obtient en gardant les mêmes directions propres que \widehat{H} et les valeurs absolues des valeurs propres associées. Soient Λ la matrice diagonale des valeurs propres de \widehat{H} et R la matrice des vecteurs propres :

$$\widehat{H} = R^{\mathsf{T}} \Lambda R \text{ et } M = R^{\mathsf{T}} |\Lambda| R.$$

La dérivée seconde de u dans une direction \mathbf{x} quelconque est alors majorée en valeur absolue par :

$$\left| \frac{\partial^2 u}{\partial \mathbf{x}^2} \right| \simeq |\mathbf{x}^\mathsf{T} \hat{H} \mathbf{x}| \leqslant \mathbf{x}^\mathsf{T} M \mathbf{x}.$$
 [8]

La seconde relation est une égalité pour ${\bf x}$ de même direction que l'une des directions propres de \widehat{H} , et pour tout ${\bf x}$ si \widehat{H} est positive $(M=\widehat{H})$ ou négative $(M=-\widehat{H})$. On introduit alors un nouvel estimateur défini pour chaque arête a du maillage :

$$\mathcal{E}_2(a) = h_a^2 \left(\mathbf{x}_a^\mathsf{T} M \mathbf{x}_a \right). \tag{9}$$

3.2.3. Estimateur \mathcal{E}_3 : estimation par dérivation du gradient

Un opérateur de dérivées secondes discrètes de type différences finies a été développé. Une première étape consiste à projeter le gradient de la solution éléments finis u_h sur l'espace des fonctions continues sur tout le domaine et linéaires par élément :

Trouver $Gu_h \in V_h \times V_h \times V_h$ tel que:

$$\int_{\Omega} Gu_h \, \Phi \, dx = \int_{\Omega} \nabla u_h \, \Phi \, dx \quad \forall \Phi \in \mathring{V}_h \times \mathring{V}_h \times \mathring{V}_h.$$

Ce système est résolu par la méthode du gradient conjugué.

La deuxième étape approche les dérivées secondes de u sur les arêtes du maillage en considérant la dérivée directionnelle de Gu_h dans la direction (unitaire) \mathbf{x}_a de l'arête a. Celle-ci est définie par :

$$D_a G u_b = \mathbf{x}_a \cdot G u_b$$

On note a_0 et a_1 les extrémités de l'arête a. L'estimation de l'erreur d'interpolation est donnée par l'expression :

$$\mathcal{E}_3(a) = h_a |D_a Gu_h(a_1) - D_a Gu_h(a_0)|.$$
 [10]

La notation que nous avons choisie correspond à une notation de type différence centrée.

Les indicateurs basés sur l'erreur d'interpolation sont directement liés à la solution approchée et sont donc indépendants de la nature des équations différentielles à résoudre. Ils ne dépendent que de la solution par éléments finis, des fonctions d'interpolation et du maillage. Ce type d'estimateur est donc très général et est applicable à une vaste gamme de problèmes. Il est portable d'un type d'équations aux dérivées partielles à un autre, pourvu que l'on considère une variable significative du problème physique.

4. Estimateurs basés sur une méthode hiérarchique

Les estimateurs basés sur une méthode hiérarchique utilisent la technique des estimateurs basés sur le résidu. Ce type d'estimateur a un fondement mathématique plus riche que la méthode précédente.

4.1. Définition de l'estimateur hiérarchique \mathcal{E}_4

L'idée de base de l'approche hiérarchique est simple ([ZIE 86]). Soient u et u_h les solutions des problèmes (1) et (3) respectivement. L'erreur de discrétisation $e = u - u_h \in \mathring{V}$ est solution du problème :

$$a(e, v) = r_h(v) \quad \forall v \in \mathring{V},$$
 [11]

où le membre de droite:

$$r_h(v) = (f, v) - a(u_h, v) \quad \forall v \in \mathring{V}$$

représente le résidu de u_h . La discrétisation du problème (11) nécessite un espace d'éléments finis plus riche \widetilde{V}_h tel que $V_h \subset \widetilde{V}_h \subset V$. Par exemple, pour une approximation linéaire par élément de la solution u, on peut passer à une approximation quadratique par élément pour l'erreur e. Mais le coût de calcul d'une approximation du second ordre est trop élevé pour mesurer la qualité de la solution linéaire. Une autre possibilité est de considérer une décomposition hiérarchique de l'espace \widetilde{V}_h :

$$\widetilde{V}_h = V_h \oplus C_h$$

où la solution initiale grossière est fixée et une correction est calculée uniquement pour les degrés de liberté supplémentaires, c'est-à-dire ceux qui n'étaient pas présents

dans la discrétisation initiale. Pour être plus précis, pour l'espace V_h des fonctions continues et linéaires par élément, l'espace C_h est constitué des fonctions continues et quadratiques par élément associées au milieu des arêtes (figure 2).

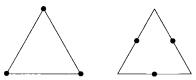


Figure 2. Espaces d'éléments finis V_h (gauche) et C_h (droite)

La solution plus précise $\widetilde{u}_h \in \widetilde{V}_h$ se décompose de façon unique en : $\widetilde{u}_h = u_h + e_h$, où $u_h \in V_h$ et $e_h \in C_h$. Ainsi, la correction $e_h \in C_h$ peut être utilisée pour approcher l'erreur e. On définit alors l'estimateur d'erreur a posteriori défini sur les arêtes du maillage par :

Trouver $e_h \in C_h$ tel que :

$$a(e_h, c_h) = (f, c_h) - a(u_h, c_h) \quad \forall c_h \in \mathring{C}_h.$$
 [12]

Le problème (12) est un problème global. Sa matrice est bien conditionnée. L'espace de discrétisation C_h s'annulant aux sommets de la triangulation, la correction e_h reste assez locale. La matrice du problème (12) est symétrique et creuse. En fait, il y a au plus cinq coefficients non nuls par ligne. La taille de la matrice est égale au nombre d'arêtes. Le système est résolu par la méthode du gradient conjugué. La vitesse de convergence de la méthode itérative peut ici aussi être améliorée en utilisant un préconditionneur diagonal (figure 3).

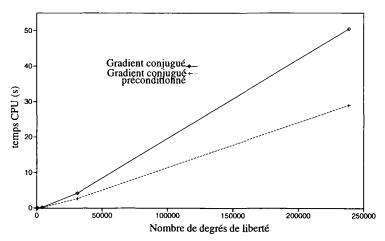


Figure 3. Temps CPU de résolution du problème (12) par la méthode du gradient conjugué

Le calcul de l'estimation de l'erreur est donc basé sur le résidu de la solution initiale, mais n'est pas lié à une propriété de super-convergence comme dans la méthode de Zienkiewicz et Zhu [ZIE 92]. Cet estimateur diffère des autres méthodes de calcul de résidus qui nécessitent la résolution de problèmes locaux de type Neumann ([BAN 90, HÉT 91, VER 94]).

Estimateur \mathcal{E}_4 :

Nous noterons $\mathcal{E}_4(a)$ l'indicateur d'erreur défini pour toute arête a du maillage à partir de la correction évaluée au point milieu x_m de l'arête :

$$\mathcal{E}_4(a) = |e_h(x_m)|. \tag{13}$$

4.2. Propriétés

Bank et Smith [BAN 98, BAN 93] montrent sous certaines conditions que les estimateurs d'erreur *a posteriori* basés sur une méthode hiérarchique fournissent des bornes supérieure et inférieure de l'erreur totale:

$$|c_1|||u-u_h||| \le |||e_h||| \le |c_2|||u-u_h|||$$

pour une norme en énergie || | · || | appropriée.

Dans le cas d'un problème auto-adjoint, ces conditions sont :

- une hypothèse de saturation qui établit que, pour la norme en énergie, la solution éléments finis dans l'espace enrichi est une meilleure approximation de la solution u que u_h ,
- l'inégalité de Cauchy étendue aux espaces de la décomposition hiérarchique pour la norme en énergie.

Pour les problèmes non auto-adjoints, à ces conditions s'ajoutent une hypothèse de continuité et une condition inf-sup pour la forme bilinéaire afin que la formulation éléments finis soit bien définie.

Par contre, nous ne disposons d'aucun résultat d'analyse locale. Seuls les résultats numériques montrent que des informations locales et directionnelles peuvent être obtenues à partir des estimateurs d'erreur basés sur une méthode hiérarchique (voir paragraphe 5).

REMARQUE. — Supposons que la solution u est bien définie par une approximation quadratique sur chaque arête a du maillage. Notre estimateur d'erreur a posteriori évalué au centre de l'arête est lié aux dérivées secondes de u par la relation :

$$e_h(x_m) = -\frac{1}{8} h_a^2 |\mathbf{x}_a^\mathsf{T} H \mathbf{x}_a|.$$

5. Étude expérimentale des estimateurs d'erreur a posteriori

Dans cette dernière partie, nous présentons des résultats numériques comparant l'efficacité des estimateurs introduits dans le cas des éléments finis linéaires. Nous voulons en vérifier la précision globale, correspondant aux résultats démontrés pour l'estimateur hiérarchique, mais aussi la qualité des résultats locaux et l'information directionnelle, essentielle pour une adaptation anisotrope.

Nous rappelons que les espaces de discrétisation sont :

$$V_h = \left\{ \varphi \in \mathcal{C}^0(\mathcal{T}) ; \varphi|_T \in P_1(T) \, \forall T \in \mathcal{T} \right\},$$

$$C_h = \left\{ \varphi \in \mathcal{C}^0(\mathcal{T}) ; \varphi|_a \in P_2(a) \, \forall a \in \mathcal{T} \right\}.$$

Comme problème modèle, nous considérons le problème du laplacien, où $a(x) \equiv 1$ dans (1), sur un domaine rectangulaire $\Omega = [0,2] \times [0,1]$. Le membre de droite f et la condition aux limites de Dirichlet sont donnés de telle sorte que :

$$u(x) = \arctan(10(x_1^4 x_2^4 - 0.25^4))$$
 [14]

soit la solution exacte.

Le maillage éléments finis est constitué de triangles réguliers de longueur de base h=0.125. Le calcul de chacun des estimateurs d'erreur a posteriori nécessite l'assemblage d'un problème discret. Tous les systèmes d'équations sont résolus à l'aide de la méthode du gradient conjugué avec un préconditionneur diagonal. Les itérations du gradient conjugué sont arrêtées lorsque $||r_k|| \le 10^{-8} ||r_0|| (r_k$ le résidu courant; et r_0 le résidu initial). La méthode itérative utilisée est celle de la librairie mathématique PETSc.

Erreur exacte.

Étant donné que la solution exacte est connue, nous pouvons représenter l'erreur exacte localement en tout point milieu x_m d'une arête a du maillage par la valeur :

$$e(x_m) = u(x_m) - u_h(x_m).$$
 [15]

5.1. Outil d'étude de la précision globale des estimateurs

Nous utiliserons pour vérifier ce point un indice d'efficacité κ^i_{eff} défini par le rapport de la norme de l'erreur estimée et de l'erreur réelle :

$$\kappa_{eff}^{i} = \frac{|||\mathcal{E}_{i}|||_{V_{h}}}{|||e|||_{V}} \quad i = 1, ..., 4.$$

La norme utilisée est :

$$|||v|||^2 = \sum_a \int_a v(a)^2 ds.$$

Cet indice a été évalué sur une suite de maillages réguliers du domaine rectangulaire $\Omega = [0,2] \times [0,1]$. Chaque niveau de raffinement correspond à diviser un triangle en quatre sous-triangles en s'appuyant sur les sommets et le milieu des arêtes du triangle original (figure 4).

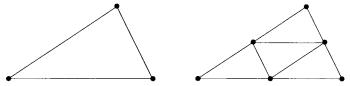


Figure 4. Triangle original (gauche) et triangle raffiné (droite)

La valeur optimale de l'indice d'efficacité est 1: la solution numérique u_h est proche de la solution exacte u. Les résultats de la figure 5 montrent son évolution en fonction du nombre de nœuds du maillage (grandeur proportionnelle à 1/h) pour les différents estimateurs.

5.2. Outil d'étude de la précision locale des estimateurs

Afin de comparer la contribution locale de chacun des estimateurs d'erreur a posteriori présentés ici, et compte tenu de la remarque du paragraphe 4.2, nous introduisons une variable l_a définie sur chaque arête a du maillage par :

$$egin{aligned} l_a^i &= rac{\sqrt{\mathcal{E}_i(a)}}{\sqrt{8}} \quad ext{pour } i = 1,..,3 \,; \ \\ l_a^4 &= \sqrt{\mathcal{E}_4(a)} \,; \ \\ l_a^{ex} &= \sqrt{|e(x_m)|}. \end{aligned}$$

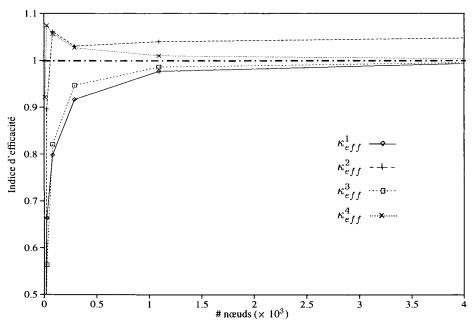


Figure 5. Indice d'efficacité

La visualisation de cette variable, constante par arête, nécessite un post-traitement pour donner une «épaisseur» aux arêtes. Au lieu de tracer des constantes par arête, nous créons des éléments s'appuyant sur les arêtes et le barycentre des éléments du maillage original. La valeur de chacun de ces nouveaux éléments est celle de l'arête du maillage original sur lequel il s'appuie (figure 6).

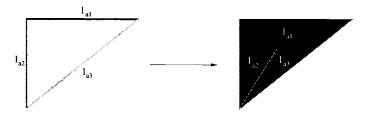


Figure 6. Représentation d'une constante par arête

Dans cette représentation, les arêtes foncées correspondent à une erreur grande et les arêtes pâles à une erreur petite. On remarquera que cette représentation traduit aussi le caractère directionnel de l'erreur (figure 7).

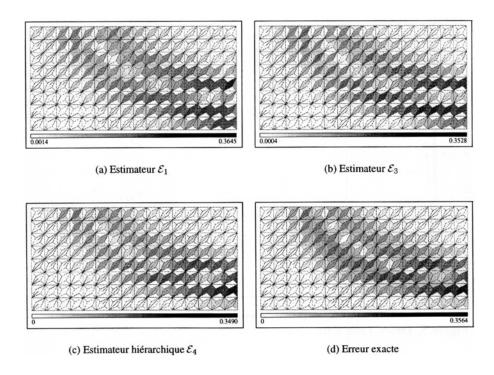


Figure 7. Comparaison des longueurs estimées

5.3. Outil d'étude du caractère directionnel des estimateurs

Les méthodes d'adaptation anisotropes sont fondées sur l'utilisation plus ou moins directe des valeurs propres et des vecteurs propres de la matrice hessienne. Nous avons donc voulu vérifier la qualité de cette information. Les résultats sont présentés à la figure 8 pour les estimateurs \mathcal{E}_1 , \mathcal{E}_3 et \mathcal{E}_4 . Les vecteurs propres associés à la matrice de l'estimateur \mathcal{E}_2 sont identiques à ceux de la matrice de l'estimateur \mathcal{E}_1 par construction. Dans les autres cas, nous utilisons les dérivées premières de Gu_h et les dérivées secondes de e_h respectivement, qui sont constantes par élément, pour estimer la matrice hessienne. La représentation interpole les matrices obtenues aux sommets.

5.4. Comparaison des estimateurs

Dans tous les cas, nous nous référons aux valeurs exactes de l'erreur ou de la matrice hessienne.

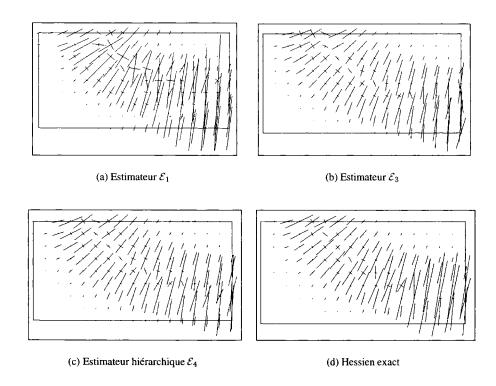


Figure 8. Vecteurs propres des matrices hessiennes approchées et exacte

L'estimateur hiérarchique (\mathcal{E}_4) .

Que ce soit pour l'efficacité globale (figure 5), la qualité des résultats locaux (figure 7(c)) ou la qualité de la matrice hessienne (figure 8(c)), l'estimateur hiérarchique domine nettement. Les valeurs locales sont bonnes et les vecteurs propres bien orientés. Dans un exemple numérique, Bornemann et al. [BOR 96] montre que, pour un estimateur basé sur le résidu, l'indice d'efficacité dépend de la constante de saturation. Cet estimateur mériterait donc une expérimentation approfondie dans des cas plus complexes.

Estimateurs basés sur le calcul approché du hessien $(\mathcal{E}_1 \text{ et } \mathcal{E}_2)$.

Nous avons ici un certain nombre de variantes. Tout d'abord l'estimateur \mathcal{E}_1 et sa variante \mathcal{E}_2 où l'on prend les valeurs absolues des valeurs propres du hessien, qui ont été utilisées dans [BOR 95, HAB 98, FOR 96, VAL 92]. Chacune de ces deux variantes peut être calculée, comme nous l'avons signalé à la section 3.2 en résolvant un système linéaire, associé à la matrice de masse, ou en condensant cette matrice sur

484

la diagonale (Mass Lumping). La figure 9 compare ces quatre variantes. On constate que la condensation de masse (figures 9(a) et 9(c)) diffuse les résultats. Ainsi, certaines régions du maillage voient leur erreur artificiellement sur ou sous-estimée. Le problème discret est alors résolu de façon globale et sa matrice est stockée dans une structure de non-zéro (Compress Sparse Row). Mais l'absence de conditions aux limites pour le problème (7) n'est pas résolue de façon satisfaisante par une extrapolation (figures 9(b) et 9(d)). L'utilisation du hessien en valeur absolue \mathcal{E}_2 non seulement demande un surcroît de calcul (évaluation des valeurs et vecteurs propres de la matrice hessienne, construction d'une nouvelle matrice) mais surtout fausse de façon importante les cartes d'erreur (figures 9(b) et 9(d)).

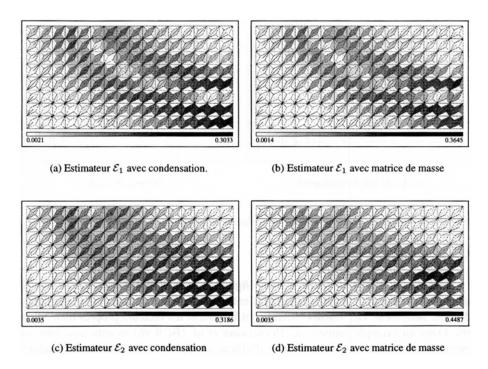


Figure 9. Carte des longueurs estimées l_a^i , i = 1, 2

Ce dernier point est encore plus apparent si on regarde l'indice global de la figure 5. L'estimateur \mathcal{E}_2 est le seul dont l'indice ne soit pas asymptôtiquement égal à 1. Nous retrouvons ici la conséquence de la majoration (8).

Pour ce qui est du caractère directionnel, les deux indicateurs ont par définition le même comportement et donnent des résultats nettement moins bons que l'erreur hiérarchique. Estimateur basé sur la dérivation numérique du gradient (\mathcal{E}_3) .

Cet estimateur fournit un calcul approché de l'erreur sur les arêtes sans utiliser la matrice hessienne. Il nécessite moins de stockage et son calcul au bord ne pose pas de problème particulier. On constate qu'il a un très bon comportement pour tous les critères. La carte d'erreur (figure 7(b)) est bonne, l'indice global (figure 5) aussi et la qualité des valeurs propres (figure 8(b)) est remarquable. Il est à la fois sensible à la norme de l'erreur mais aussi à la direction des fortes variations de la solution.

6. Conclusion

En résumé, nous pouvons conclure que l'estimateur hiérarchique et le calcul basé sur la dérivation numérique du gradient fournissent d'excellents renseignements. Le calcul direct d'un estimateur de la matrice hessienne est nettement moins bon. Si on l'utilise, il convient de ne pas utiliser la condensation de masse et d'éviter le passage à la valeur absolue du hessien.

Une application des estimateurs d'erreur a posteriori est l'adaptation automatique de maillage. Les caractéristiques des estimateurs étudiés ici permettent d'envisager des techniques d'adaptation conduisant à des maillages non structurés et étirés. Dans ce cadre, l'incidence de nos conclusions est plus grande qu'on ne pourrait le croire à première vue. En effet, les méthodes utilisées dans [BOR 95, HAB 98, FOR 96, VAL 92] sont basées sur le calcul de longueurs d'arêtes dans la métrique définie par la valeur absolue du hessien. Dans le cas où l'on ne prend pas cette valeur absolue, il peut exister des directions d'erreur nulle et le maillage optimal ne peut être obtenu en équilibrant les erreurs sur les arêtes. L'emploi direct des estimateurs basés sur le gradient \mathcal{E}_3 ou de l'estimateur hiérarchique \mathcal{E}_4 demandera donc une stratégie nouvelle qui ne soit pas fondée sur la notion de métrique et qui n'utilise pas directement les longueurs d'arêtes. Nous comptons présenter une telle stratégie dans un article ultérieur.

7. Bibliographie

- [BAB 78] BABUŠKA I. et RHEINBOLDT W., «A posteriori error estimates for the finite element method», *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, vol. 12, 1978, p. 1597–1615.
- [BAB 86] BABUŠKA I., ZIENKIEWICZ O., GAGO J. et DE A. OLIVEIRA E., «Accuracy estimates and adaptative refinements in finite element computations», Wiley, 1986.
- [BAN 90] BANK R. et WELFERT B., «A posteriori error estimates for the Stokes equations: a comparison», *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 82, 1990, p. 323–340.
- [BAN 91] BANK R. et WELFERT B., «A posteriori error estimates for the Stokes problem»,

- SIAM Journal on Numerical Analysis, vol. 28, 1991, p. 591-623.
- [BAN 93] BANK R. et SMITH R., «A posteriori error estimates based on hierarchical bases», SIAM Journal on Numerical Analysis, vol. 30, 1993, p. 921–935.
- [BAN 98] BANK R., «A simple analysis of a posteriori error estimates», *Applied Numerical Mathematics*, vol. 26, 1998, p. 153–164.
- [BAR 91] BARANGER J. et AMRI H. E., «Estimateurs a posteriori d'erreur pour le calcul adaptatif d'écoulements quasi-newtonien», *Modélisation Mathématique et Analyse Numérique*, vol. 25, 1991, p. 31–48.
- [BES 92] BESPALOV A., KUZNETSOV Y., PIRONNEAU O. et VALLET M., «Fictitious domains with separable preconditioners versus unstructured adapted meshes», *Impact of computing in science and engineering*, vol. 4, 1992.
- [BOR 95] BOROUCHAKI H., GEORGE P., HECHT F., LAUG P. et E.SALTEL, «Mailleur bidimensionnel de Delaunay gouverné par une carte de métriques. Partie I: Algorithmes», Rapport de recherche, 1995, INRIA - Rocquencourt.
- [BOR 96] BORNEMANN F., ERDMANN B. et KORNHUBER R., «A posteriori error estimates for elliptic problems in two and three space dimensions», *SIAM Journal on Numerical Analysis*, vol. 33, 1996, p. 1188–1204.
- [FOR 96] FORTIN M., VALLET M., DOMPIERRE J., BOURGAULT Y. et HABASHI W., «Anisotropic mesh adaptation: theory, validation and applications», In *ECCOMAS*, John Wiley & Sons, 1996.
- [HAB 98] HABASHI W., DOMPIERRE J., BOURGAULT Y., FORTIN M. et VALLET M., «Certifiable computational fluid dynamics through mesh optimization», AIAA Journal, vol. 36, 1998, p. 703–711.
- [HÉT 91] HÉTU J. et PELLETIER D., «A fast adaptative finite element scheme for viscous incompressible flow», AIAA 10th Computational Fluid Dynamics Conference, Honoluulu, Hawaï, , 1991.
- [PER 87] PERAIRE J., VAHDATI M., MORGAN K. et ZIENKIEWICZ O., «Adaptive remeshing for compressible flows», *Journal of Computational Physic*, vol. 72, 1987, p. 449–466.
- [VAL 92] VALLET M., «Génération de maillages éléments finis anisotropes et adaptatifs», Thèse de doctorat, Université de Pierre et Marie Curie Paris VI, France, 1992.
- [VER 89] VERFÜRTH R., «A posteriori error estimators for the Stokes equations», *Nume-rische Mathematik*, vol. 55, 1989, p. 309–325.
- [VER 94] VERFÜRTH R., «A posteriori error estimators for nonlinear problems. Finite element discretizations of elliptic equations», *Mathematics of computation*, vol. 62, 1994, p. 445–475.
- [ZIE 86] ZIENKIEWICZ O. et CRAIG A., «Adaptative refinement, error estimates multigrid solutions and hierarchical finite methods concepts», In Accuracy estimates and adaptative refinement in finite element computations, John Wiley & Sons, New York, 1986, p. 25–59.
- [ZIE 88] ZIENKIEWICZ O., LIU Y. et HUANG G., «Error estimation and adaptativity in flow formulation for forming problems», *International Journal for Numerical Methods in Engi*neering, vol. 25, 1988, p. 203–235.
- [ZIE 92] ZIENKIEWICZ O. et ZHU J., «The superconvergence patch recovery and a posteriori error estimates. Part I: The recovery technique», *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, vol. 33, 1992, p. 1331–1364.