C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. I 355 (2017) 105–112

Contents lists available at ScienceDirect

C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. I

www.sciencedirect.com

Analyse numérique

Métrique et qualité d'un simplexe

Element metric

Paul-Louis George [a], Houman Borouchaki [b]

[a] *Inria, EPI Gamma3, Inria Saclay–Île de France, bât. Turing, 1, rue Honoré-d'Estienne-d'Orves, campus de l'École polytechnique, 91120 Palaiseau, France*
[b] *UTT et Inria, Équipe ICD–Gamma3, Université de technologie de Troyes, BP 2060, 10010 Troyes cedex, France*

INFO ARTICLE

Historique de l'article :
Reçu le 24 juin 2016
Accepté après révision le 24 novembre 2016
Disponible sur Internet le 7 décembre 2016

Présenté par le comité de rédaction

RÉSUMÉ

Ce papier introduit la notion de *métrique* liée à un élément géométrique simplicial (un simplexe). Cette métrique est utilisée dans la résolution par la méthode des éléments finis d'équations aux dérivées partielles, à la fois pour la génération de maillages et les estimateurs d'erreur basés sur l'erreur d'interpolation. En outre, cette métrique renseigne sur la géométrie de l'élément et, en particulier, sur sa qualité en forme dans un espace euclidien quelconque.

ABSTRACT

This paper introduces the notion of a *metric* for a simplex. Such a metric is a key ingredient when solving a PDE system by means of a Finite Element Method. Both mesh generation methods and error estimates (as far as interpolation error is considered) are concerned. Moreover, this metric gives information about the geometry of the corresponding element, typically about its shape quality in any Euclidean space.

Abridged English version

The metric of a simplex of $\mathbb{R}^d$ is a metric tensor (symmetric positive definite matrix) in which the element is unity (regular with unit edge lengths). This notion is related to the problem of interpolation error of a given field over a mesh. Let K be a simplex and let us denote by v_{ij} the vector joining vertex i and vertex j of K. The metric of K can be written as:

$$\mathcal{M} = \frac{d+1}{2}\Big(\sum_{i<j} v_{ij}\,{}^{t}v_{ij}\Big)^{-1},$$

where $v_{ij}\,{}^{t}v_{ij}$ is a $d \times d$ rank 1 matrix related to edge ij.

Adresses e-mail : paul-louis.george@inria.fr (P.-L. George), houman.borouchaki@utt.fr (H. Borouchaki).

http://dx.doi.org/10.1016/j.crma.2016.11.007

The metric of a simplex also characterizes the element shape. In particular, if it is the identity, the element is unity. Hence, to define the shape quality of an element, one can determine the gap of the element metric $\mathcal{M}$ and the identity using different measures based on the eigenvalues $\lambda_i = \frac{1}{h_i^2}$ of $\mathcal{M}$ or those of $\mathcal{M}^{-1}$, e.g., h_i^2. Notice that the metric $\mathcal{M}^{-1}$ is directly related to the geometry of the element (edge length, facet area, element volume). The first algebraic shape quality measure ranging from 0 to 1 is defined as the ratio of the geometric average of the eigenvalues of $\mathcal{M}^{-1}$ to their arithmetic average:

$$q(K) = \frac{\left(\prod_i h_i^2\right)^{\frac{1}{d}}}{\frac{1}{d}\sum_{i=1}^{d} h_i^2} = d\,\frac{\left(\det(\mathcal{M}^{-1})\right)^{\frac{1}{d}}}{\mathrm{tr}(\mathcal{M}^{-1})}.$$

As the geometric average is smaller than the arithmetic average, this measure is well defined. In addition, it is the algebraic reading of the well-known quality measure defined by:

$$q^{\frac{d}{2}}(K) = (d!)d^{\frac{d}{2}}(d+1)^{\frac{d-1}{2}}\,\frac{|K|}{\left(\sum_{i<j} l_{ij}^2\right)^{\frac{d}{2}}},$$

where the volume and the square of the edge lengths are involved. The algebraic meaning justifies the above geometric measure. The second algebraic shape quality measure is defined as the ratio of the harmonic average of the eigenvalues of $\mathcal{M}^{-1}$ and their arithmetic average (ranging also from 0 to 1):

$$q(K) = \frac{\left\{\frac{1}{d}\sum_{i=1}^{d}\frac{1}{h_i^2}\right\}^{-1}}{\frac{1}{d}\sum_{i=1}^{d} h_i^2} = \frac{d^2}{\mathrm{tr}(\mathcal{M})\mathrm{tr}(\mathcal{M}^{-1})}.$$

As above, this measure is well defined, the harmonic average being smaller the arithmetic one. From this measure, one can derive another well-known measure involving the roundness and the size of an element (measure which is widely used for convergence issues in finite element methods).

Note that these measures use the invariants of $\mathcal{M}^{-1}$ or $\mathcal{M}$ and thus can be evaluated from the coefficients of the characteristic polynomial of those matrices (avoiding the effective calculation of their eigenvalues). Another advantage of the above algebraic shape measures is their easy extensions in an arbitrary Euclidean space. Indeed, if $\mathcal{E}$ is the metric of such a space, the algebraic shape measures read:

$$q_{\mathcal{E}}(K) = d\,\frac{\left(\det(\mathcal{M}^{-1}\mathcal{E})\right)^{\frac{1}{d}}}{\mathrm{tr}(\mathcal{M}^{-1}\mathcal{E})} \quad , \quad q_{\mathcal{E}}(K) = \frac{d^2}{\mathrm{tr}(\mathcal{E}^{-1}\mathcal{M})\mathrm{tr}(\mathcal{M}^{-1}\mathcal{E})}.$$

1. Introduction

La métrique d'un élément est une métrique dans laquelle l'élément est régulier, avec des arêtes de longueur unité (on trouve une formulation similaire dans [5]). Cette notion est liée en particulier aux problèmes de génération de maillages unité ([3,6,11], etc.) et d'erreur d'interpolation d'un champ donné ([1,2,10], etc.). Dans cette note, on va développer le formalisme sous-jacent dans le cadre d'un élément géométrique simplicial (triangle, tétraèdre, simplexe de dimension quelconque) et décrire quelques propriétés liées. Ensuite, on va généraliser la notion de métrique d'un élément au cas des éléments simpliciaux de degré quelconque. Enfin, on introduit deux mesures de qualité algébrique d'un simplexe donné en se basant sur sa métrique dans un espace euclidien arbitraire. En outre, on va montrer que ces mesures de qualité algébrique représentent des réécritures matricielles des mesures géométriques classiques utilisées en particulier dans les questions de convergence des éléments finis [4] et d'optimisation de maillage [7–9], etc.

2. Métrique d'un simplexe

Un simplexe de dimension d et de forme quelconque étant donné, on va montrer qu'il existe une seule métrique dans laquelle il est équilatéral (ou régulier) et de taille unité (c'est-à-dire avec ses arêtes de longueur 1). Si $\mathcal{M}$ est une telle métrique, elle doit vérifier le système linéaire traduisant le fait que les arêtes de l'élément correspondant sont de longueur 1.

Désignons par v_{ij} le vecteur joignant le sommet i au sommet j de l'élément. Le système linéaire d'ordre $\frac{d(d+1)}{2}$ (nombre d'arêtes) en les coefficients de la métrique cherchée, est défini comme :

$$\left\{ {}^{\mathrm{t}}v_{ij}\mathcal{M}v_{ij} \;=\; 1 \quad \text{avec} \quad i<j \right. .$$

Plutôt que de résoudre explicitement ce système, [10], on va, en premier, rappeler quelques propriétés relatives aux arêtes d'un élément, puis en déduire une expression explicite de $\mathcal{M}$.

Par définition, $||v_{ij}||_{\mathcal{M}} = 1$. Ensuite, on montre que $\langle v_{ij}, v_{ik}\rangle_{\mathcal{M}} = \frac{1}{2}$; en effet :

$$\langle v_{jk}, v_{jk}\rangle_{\mathcal{M}} = \langle v_{ji}+v_{ik}, v_{ji}+v_{ik}\rangle_{\mathcal{M}} = \langle v_{ji}, v_{ji}\rangle_{\mathcal{M}} + 2\langle v_{ji}, v_{ik}\rangle_{\mathcal{M}} + \langle v_{ik}, v_{ik}\rangle_{\mathcal{M}}$$

donc $2\langle v_{ji}, v_{ik}\rangle_{\mathcal{M}} = -1$, soit $\langle v_{ij}, v_{ik}\rangle_{\mathcal{M}} = \frac{1}{2}$, résultat établi donc pour toutes les paires d'arêtes incidentes. Enfin, si $d>2$, on a aussi $\langle v_{ij}, v_{kl}\rangle_{\mathcal{M}} = 0$ pour tous les couples d'indices de ce type (ceux des arêtes opposées). La démonstration se fait comme ci-dessus, on part de $||v_{kl}||_{\mathcal{M}} = 1$ et on ouvre v_{kl} en $v_{kl} = v_{ki} + v_{ij} + v_{jl}$. On a alors :

$$\langle v_{kl}, v_{kl}\rangle_{\mathcal{M}} = \langle v_{ki}, v_{ki}\rangle_{\mathcal{M}} + \langle v_{ij}, v_{ij}\rangle_{\mathcal{M}} + \langle v_{jl}, v_{jl}\rangle_{\mathcal{M}} + 2\langle v_{ki}, v_{ij}\rangle_{\mathcal{M}} + 2\langle v_{ki}, v_{jl}\rangle_{\mathcal{M}} + 2\langle v_{ij}, v_{jl}\rangle_{\mathcal{M}},$$

soit $1 = 3 + 2(-\frac{1}{2}) + 2\langle v_{ki}, v_{jl}\rangle_{\mathcal{M}} + 2(-\frac{1}{2})$, donc $2\langle v_{ki}, v_{jl}\rangle_{\mathcal{M}} = 0$, soit le résultat pour toutes les paires d'arêtes opposées.

On introduit, *a priori*, la matrice $\mathcal{N} = \sum_{i<j} v_{ij}{}^{\mathrm{t}}v_{ij}$, qui est une somme de $\frac{d(d+1)}{2}$ matrices de rang un. Cette matrice est définie positive. En effet, soit u un vecteur quelconque, on a :

$${}^{\mathrm{t}}u\mathcal{N}u = \sum_{i<j} {}^{\mathrm{t}}u\, v_{ij}{}^{\mathrm{t}}v_{ij}\, u = \sum_{i<j} ||{}^{\mathrm{t}}v_{ij}u||^2 \geq 0.$$

Cette somme est nulle si et seulement si, pour tout $i<j$, ${}^{\mathrm{t}}v_{ij}u = 0$, autrement dit, u doit être orthogonal à toutes les arêtes. Comme les vecteurs arêtes engendrent l'espace de dimension d, cela implique que $u = 0$. Donc la matrice $\mathcal{N}$ est inversible.

On va montrer maintenant que la matrice $\mathcal{N}\mathcal{M}$ est une homothétie. Pour ce faire, on va calculer $\mathcal{N}\mathcal{M}v_{kl}$ pour les $\frac{d(d+1)}{2}$ arêtes v_{kl} (avec $k<l$) de l'élément. Soit :

$$\left\{\sum_{i<j} v_{ij}{}^{\mathrm{t}}v_{ij}\right\}\mathcal{M}v_{kl} = \sum_{i<j} v_{ij}\left\{{}^{\mathrm{t}}v_{ij}\mathcal{M}v_{kl}\right\}.$$

Dans cette somme, les seuls termes non nuls sont ceux pour lesquels $i=k$ ou $i=l$ ou $j=k$ ou $j=l$, donc :

$$v_{kl}\left\{{}^{\mathrm{t}}v_{kl}\mathcal{M}v_{kl}\right\} + \sum_{j>k,\, j\neq l} v_{kj}\left\{{}^{\mathrm{t}}v_{kj}\mathcal{M}v_{kl}\right\} + \sum_{j>l} v_{lj}\left\{{}^{\mathrm{t}}v_{lj}\mathcal{M}v_{kl}\right\} + \sum_{i<k} v_{ik}\left\{{}^{\mathrm{t}}v_{ik}\mathcal{M}v_{kl}\right\} + \sum_{i<l,\, i\neq k} v_{il}\left\{{}^{\mathrm{t}}v_{il}\mathcal{M}v_{kl}\right\},$$

soit :

$$v_{kl} + \frac{1}{2}\sum_{j>k,\, j\neq l} v_{kj} - \frac{1}{2}\sum_{j>l} v_{lj} - \frac{1}{2}\sum_{i<k} v_{ik} + \frac{1}{2}\sum_{i<l,\, i\neq k} v_{il},$$

qui s'écrit également comme :

$$v_{kl} + \frac{1}{2}\sum_{j=k+1}^{l-1} v_{kj} + \frac{1}{2}\sum_{j=l+1}^{d+1} v_{kj} - \frac{1}{2}\sum_{j=l+1}^{d+1} v_{lj} - \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{k-1} v_{ik} + \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{k-1} v_{il} + \frac{1}{2}\sum_{i=k+1}^{l-1} v_{il},$$

qui se regroupe en :

$$v_{kl} + \frac{1}{2}\sum_{j=k+1}^{l-1} v_{kl} + \frac{1}{2}\sum_{j=l+1}^{d+1} v_{kl} + \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{k-1} v_{kl} = v_{kl} + \frac{1}{2}\sum_{j=1,\, j\neq k,\, j\neq l}^{d+1} v_{kl} = \frac{d+1}{2}v_{kl}.$$

On en déduit que $\mathcal{N}\mathcal{M} = \frac{d+1}{2}\mathcal{I}$ et, ainsi :

$$\mathcal{M} = \frac{d+1}{2}\Big(\sum_{i<j} v_{ij}{}^{\mathrm{t}}v_{ij}\Big)^{-1}. \tag{1}$$

Remarquons qu'il existe une infinité de métriques dans lesquelles un élément quelconque est régulier. Ces métriques sont proportionnelles à celle définie ci-dessus qui, quant à elle, avec la contrainte unité, est unique.

Inversement, étant donné une métrique $\mathcal{M}$ dans $\mathbb{R}^2$ ou $\mathbb{R}^3$, il existe une *infinité* d'éléments réguliers dans cette métrique ($\mathcal{M}$ est la métrique de tous ces éléments).

2.1. *Triangles associés à une métrique $\mathcal{M}$*

Considérons un triangle $[OMP]$ dans $\mathbb{R}^2$ tel que $||\overrightarrow{OM}||_{\mathcal{M}} = 1$; il existe un seul point P de la boule unité de centre O ($||\overrightarrow{OP}||_{\mathcal{M}} = 1$) tel que $||\overrightarrow{PM}||_{\mathcal{M}} = 1$ ou, en d'autres termes, $\mathcal{M}$ est la métrique de $[OMP]$. En faisant varier M sur la boule unité (l'ellipse) de centre O, on a tous les éléments de métrique $\mathcal{M}$. Parmi ces éléments, on en trouve quatre dont l'arête $[OM]$ est dans l'une des deux directions propres (ou principales) de la métrique. Ces éléments particuliers sont *isocèles* dans la métrique usuelle ; on dit qu'ils sont *alignés* avec la métrique.

Notons que tous les triangles de métrique $\mathcal{M}$ ont la *même aire*. En effet, si K désigne un élément, on a $|K|_{\mathcal{M}} = \sqrt{\det(\mathcal{M})}|K|$, donc, comme par définition $|K|_{\mathcal{M}} = \frac{\sqrt{3}}{4}$, une constante, on a $|K| = \frac{|K|_{\mathcal{M}}}{\sqrt{\det(\mathcal{M})}}$, qui, ainsi, est une constante. De même, la *somme des carrés des longueurs des arêtes* (v_{ij}) est une constante. On part de la relation (1) avec $d = 2$, soit

$$\mathcal{M} = \frac{3}{2}\Big(\sum_{i<j} v_{ij}{}^{t}v_{ij}\Big)^{-1} \quad \text{donc} \quad \sum_{i<j} v_{ij}{}^{t}v_{ij} = \frac{3}{2}\mathcal{M}^{-1}.$$

La trace de la matrice $\sum_{i<j} v_{ij}{}^{t}v_{ij}$ est la somme des carrés des longueurs des arêtes de K, ou encore :

$$\sum_{i<j} l_{ij}^2 = \sum_{i<j} {}^{t}v_{ij}v_{ij} = \frac{3}{2}\mathrm{tr}(\mathcal{M}^{-1}) = \frac{3}{2}\frac{\mathrm{tr}(\mathcal{M})}{\det(\mathcal{M})}, \tag{2}$$

où l_{ij} est la longueur de l'arête v_{ij}.

2.2. *Tétraèdres associés à une métrique $\mathcal{M}$*

Considérons un tétraèdre $[OMPQ]$, tel que $||\overrightarrow{OM}||_{\mathcal{M}} = 1$; il existe une infinité de points P de la boule unité de centre O ($||\overrightarrow{OP}||_{\mathcal{M}} = 1$) tel que $||\overrightarrow{PM}||_{\mathcal{M}} = 1$. De même, pour un P fixé, il existe un seul point Q tel que $||\overrightarrow{OQ}||_{\mathcal{M}} = ||\overrightarrow{MQ}||_{\mathcal{M}} = ||\overrightarrow{PQ}||_{\mathcal{M}} = 1$ ou, en d'autres termes, $\mathcal{M}$ est la métrique de $[OMPQ]$. En faisant varier M et P sur la boule unité de centre O, on a tous les éléments de métrique $\mathcal{M}$. Parmi ces éléments, on en trouve six dont l'arête $[OM]$ est dans l'une des trois directions propres de la métrique, tandis que la face $[OMP]$ est portée par un plan principal.

Les tétraèdres de métrique $\mathcal{M}$ ont le même volume et la même *somme des carrés des longueurs des arêtes*. En effet, ces quantités, comme dans le cas du triangle, s'écrivent en fonction des invariants de $\mathcal{M}$ ou $\mathcal{M}^{-1}$.

3. Qualité en forme et métrique d'élément

Dans cette section, on va définir plusieurs expressions de la qualité en forme d'un simplexe à partir de sa métrique. Ces définitions étant de nature algébrique (à partir de la matrice associée à une métrique), on va aussi montrer leurs réécritures avec une interprétation géométrique et trouver ainsi une nouvelle mesure tout en retrouvant (et justifiant) deux des mesures classiques de qualité utilisées couramment pour l'optimisation des maillages.

On considère les deux invariants (le déterminant et la trace) liés à la matrice $\mathcal{M}^{-1}$, où $\mathcal{M}$ désigne la métrique d'un simplexe K, et on va les exprimer en fonction de la géométrie de K. On va alors définir la qualité en forme de K à partir de ces invariants.

En premier, on a :

$$|K|_{\mathcal{M}} = \sqrt{\det(\mathcal{M})}|K|,$$

où $|K|_{\mathcal{M}}$ représente le volume de K dans la métrique $\mathcal{M}$ est le volume d'un élément régulier unitaire (d'arêtes de longueur 1) défini par $|K|_{\mathcal{M}} = \frac{(d+1)^{\frac{1}{2}}}{2^{\frac{d}{2}} d!}$. On en déduit que :

$$|K| = \frac{(d+1)^{\frac{1}{2}}}{2^{\frac{d}{2}} d!}\left(\det(\mathcal{M}^{-1})\right)^{\frac{1}{2}} \quad \text{ou} \quad \det(\mathcal{M}^{-1}) = \frac{2^d (d!)^2}{d+1}|K|^2.$$

Dans cette expression, $\det(\mathcal{M}^{-1})$ est un invariant représentant le produit des valeurs propres de $\mathcal{M}^{-1}$. Si on désigne les valeurs propres de $\mathcal{M}$ par λ_i, alors les valeurs propres de $\mathcal{M}^{-1}$ sont les h_i^2, où $h_i = \frac{1}{\sqrt{\lambda_i}}$ est la taille prescrite par la métrique $\mathcal{M}$. La relation ci-dessus s'écrit également :

$$\left(\prod_i h_i^2\right)^{\frac{1}{d}} = \frac{2(d!)^{\frac{2}{d}}}{(d+1)^{\frac{1}{d}}}|K|^{\frac{2}{d}},$$

donnant l'expression de la moyenne géométrique des h_i^2 en fonction du volume de K.

En second, si l_{ij} désigne la longueur de l'arête ij de K, on a :

$$\sum_{i<j} l_{ij}^2 = \frac{d+1}{2} \mathrm{tr}(\mathcal{M}^{-1}) \quad \text{ou encore} \quad \mathrm{tr}(\mathcal{M}^{-1}) = \frac{2}{d+1} \sum_{i<j} l_{ij}^2,$$

qui s'écrit comme :

$$\sum_i h_i^2 = \frac{2}{d+1} \sum_{i<j} l_{ij}^2 \quad \text{donc, en moyenne, on a} \quad \frac{1}{d} \sum_i h_i^2 = \frac{2}{d(d+1)} \sum_{i<j} l_{ij}^2,$$

donnant ainsi l'expression de la moyenne arithmétique des h_i^2 en fonction de la longueur des arêtes de K.

On définit la qualité en forme de K dans la métrique usuelle comme le quotient de la moyenne géométrique et de la moyenne arithmétique des h_i^2, soit :

$$q(K) = \frac{\left(\prod_i h_i^2\right)^{\frac{1}{d}}}{\frac{1}{d} \sum_{i=1}^{d} h_i^2} = d \, \frac{\left(\det(\mathcal{M}^{-1})\right)^{\frac{1}{d}}}{\mathrm{tr}(\mathcal{M}^{-1})}. \tag{3}$$

Cette mesure de qualité dépend des deux invariants, trace et déterminant de $\mathcal{M}^{-1}$ et peut donc s'exprimer en fonction des coefficients du polynôme caractéristique de $\mathcal{M}^{-1}$, évitant ainsi le calcul de ses valeurs propres. Par définition, ce critère de qualité est adimensionné. Comme la moyenne géométrique est plus petite que la moyenne arithmétique, $0 \leq q(K) \leq 1$. L'égalité de ces deux moyennes est obtenue si tous les h_i sont égaux, ce qui veut dire que K est régulier. Par ailleurs, ce critère permet de quantifier l'irrégularité de K via son anisotropie. Comme les deux moyennes dépendent de la géométrie de K, on va réexprimer ce critère de qualité en fonction de cette géométrie (ici les arêtes et le volume de K). On a donc :

$$q(K) = (d!)^{\frac{2}{d}} d(d+1)^{\frac{d-1}{d}} \frac{|K|^{\frac{2}{d}}}{\sum_{i<j} l_{ij}^2},$$

critère qui s'écrit comme le quotient d'une puissance du volume et de la somme des carrés de la longueur des arêtes. Pour éviter le calcul d'une puissance fractionnelle (surtout en petite dimension, $d = 2$ ou 3), on considère comme critère de qualité la puissance $\frac{d}{2}$ de q, c'est-à-dire :

$$q^{\frac{d}{2}}(K) = d^{\frac{d}{2}} \frac{\left(\det(\mathcal{M}^{-1})\right)^{\frac{1}{2}}}{\left(\mathrm{tr}(\mathcal{M}^{-1})\right)^{\frac{d}{2}}} = (d!) d^{\frac{d}{2}} (d+1)^{\frac{d-1}{2}} \frac{|K|}{\left(\sum_{i<j} l_{ij}^2\right)^{\frac{d}{2}}}.$$

Ainsi pour $d = 2$ et 3, on obtient :

$$q(K) = 4\sqrt{3} \frac{|K|}{l_{12}^2 + l_{13}^2 + l_{23}^2} \quad \text{et} \quad q(K) \equiv q^{\frac{3}{2}}(K) = 72\sqrt{3} \frac{|K|}{\left(l_{12}^2 + l_{13}^2 + l_{14}^2 + l_{23}^2 + l_{24}^2 + l_{34}^2\right)^{\frac{3}{2}}},$$

qui sont des critères classiques de qualité que l'on trouve dans la littérature.

Nous allons introduire une nouvelle mesure de qualité dans le cas d'un tétraèdre ($d = 3$, le cas du triangle étant trivial) et en déduire la mesure de qualité définie par le quotient de la rondeur et de la taille d'élément, mesure utilisée à la fois dans les théorèmes de convergence de la méthode des éléments finis et à des fins d'optimisation de maillages.

On considère le troisième invariant de la matrice $\mathcal{M}^{-1} = \frac{2}{d+1} \mathcal{N}$, de valeurs propres h_i^2, à savoir $\sum_{i<j} h_i^2 h_j^2$.

On définit maintenant une nouvelle mesure de la qualité en forme de K dans la métrique usuelle comme le quotient de la moyenne harmonique et de la moyenne arithmétique des h_i^2, soit :

$$q(K) = \frac{\left\{\frac{1}{d} \sum_{i=1}^{d} \frac{1}{h_i^2}\right\}^{-1}}{\frac{1}{d} \sum_{i=1}^{d} h_i^2} = \frac{d^2}{\mathrm{tr}(\mathcal{M})\, \mathrm{tr}(\mathcal{M}^{-1})}. \tag{4}$$

Remarquons que cette qualité fait intervenir trois invariants (incluant la trace et le déterminant) de la matrice $\mathcal{M}^{-1}$:

$$q(K) = d^2 \frac{\prod_{i=1}^{d} h_i^2}{\displaystyle\sum_{i=1}^{d} h_i^2 \sum_{i=1}^{d} \left(\prod_{j,\, j \neq i} h_j^2 \right)}.$$

Ainsi, elle peut s'exprimer en fonction des coefficients du polynôme caractéristique de $\mathcal{M}^{-1}$, évitant aussi le calcul de ses valeurs propres. Dans la suite, on va donner l'expression de cette mesure en fonction de la géométrie de l'élément dans les cas $d = 2$ et $d = 3$.

En deux dimensions, $q(K) = 4 \dfrac{h_1^2 h_2^2}{(h_1^2 + h_2^2)^2}$. Cette mesure représente le carré de la mesure impliquant la moyenne géométrique (comme vu plus haut) et, par suite, n'est pas plus informative. Cependant, en utilisant cette mesure ou la précédente, et via une majoration du dénominateur, on peut retrouver une mesure classique de qualité, celle qui implique la rondeur et la taille. Cette mesure s'écrit, en fonction de la géométrie de l'élément, comme :

$$q(K) = 12 \left\{ \frac{2|K|}{\displaystyle\sum_i l_i^2} \right\}^2 .$$

On considère la majoration du dénominateur par $l_{\max}(\sum_i l_i)$ où $l_{\max} = \max_i l_i$ puis on prend la racine carrée de l'ensemble et on obtient la mesure non normalisée (à cause de la majoration du dénominateur) :

$$4\sqrt{3} \frac{2|K|}{l_{\max} \displaystyle\sum_i l_i} = 4\sqrt{3} \frac{\rho(K)}{l_{\max}},$$

où $\rho(K) = 2 \frac{|K|}{\sum_i l_i}$ est le rayon du cercle inscrit. Le coefficient de normalisation à 1 est fixé à partir de la mesure de la qualité du triangle équilatéral unité et, au final, on trouve $q(K) = 2\sqrt{3} \dfrac{\rho(K)}{l_{\max}}$.

En trois dimensions, $q(K) = 9 \dfrac{\prod_i h_i^2}{\sum_i h_i^2 \sum_{i<j} h_i^2 h_j^2}$. On note S_i le vecteur dirigé suivant la normale orientée de la face i de l'élément K (par exemple vers l'intérieur), dont la norme est le double de l'aire de cette face. En analysant le polynôme caractéristique de $\mathcal{M}^{-1}$, on peut montrer que l'invariant est de la forme :

$$\sum_{i<j} h_i^2 h_j^2 = \frac{9}{8} \sum_i ||S_i||^2 - \frac{1}{4} \sum_{i<j} \langle S_i, S_j \rangle .$$

Par ailleurs, $\prod_i h_i^2 = \det(\mathcal{M}^{-1}) = 72|K|^2$ et $\sum_i h_i^2 = \mathrm{tr}(\mathcal{M}^{-1}) = \frac{1}{2} \sum_i l_i^2$. On en déduit que la qualité s'écrit en fonction de la géométrie de l'élément (arêtes, faces et volume) comme :

$$q(K) = \frac{72^2 \, |K|^2}{\displaystyle\sum_i l_i^2 \left\{ \frac{9}{2} \sum_i ||S_i||^2 - \sum_{i<j} \langle S_i, S_j \rangle \right\}} .$$

Contrairement au cas $d = 2$, cette relation est une nouvelle mesure, qui ne peut s'exprimer en fonction de la mesure impliquant la moyenne géométrique.[1]

À partir de cette formule, on va retrouver la mesure classique de la qualité faisant intervenir la taille et la rondeur de l'élément (donc, ici, son diamètre et le rayon de sa sphère inscrite) en majorant les deux termes du dénominateur.[2] En premier, comme $2|\langle S_i, S_j \rangle| \leq ||S_i||^2 + ||S_j||^2$, on a :

[1] Cela était prévisible car, en deux dimensions, il n'y a que deux invariants pour la matrice alors qu'en trois dimensions, il y en a trois.

[2] En observant que ceci garantit que le numérateur reste inférieur au dénominateur.

$$\frac{9}{2}\sum_i ||S_i||^2 - \sum_{i<j}\langle S_i, S_j\rangle \leq 6\sum_i ||S_i||^2 \leq 6\left(\sum_i ||S_i||\right)^2 .$$

Ensuite, $\sum_i l_i^2 \leq 6 l_{\max}^2$, où $l_{\max} = \max_i l_i$ est le diamètre de K. En considérant ces deux majorations, on obtient l'expression :

$$4^2 \left\{ \frac{3|K|}{l_{\max}\sum_i ||S_i||} \right\}^2 ,$$

et en considérant sa racine carrée, on obtient une mesure de qualité non normalisée (à cause des majorations) :

$$q(K) = 4\frac{3|K|}{l_{\max}\sum_i ||S_i||} = 4\frac{\rho(K)}{l_{\max}}, \tag{5}$$

où $\rho(K) = 3\frac{|K|}{\sum_i ||S_i||}$ est le rayon de la sphère inscrite. Le coefficient de normalisation à 1 est fixé à partir de la mesure de la qualité du tétraèdre regulier unité et, au final, on trouve $q(K) = 2\sqrt{6}\,\frac{\rho(K)}{l_{\max}}$.

Notons que, comme la moyenne harmonique est plus petite que la moyenne géométrique, la deuxiéme mesure de qualité est plus discriminante que la première. Par conséquent, la mesure classique, fonction de la taille et de la rondeur, est *a fortiori* encore plus discriminante comparée aux autres.

Les mesures de qualité introduites plus haut permettent de quantifier la qualité en forme d'un élément dans l'espace muni de la métrique usuelle à partir de la métrique de cet élément même, métrique qui le caractérise géométriquement. Si l'espace est maintenant muni de la métrique de l'élément, alors, par exemple, si on regarde la relation (3), chaque h_i vaut 1 et on trouve $q_{\mathcal{M}}(K) = 1$, où l'indice de q précise la métrique de l'espace. Cette égalité reflète aussi le fait que $\mathcal{M}$ est la métrique de l'élément.

On suppose maintenant que l'espace est muni d'une métrique, $\mathcal{E}$. Si on défait l'espace avec la métrique $\mathcal{M}$ de l'élément, K devient régulier dans la métrique usuelle (c'est-à-dire $\mathcal{I}$). Si on défait à nouveau l'espace avec la métrique $\mathcal{E}^{-1}$, on trouve l'élément dans l'espace muni de $\mathcal{E}$. On généralise ainsi les deux mesures algébriques de qualité dans l'espace muni d'une métrique $\mathcal{E}$. Pour la mesure de la relation (3), il vient :

$$q_{\mathcal{E}}(K) = d\,\frac{\left(\det((\mathcal{E}^{-1}\mathcal{M})^{-1})\right)^{\frac{1}{d}}}{\mathrm{tr}((\mathcal{E}^{-1}\mathcal{M})^{-1})} = d\,\frac{\left(\det(\mathcal{M}^{-1}\mathcal{E})\right)^{\frac{1}{d}}}{\mathrm{tr}(\mathcal{M}^{-1}\mathcal{E})},$$

ou encore, en fonction de la géométrie de l'élément :

$$q_{\mathcal{E}}^{\frac{d}{2}}(K) = d^{\frac{d}{2}}\,\frac{\left(\det(\mathcal{M}^{-1}\mathcal{E})\right)^{\frac{1}{2}}}{\left(\mathrm{tr}(\mathcal{M}^{-1}\mathcal{E})\right)^{\frac{d}{2}}} = (d!)d^{\frac{d}{2}}(d+1)^{\frac{d-1}{2}}\,\frac{|K|_{\mathcal{E}}}{\left(\sum_{i<j}(l_{ij})_{\mathcal{E}}^2\right)^{\frac{d}{2}}},$$

car $|K|_{\mathcal{E}} = (\det(\mathcal{E}))^{\frac{1}{2}}\,|K|$ et, comme il est facile de voir, $\mathrm{tr}(\mathcal{M}^{-1}\mathcal{E}) = \mathrm{tr}(\mathcal{E}\mathcal{M}^{-1})$, donc représente la somme des carrés de la longueur des arêtes dans la métrique $\mathcal{E}$, soit :

$$\sum_{i<j} {}^{\mathrm{t}}v_{ij}\mathcal{E}v_{ij} = \mathrm{tr}(\mathcal{E}\sum_{i<j} v_{ij}{}^{\mathrm{t}}v_{ij}).$$

Pour la mesure de la relation (4), il vient :

$$q_{\mathcal{E}}(K) = \frac{d^2}{\mathrm{tr}(\mathcal{E}^{-1}\mathcal{M})\mathrm{tr}((\mathcal{E}^{-1}\mathcal{M})^{-1})} = \frac{d^2}{\mathrm{tr}(\mathcal{E}^{-1}\mathcal{M})\mathrm{tr}(\mathcal{M}^{-1}\mathcal{E})}.$$

On peut aussi considérer une troisième mesure définie par le quotient de la moyenne harmonique et la moyenne géométrique. Cependant, cette mesure est moins sensible que les précédentes. Par ailleurs, en considérant les termes h_i (au lieu de h_i^2), on obtient d'autres mesures algébriques de qualité :

$$q(K) = \frac{\left(\prod_i h_i\right)^{\frac{1}{d}}}{\frac{1}{d}\sum_{i=1}^{d} h_i} = d\,\frac{\left(\det(\mathcal{M}^{-\frac{1}{2}})\right)^{\frac{1}{d}}}{\mathrm{tr}(\mathcal{M}^{-\frac{1}{2}})} \quad \text{et} \quad q(K) = \frac{\left\{\frac{1}{d}\sum_{i=1}^{d}\frac{1}{h_i}\right\}^{-1}}{\frac{1}{d}\sum_{i=1}^{d} h_i} = \frac{d^2}{\mathrm{tr}(\mathcal{M}^{\frac{1}{2}})\mathrm{tr}(\mathcal{M}^{-\frac{1}{2}})},$$

qui permettent aussi de quantifier l'irrégularité de l'élément dans la métrique usuelle. Toutefois, ces mesures sont plus coûteuses à évaluer.

Les mesures algébriques de qualité basées sur la métrique de l'élément montre une première utilisation de cette notion et une autre manière d'exprimer la qualité en forme d'un élément. Cette notion est également à la base de la construction d'estimateurs d'erreur basés sur l'erreur d'interpolation et fera l'objet d'une suite naturelle de ce travail.

Références

[1] M. Berzins, A solution-based triangular and tetrahedral mesh quality indicator, SIAM J. Sci. Comput. 19 (6) (1998) 2051–2060.

[2] H. Borouchaki, D. Chapelle, P.L. George, P. Laug, P. Frey, Estimateur d'erreur géométrique et adaptation, in : Maillage et adaptation, Traité « Mécanique et ingénierie des matériaux », Hermès-Lavoisier, Paris, 2001 (in French).

[3] H. Borouchaki, P.L. George, F. Hecht, P. Laug, E. Saltel, Delaunay mesh generation governed by metric specifications. Part I : Algorithms, Finite Elem. Anal. Des. 25 (1–2) (1997) 61–83.

[4] P.G. Ciarlet, Basic error estimates for elliptic problems, in : P.G. Ciarlet, J.L. Lions (Eds.), Handbook of Numerical Analysis, vol. II, North Holland, Amsterdam, 1991, pp. 17–352.

[5] L. Freitag, P. Knupp, Tetrahedral element shape optimization via the Jacobian determinant and condition number, in : Proc. 8th International Meshing Roundtable, 1999, pp. 247–258.

[6] P.L. George, F. Hecht, M.G. Vallet, Creation of internal points in Voronoi's type method, control et adaptation, Adv. Eng. Softw. 13 (5–6) (1991) 303–313.

[7] P. Knupp, Label-invariant mesh quality metrics, in : Proc. 18th International Meshing Roundtable, Springer-Verlag, 2009, pp. 139–155.

[8] P. Labbé, J. Dompierre, F. Guibault, R. Camarero, Critère de qualité, in : Maillage et adaptation, Traité « Mécanique et ingénierie des matériaux », Hermès-Lavoisier, Paris, 2001 (in French).

[9] S.H. Lo, Finite Element Mesh Generation, CRC Press, Boca Raton, FL, USA, 2015.

[10] A. Loseille, Adaptation de maillage anisotrope 3D multi-échelles et ciblée à une fonctionnelle pour la mécanique des fluides. Application à la prédiction haute-fidélité du bang sonique. Thèse, Université Pierre-et-Marie-Curie, Paris-6, 2008.

[11] J. Peraire, M. Vahdati, K. Morgan, O.C. Zienkiewicz, Adaptive remeshing for compressible flow computations, J. Comput. Phys. 72 (1987) 449–466.