



## Sur les éléments finis hexaédriques de degré 1 et 2

Paul-Louis George, Borouchaki Homan

► **To cite this version:**

Paul-Louis George, Borouchaki Homan. Sur les éléments finis hexaédriques de degré 1 et 2. [Rapport de recherche] RR-8039, INRIA. 2012, pp.37. <hal-00722512>

**HAL Id: hal-00722512**

**<https://hal.inria.fr/hal-00722512>**

Submitted on 2 Aug 2012

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

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



# Sur les éléments finis hexaédriques de degré 1 et 2

Paul Louis George, Houman Borouchaki

**RESEARCH  
REPORT**

**N° 8039**

Août 2012

Project-Team Gamma3





## Sur les éléments finis hexaédriques de degré 1 et 2

Paul Louis George\*, Houman Borouchaki†

Équipe-Projet Gamma3

Rapport de recherche n° 8039 — Août 2012 — 37 pages

**Résumé :** Ce rapport fait suite aux papiers discutant des éléments finis triangulaires ou quadrilatéraux de Lagrange de degré 2. Ici, on regarde le cas d'un élément fini de Lagrange hexaédrique de degré 2 à 27 nœuds et à 20 nœuds. Néanmoins on revient également sur le cas de l'hexaèdre de degré 1 à 8 nœuds. Quelques surprises sont mises en évidence sur ces différents éléments. On discute aussi de ce que pourrait être une définition abstraite de la notion de qualité pour de tels éléments.

**Mots-clés :** Hexaèdre Q1. Hexaèdre à 8 nœuds. Hexaèdre Q2. Hexaèdre à 27 nœuds. Hexaèdre à 20 nœuds Éléments Finis Q1 et Q2. Courbe de Bézier. Hexaèdre de Bézier.

---

\* INRIA, Équipe-projet Gamma3, Domaine de Voluceau, Rocquencourt, BP 105, 78153 Le Chesnay Cedex, France. email: paul-louis.george@inria.fr

† UTT et INRIA, Équipe ICD-Gamma3, Université de Technologie de Troyes, BP 2060, 10010 Troyes Cedex, France. email: houman.borouchaki@utt.fr ou @inria.fr

**RESEARCH CENTRE  
PARIS – ROCQUENCOURT**

Domaine de Voluceau, - Rocquencourt  
B.P. 105 - 78153 Le Chesnay Cedex

## Lagrange hexahedra of degree 1 and 2

**Abstract:** Following our previous reports related to Lagrange triangles and quadrilaterals of degree 2, we consider the case of a Lagrange hex finite element of degree 2. By the way, we also return to the hex of degree 1. A couple of surprising things appear. We also discuss the notion of a quality of such elements.

**Key-words:** Q1 hex. 8-node hex Q2 hex. 27-node hex. 20-node hex Q1 mesh. Q2 mesh. Q1 finite element. Q2 finite element. Bézier curve. Bézier hex.

## Table des matières

<b>1</b>	<b>Introduction</b>	<b>3</b>
<b>2</b>	<b>Courbe de Bézier de degré 2</b>	<b>4</b>
2.1	La courbe . . . . .	4
2.2	La tangente . . . . .	5
<b>3</b>	<b>Carreaux de Bézier</b>	<b>5</b>
3.1	Carreau de degré 1x1x1 . . . . .	5
3.2	Carreau de degré 2x2x2 . . . . .	6
<b>4</b>	<b>Élément fini hexaédrique de degré 1, le Q1 à 8 nœuds</b>	<b>6</b>
4.1	Dérivées, jacobien et condition de validité . . . . .	6
4.2	Le jacobien vu par Bézier . . . . .	13
4.3	En pratique . . . . .	20
4.4	Sur la transformation inverse . . . . .	20
<b>5</b>	<b>Élément fini hexaédrique de degré 2, le Q2 à 27 nœuds</b>	<b>21</b>
5.1	Les dérivées et le jacobien . . . . .	23
5.2	Quelques jacobiens particuliers . . . . .	24
5.3	Le jacobien et ses coefficients de contrôle . . . . .	26
5.4	En pratique . . . . .	28
<b>6</b>	<b>Élément fini hexaédrique de degré 2, le Q2 à 20 nœuds</b>	<b>28</b>
6.1	Construction de cet élément fini . . . . .	29
6.2	En pratique . . . . .	33
<b>7</b>	<b>Vers une définition de la qualité d'un élément</b>	<b>33</b>
<b>8</b>	<b>Conclusion</b>	<b>34</b>

## 1 Introduction

On poursuit ici l'étude<sup>1</sup> des éléments finis usuels de degré 1 et 2 en considérant le cas d'un hexaèdre. La question que nous regardons concerne la validité de cet élément au sens de la positivité de son jacobien (hors de toute considération sur la qualité, notion, d'ailleurs, à définir).

La validité étant établie, on discute de ce que pourrait être une définition de la notion de qualité géométrique de ces éléments.

En vue de l'étude des éléments de degré 2, on revient sur les courbes et les carreaux de Bézier dans les deux premières sections. On verra néanmoins que, même au degré 1, ce point de vue facilite la discussion.

Une section regarde le cas des hexaèdres de degré 1. On montre que même le cas d'éléments à faces planes ne conduit pas à une condition nécessaire et suffisante de validité.

Ensuite on discute de l'hexaèdre complet de degré 2 à 27 nœuds. La vision Bézier nous donne une condition suffisante de validité. L'élément réduit à 20 nœuds est alors discuté en montrant comment il peut être construit au moyen d'une interpolation transfinie. La discussion sur sa validité conduit à deux voies, une étude directe de sa forme (incomplète) de Bézier, comme pour le quadrilatère plan réduit à 8 nœuds ou une analogie avec le cas à 27 nœuds en "inventant" les nœuds manquants.

La dernière section propose une définition de ce que pourrait être la qualité géométrique des éléments hexaédriques de degré 1 et 2.

<sup>1</sup>Ce travail rentre dans le cadre du ILab INRIA-Distène.

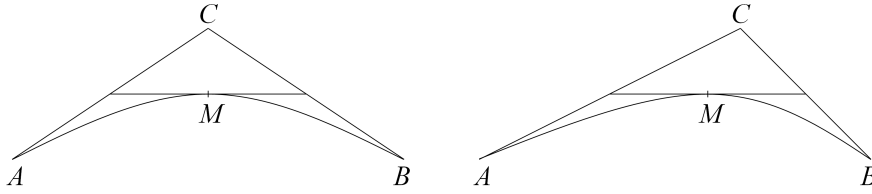


FIG. 1 – La courbe  $AB$  avec ses trois points de contrôle  $A$ ,  $B$  et  $C$  et son milieu  $M$ . Deux positions de  $C$ , pour  $A$  et  $B$  fixés, donnent deux courbes différentes.

## 2 Courbe de Bézier de degré 2

Les points de contrôle introduits dans la suite sont dans  $\mathbb{R}^3$ .

### 2.1 La courbe

On se donne trois points de contrôle,  $P_0$ ,  $P_1$  et  $P_2$  et un paramètre  $t$  variant dans  $[0, 1]$ . On définit la courbe  $\Gamma$  par la fonction  $\gamma$  suivante :

$$\gamma(t) = (1-t)^2 P_0 + 2t(1-t)P_1 + t^2 P_2, \quad t \in [0, 1]. \quad (1)$$

Cette courbe passe par  $P_0$  et  $P_2$ . Le point  $\gamma(\frac{1}{2})$  est appelé *milieu* de la courbe.

En vue de la construction des éléments finis P2, on va utiliser ces courbes pour définir les arêtes des éléments. Soit maintenant  $AB$  un segment et  $C$  un point quelconque pour l'instant. On définit une arête comme le lieu des points  $P(t)$ ,  $t \in [0, 1]$  correspondant à la courbe  $\Gamma$  et la fonction  $\gamma$  ci-dessus dans laquelle on fixe  $P_0 = A$ ,  $P_1 = C$  et  $P_2 = B$ . Donc

$$P(t) = (1-t)^2 A + 2t(1-t)C + t^2 B, \quad t \in [0, 1], \quad (2)$$

le milieu, correspondant par définition à  $t = \frac{1}{2}$ , vaut

$$M = P\left(\frac{1}{2}\right) = \frac{A + B + 2C}{4}, \quad (3)$$

le point  $M$  est donc le milieu des milieux respectifs de  $AC$  et de  $BC$ . Inversement, on a

$$C = \frac{4M - A - B}{2}. \quad (4)$$

Dès lors que  $C$  n'est pas aligné avec  $A$  et  $B$ , l'arête est courbe, en cas contraire l'arête reste droite et on impose que  $C = M$  ce qui revient à dire que le nœud milieu est bien le milieu de l'arête<sup>2</sup>.

Notons pour finir que la Relation (2), exprimée cette fois en fonction des nœuds  $A$ ,  $B$  et  $M$ , tels que définis ci-dessus, s'écrit

$$P(t) = (1-t)(1-2t)A + 4t(1-t)M + t(2t-1)B, \quad t \in [0, 1], \quad (5)$$

où on retrouve les polynômes de Lagrange de degré 2 des éléments finis (ici en une dimension). Par ailleurs, en fonction maintenant des points de contrôle, cette même expression s'écrit

$$P(u, v) = u^2 A + 2uvC + v^2 B, \quad (6)$$

<sup>2</sup>Ceci n'est pas strictement nécessaire, on pourrait, a priori, définir comme nœud "milieu" interne de l'arête tout point  $P(\alpha) = (1-\alpha)A + \alpha B$  avec néanmoins la limitation  $\frac{1}{4} < \alpha < \frac{3}{4}$ . Cette limitation vient du lien entre  $M$  et  $C$  qui n'a de sens que si  $M$  et  $C$  sont compris entre  $A$  et  $B$ . Sortir de cette intervalle conduirait à une boucle car  $C$  sort de  $AB$ . Néanmoins, mettre le nœud exactement au milieu rend le traitement élément fini en P2 (droit) cohérent avec l'élément P1 sous-jacent et identique au cas courbe, voir plus bas.

avec  $u + v = 1$ ,  $u \in [0, 1]$  qui est la forme de Bernstein (ou de Bézier) bien connue. Pour simplifier l'écriture, on a gardé la même notation pour  $P$ , *i.e.*,  $P(t)$  ou  $P(u, v)$ . De façon formelle,  $P(u, v)$  s'écrit aussi comme

$$P(u, v) = \sum_{i+j=2} B_{i,j}^2(u, v) P_{i,j}, \quad (7)$$

avec  $P_{20} = A$ ,  $P_{11} = C$  et  $P_{02} = B$ .

## 2.2 La tangente

La tangente de  $\Gamma$  est définie par

$$\gamma'(t) = -2(1-t)P_0 + (2-4t)P_1 + 2tP_2, t \in [0, 1]. \quad (8)$$

En  $t = 0$ ,  $\gamma'(t) = 2\overrightarrow{P_0P_1}$ , en  $t = 1$ ,  $\gamma'(t) = 2\overrightarrow{P_1P_2}$  et en  $t = \frac{1}{2}$ ,  $\gamma'(t) = \overrightarrow{P_0P_2}$ . Autrement dit, la courbe part de  $P_0$  tangente à  $\overrightarrow{P_0P_1}$ , est parallèle au segment  $P_0P_2$  au point  $\gamma(\frac{1}{2})$  et arrive en  $P_2$  tangente à  $\overrightarrow{P_1P_2}$ . Un résultat connu est que cette tangente est elle-même une forme de Bézier. En effet, on peut écrire  $\gamma'(t)$  comme

$$\gamma'(t) = 2 \left[ (1-t)\overrightarrow{P_0P_1} + t\overrightarrow{P_1P_2} \right], \quad (9)$$

ainsi on trouve la forme de Bézier de degré un dont les "points" de contrôle sont les vecteurs  $\overrightarrow{P_0P_1}$  et  $\overrightarrow{P_1P_2}$ . On peut l'écrire également comme

$$\gamma'(u(t), v(t)) = -2 \left[ u\overrightarrow{P_0P_1} + v\overrightarrow{P_1P_2} \right],$$

avec  $u = 1 - t$  et  $u + v = 1$ . Notons ainsi que  $\gamma'(u, v) = -\gamma'(t)$ .

Ceci permet de trouver simplement la tangente en tout point  $\gamma(t)$  de la courbe  $\Gamma$  par une construction géométrique évidente. Appliqué à l'arête  $AB$  de points de contrôle  $A, B$  et  $C$ , on voit que la tangente en  $A$  est portée par le vecteur  $\overrightarrow{AC}$ , la tangente en  $B$  est portée par le vecteur  $\overrightarrow{CB}$  et que la tangente en  $M$ , le milieu, est parallèle au vecteur  $\overrightarrow{AB}$ .

## 3 Carreaux de Bézier

Le polynôme de Bernstein de degré  $n$  s'exprime comme :

$$B_i^n(u) = C_n^i u^i (1-u)^{n-i} = \frac{n!}{i!(n-i)!} u^i (1-u)^{n-i},$$

où  $u \in [0, 1]$ . Le carreau de degré<sup>3</sup>  $n \times n \times n$ , étant donné les points de contrôle  $P_{ijk}$ , s'écrit simplement :

$$\theta(u, v, w) = \sum_{i=0,n} \sum_{j=0,n} \sum_{k=0,n} B_i^n(u) B_j^n(v) B_k^n(w) P_{ijk}. \quad (10)$$

Les polynômes de Bernstein sont agréables à manipuler car toute dérivée est elle même un polynôme de Bernstein et que le produit de deux tels polynômes est également un polynôme de Bernstein.

### 3.1 Carreau de degré 1x1x1

Cet hexaèdre est défini à partir de 8 points de contrôle qui ne sont autres que ses sommets, notés  $P_{ijk}$ . Il s'exprime via le produit tensoriel ci-dessus avec les polynômes de Bernstein de degré 1 :

$$\theta(u, v, w) = \sum_{i=0,1} \sum_{j=0,1} \sum_{k=0,1} B_i^1(u) B_j^1(v) B_k^1(w) P_{ijk}. \quad (11)$$

<sup>3</sup>Il est loisible de construire des carreaux dont le degré n'est pas identique selon les directions.



### 3.2 Carreau de degré 2x2x2

Cet hexaèdre est défini à partir de 27 points de contrôle, notés  $P_{ijk}$ , qui comprennent en particulier ses sommets. Ces points sont organisés comme le réseau suivant :

$$\begin{array}{ccc} P_{020} & P_{120} & P_{220} \\ P_{010} & P_{110} & P_{210} \\ P_{000} & P_{100} & P_{200} . \end{array}$$

pour l'indice  $k = 0$  et des réseaux similaires pour  $k = 1$  et  $k = 2$ . Le carreau est de degré 2 dans chaque direction et s'exprime donc via le produit des polynômes de Bernstein de degré 2 :

$$\theta(u, v, w) = \sum_{i=0,2} \sum_{j=0,2} \sum_{k=0,2} B_i^2(u) B_j^2(v) B_k^2(w) P_{ijk} . \quad (12)$$

Pour  $v = w = 0$ , on trouve :

$$\theta(u, 0, 0) = \sum_{i=0,2} B_i^2(u) P_{i00} ,$$

donc une courbe de Bézier comme définie ci-dessus (avec une subtilité de notation liée à la variation de  $u$  et aux indices).

## 4 Élément fini hexaédrique de degré 1, le Q1 à 8 nœuds

Les notations sont les notations classiques des éléments finis. On note  $\hat{K}$  l'élément de référence,  $K$  l'élément courant,  $F_K$  la transformation permettant de passer de  $\hat{K}$  à  $K$ ,  $p_i$  le polynôme de base numéro  $i$  et  $A_i$  le nœud  $i$  de  $K$ .  $\hat{x}$ ,  $\hat{y}$  et  $\hat{z}$  désignent les coordonnées d'un point dans  $\hat{K}$ ,  $x$ ,  $y$  et  $z$  les coordonnées d'un point courant. Les nœuds de  $\hat{K}$  ou  $[0, 1] \times [0, 1] \times [0, 1]$ , à savoir les 8 sommets, sont les suivants :

- ( 0. , 0. , 0. ) , ( 1. , 0. , 0. ) , ( 1. , 1. , 0. ) , ( 0. , 1. , 0. )
- ( 0. , 0. , 1. ) , ( 1. , 0. , 1. ) , ( 1. , 1. , 1. ) , ( 0. , 1. , 1. )

Un élément est décrit par la liste de ses nœuds (ou sommets, dans ce cas précis) .

### 4.1 Dérivées, jacobien et condition de validité

Les huit polynômes de base, du point de vue élément fini et du point de vue de la transformation géométrique, sont (en variables  $\hat{x}$ ,  $\hat{y}$  et  $\hat{z}$ ) :

- $p_1 = (1 - \hat{x})(1 - \hat{y})(1 - \hat{z})$ ,
- $p_2 = \hat{x}(1 - \hat{y})(1 - \hat{z})$ ,
- $p_3 = \hat{x}\hat{y}(1 - \hat{z})$ ,
- $p_4 = (1 - \hat{x})\hat{y}(1 - \hat{z})$ ,
- $p_5 = (1 - \hat{x})(1 - \hat{y})\hat{z}$ ,
- $p_6 = \hat{x}(1 - \hat{y})\hat{z}$ ,
- $p_7 = \hat{x}\hat{y}\hat{z}$ ,
- $p_8 = (1 - \hat{x})\hat{y}\hat{z}$ .

La transformation  $F_K$  permettant de passer de  $\hat{K}$  à  $K$  est  $F_K(\hat{M}) = \sum_i p_i(\hat{M}) A_i$ , on

a ainsi  $M = F_K(\hat{M})$ . On vérifie immédiatement que cette expression n'est autre que la Relation (11).

La matrice jacobienne, dont le déterminant nous intéresse, est définie à partir des dérivées des polynômes de base. Pour mémoire, au point<sup>4</sup>  $x$ ,  $y$ ,  $z$ , la matrice des dérivées des polynômes s'écrit :

$$\begin{bmatrix} -(1-y)(1-z) & (1-y)(1-z) & y(1-z) & -y(1-z) & -(1-y)z & (1-y)z & yz & -yz \\ -(1-x)(1-z) & -x(1-z) & x(1-z) & (1-x)(1-z) & -(1-x)z & -xz & xz & (1-x)z \\ -(1-x)(1-y) & -x(1-y) & -xy & -(1-x)y & (1-x)(1-y) & x(1-y) & xy & (1-x)y \end{bmatrix} .$$

<sup>4</sup>en omettant le symbole  $\hat{\cdot}$

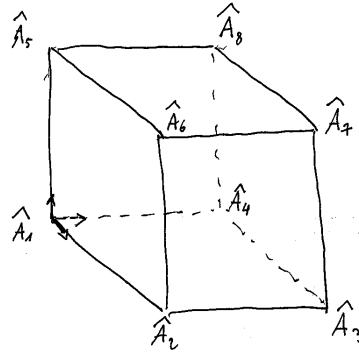


FIG. 2 – Numérotation des nœuds de l’hexaèdre de référence.

La matrice jacobienne s’écrit

$$\begin{bmatrix} \sum \frac{\partial p_i}{\partial x}(\hat{A})x_i & \sum \frac{\partial p_i}{\partial y}(\hat{A})x_i & \sum \frac{\partial p_i}{\partial z}(\hat{A})x_i \\ \sum \frac{\partial p_i}{\partial x}(\hat{A})y_i & \sum \frac{\partial p_i}{\partial y}(\hat{A})y_i & \sum \frac{\partial p_i}{\partial z}(\hat{A})y_i \\ \sum \frac{\partial p_i}{\partial x}(\hat{A})z_i & \sum \frac{\partial p_i}{\partial y}(\hat{A})z_i & \sum \frac{\partial p_i}{\partial z}(\hat{A})z_i \end{bmatrix},$$

où  $x_i, y_i$  et  $z_i$  sont les coordonnées du nœud courant  $A_i$  et  $\hat{A}$  est le nœud d’évaluation. En ce nœud d’évaluation, le jacobien qui est le déterminant de cette matrice, s’écrit comme le produit mixte  $\langle \vec{u} \cdot (\vec{v} \wedge \vec{w}) \rangle$ . Il représente donc, au facteur 6 près, le volume du tétraèdre formé par les vecteurs  $\vec{u}$ ,  $\vec{v}$  et  $\vec{w}$  rapportés en un point, ici avec,  $\vec{u} = \sum \frac{\partial p_i}{\partial x}(\hat{A})\vec{A}_i$ ,  $\vec{v} = \sum \frac{\partial p_i}{\partial y}(\hat{A})\vec{A}_i$  et  $\vec{w} = \sum \frac{\partial p_i}{\partial z}(\hat{A})\vec{A}_i$  avec  $\hat{A}$  le nœud d’évaluation et  $A_i$  les nœuds de l’élément considéré.

**Le jacobien en un sommet.** Regardons, à titre d’exercice, ce jacobien vu par le nœud  $\hat{A}_1$  donc pour le triplet  $\hat{x} = 0, \hat{y} = 0, \hat{z} = 0$ , la matrice ci-dessus vaut :

$$\begin{bmatrix} -1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix},$$

donc

$$\vec{u} = -A_1 + A_2 \quad , \quad \vec{v} = -A_1 + A_4 \quad \text{et} \quad \vec{w} = -A_1 + A_5,$$

par suite

$$\mathcal{J}(\hat{A}_1) = \langle \vec{A}_1 \vec{A}_2 \cdot (\vec{A}_1 \vec{A}_4 \wedge \vec{A}_1 \vec{A}_5) \rangle, \quad (13)$$

qui mesure (six fois) le volume du tétraèdre  $A_1 A_2 A_4 A_5$ , coin en  $A_1$  de l’hexaèdre<sup>5</sup>. Des formules identiques valent pour les 7 autres jacobiens associés aux autres sommets.

De manière générale, quels sont les conditions garantissant que le jacobien est strictement positif partout. Cette question semble anodine et pourtant il ne semble pas y avoir de références définitives sur ce sujet bien que de nombreux papiers tournent autour de ce sujet. En pratique, on a l’intuition que les extrema sont atteints sur les bords (comme pour le quadrilatère Q1 dans le plan) donc en un sommet et que, par suite, la positivité est garantie si le minimum des jacobiens associés aux sommets est strictement positif mais nous nous verrons plus tard que ceci n’est pas démontré.

<sup>5</sup>Il est amusant ou consternant de voir cette simple constatation exprimée comme un lemme dans certains papiers dont nous taillons le nom des auteurs par charité.

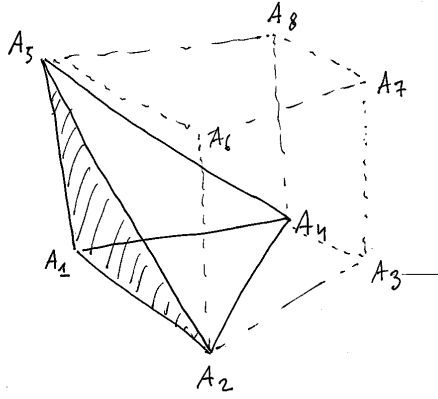


FIG. 3 – Le jacobien relatif à un sommet, ici  $\hat{A}_1$ , est le volume du tétraèdre coin de l'élément, ici  $[A_1A_2A_4A_5]$ .

On commence la discussion en regardant ce qu'est le jacobien aux sommets, sur une arête, sur une face et dans l'élément en exhibant la forme du polynôme associé à ces différents cas. En fait, on va montrer qu'il est difficile de conclure au seul vu de ces polynômes. On adopte ensuite le point de vue Bézier qui débouche sur une condition suffisante en constatant que nous n'avons pas réussi à faire mieux.

**Le jacobien sur une arête (cas général).** Regardons comment varie le jacobien quand  $\hat{x}$  varie dans  $[0, 1]$  pour  $\hat{y} = \hat{z} = 0$ . On a, pour les dérivées, la matrice suivante :

$$\begin{bmatrix} -1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -(1-x) & -x & x & (1-x) & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -(1-x) & -x & 0 & 0 & (1-x) & x & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

donc

$$\vec{u} = -A_1 + A_2, \quad \vec{v} = -(1-x)A_1 - xA_2 + xA_3 + (1-x)A_4 \text{ et } \vec{w} = -(1-x)A_1 - xA_2 + (1-x)A_5 + xA_6,$$

soit

$$\vec{u} = \overrightarrow{A_1A_2}, \quad \vec{v} = (1-x)\overrightarrow{A_1A_4} + x\overrightarrow{A_2A_3} \text{ et } \vec{w} = (1-x)\overrightarrow{A_1A_5} + x\overrightarrow{A_2A_6},$$

par suite

$$\mathcal{J}(x) = \langle \overrightarrow{A_1A_2} \cdot ((1-x)\overrightarrow{A_1A_4} + x\overrightarrow{A_2A_3}) \wedge ((1-x)\overrightarrow{A_1A_5} + x\overrightarrow{A_2A_6}) \rangle, \quad (14)$$

notons, au passage, que, évidemment,  $\mathcal{J}(0) = \mathcal{J}(\hat{A}_1)$  et que  $\mathcal{J}(1) = \mathcal{J}(\hat{A}_2)$ . Le vecteur  $\vec{u}$  est l'arête elle-même, le vecteur  $\vec{v}$  varie linéairement entre  $\overrightarrow{A_1A_4}$  et  $\overrightarrow{A_2A_3}$ . Le vecteur  $\vec{w}$  varie linéairement entre  $\overrightarrow{A_1A_5}$  et  $\overrightarrow{A_2A_6}$ . Ces vecteurs sont ceux des deux faces communes issus des extrémités de l'arête.

Écrit autrement, on a

$$\begin{aligned} \mathcal{J}(x) = x^2 \left\{ \mathcal{J}(\hat{A}_1) - \langle \overrightarrow{A_1A_2} \cdot (\overrightarrow{A_1A_4} \wedge \overrightarrow{A_2A_6}) \rangle - \langle \overrightarrow{A_1A_2} \cdot (\overrightarrow{A_2A_3} \wedge \overrightarrow{A_1A_5}) \rangle + \mathcal{J}(\hat{A}_2) \right\} \\ + x \left\{ -2\mathcal{J}(\hat{A}_1) + \langle \overrightarrow{A_1A_2} \cdot (\overrightarrow{A_2A_3} \wedge \overrightarrow{A_1A_5}) \rangle + \langle \overrightarrow{A_1A_2} \cdot (\overrightarrow{A_1A_4} \wedge \overrightarrow{A_2A_6}) \rangle \right\} + \mathcal{J}(\hat{A}_1). \end{aligned}$$

Le jacobien sur cette arête (et, en général, sur une arête) est un polynôme du second degré, ici en  $x$ .

On pose  $\alpha = \mathcal{J}(\hat{A}_1) - \langle \overrightarrow{A_1A_2} \cdot (\overrightarrow{A_1A_4} \wedge \overrightarrow{A_2A_6}) \rangle - \langle \overrightarrow{A_1A_2} \cdot (\overrightarrow{A_2A_3} \wedge \overrightarrow{A_1A_5}) \rangle + \mathcal{J}(\hat{A}_2)$ ,  $\beta = -2\mathcal{J}(\hat{A}_1) + \langle \overrightarrow{A_1A_2} \cdot (\overrightarrow{A_2A_3} \wedge \overrightarrow{A_1A_5}) \rangle + \langle \overrightarrow{A_1A_2} \cdot (\overrightarrow{A_1A_4} \wedge \overrightarrow{A_2A_6}) \rangle$  et  $\gamma = \mathcal{J}(\hat{A}_1)$ , le jacobien s'exprime alors simplement par :

$$\mathcal{J}(x) = \alpha x^2 + \beta x + \gamma.$$

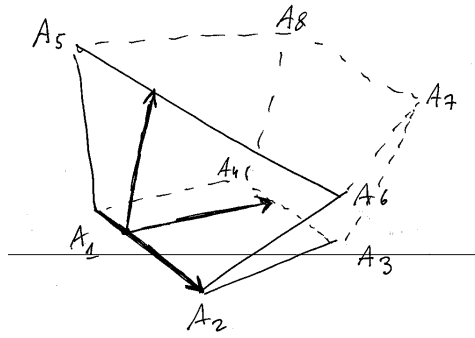


FIG. 4 – Le jacobien relatif à une arête, ici  $A_1A_2$ , est le volume du tétraèdre défini par l'arête elle-même et deux arêtes balayant les 2 faces incidentes.

La discussion du point de vue purement abstrait consiste à regarder les différents cas selon la valeur respective des coefficients présents dans la relation.

Si  $\alpha < 0$ , la condition de positivité se réduit à  $\mathcal{J}(\hat{A}_1)$  et  $\mathcal{J}(\hat{A}_2)$  strictement positifs. En effet, pour  $\alpha = 0$ , on a  $\mathcal{J}(x) = (1-x)\mathcal{J}(\hat{A}_1) + \mathcal{J}(\hat{A}_2)$  ce qui permet de conclure alors que pour  $\alpha < 0$ , on a  $\mathcal{J}(x)$  plus grand que le minimum entre  $\mathcal{J}(\hat{A}_1)$  et  $\mathcal{J}(\hat{A}_2)$ .

Si  $\alpha > 0$ , il existe un extremum, plus petit que  $\mathcal{J}(\hat{A}_1)$  et  $\mathcal{J}(\hat{A}_2)$  et il suffit de regarder si cet extremum est atteint sur  $[0, 1]$  ou hors cet intervalle. L'extremum est atteint pour  $x_{ext} = -\frac{\beta}{2\alpha}$ .

- si  $x_{ext} \in ]0, 1[$ , on calcule la valeur en ce point d'où la décision, cette valeur,  $\mathcal{J}(\hat{A}_1)$  et  $\mathcal{J}(\hat{A}_2)$  strictement positifs est la condition.
- si  $x_{ext} \notin ]0, 1[$ ,  $\mathcal{J}(\hat{A}_1)$  et  $\mathcal{J}(\hat{A}_2)$  strictement positifs est la condition.

**Le jacobien sur une arête (cas d'un parallélépipède).** Remarquons que pour un cube ou, plus généralement, pour un parallélépipède,  $\alpha = \beta = 0$  et  $\mathcal{J}(x) = \mathcal{J}(\hat{A}_1)$  et, ainsi, est constant, sur l'arête étudiée.

**Le jacobien sur une arête (cas où les faces sont planes).** On exprime les divers vecteurs intervenant en fonction de la base formée par  $\overrightarrow{A_1A_2}$ ,  $\overrightarrow{A_1A_4}$  et  $\overrightarrow{A_1A_5}$  et on part alors de la Relation (14), à savoir

$$\mathcal{J}(x) = \langle \overrightarrow{A_1A_2} \cdot (((1-x)\overrightarrow{A_1A_4} + x\overrightarrow{A_2A_3}) \wedge ((1-x)\overrightarrow{A_1A_5} + x\overrightarrow{A_2A_6})) \rangle,$$

écrit comme le déterminant

$$\mathcal{J}(x) = \begin{vmatrix} \overrightarrow{A_1A_2} & (1-x)\overrightarrow{A_1A_4} + x\overrightarrow{A_2A_3} & (1-x)\overrightarrow{A_1A_5} + x\overrightarrow{A_2A_6} \end{vmatrix},$$

qui, en posant, avec des coefficients adéquats,

$$\overrightarrow{A_2A_3} = a\overrightarrow{A_1A_2} + b\overrightarrow{A_1A_4} \quad \text{et} \quad \overrightarrow{A_2A_6} = c\overrightarrow{A_1A_2} + d\overrightarrow{A_1A_5}$$

se réduit à

$$\mathcal{J}(x) = \begin{vmatrix} \overrightarrow{A_1A_2} & (1-x+xb)\overrightarrow{A_1A_4} & (1-x+xd)\overrightarrow{A_1A_5} \end{vmatrix},$$

ou encore

$$\mathcal{J}(x) = (1-x+xb)(1-x+xd) \begin{vmatrix} \overrightarrow{A_1A_2} & \overrightarrow{A_1A_4} & \overrightarrow{A_1A_5} \end{vmatrix} = (1-x+xb)(1-x+xd)\mathcal{J}(\hat{A}_1).$$

Pour  $x = 0$ , on retrouve  $\mathcal{J}(\hat{A}_1)$ , pour  $x = 1$ , on a la relation  $\mathcal{J}(\hat{A}_2) = bd\mathcal{J}(\hat{A}_1)$ .

Comme la condition  $\mathcal{J}(\hat{A}_1) > 0$  et  $\mathcal{J}(\hat{A}_2) > 0$  est nécessaire, on a  $bd > 0$ . Pour voir, sous ces conditions, si  $\mathcal{J}(x)$  peut passer négatif ou nul, on va étudier le signe de  $(1-x +$

$xb)(1-x+xd)$  quand  $x \in [0, 1]$  pour  $b$  et  $d$  variant (les coefficients  $a$  et  $c$  n'interviennent pas). Autrement dit, peut on trouver au moins un couple  $(b, d)$  tel que, pour une valeur admissible de  $x$ , le jacobien soit non valide ?

La condition  $bd > 0$  implique que  $b$  et  $d$  soient de même signe. Le cas d'un signe négatif<sup>6</sup> est exclu car dans ce cas certains des huit  $\mathcal{J}(\hat{A}_i)$  seraient non positifs, ceci exclu les éléments ayant une ou plusieurs faces (planes) non convexes. Par suite,  $b$  et  $d$  sont nécessairement positifs. La question devient donc, peut on trouver au moins un couple  $(b, d)$ , chacun étant positif, tel que, pour une valeur admissible de  $x$ , le jacobien soit non valide ?

Regardons le signe de  $(1-x+xb)(1-x+xd)$ , pour cela, on écrit cette expression comme  $(1-x)^2 + x(1-x)(b+d) + bdx^2$ , comme  $x \in [0, 1]$ , que  $bd$  est positif et que  $b+d$  est également positif, l'expression est positive strictement et, par suite, le jacobien est strictement positif sur l'arête.

**Le jacobien sur une arête (cas où les faces ne sont pas planes).** Ici, on a

$$\overrightarrow{A_2A_3} = a\overrightarrow{A_1A_2} + b\overrightarrow{A_1A_4} + \gamma\overrightarrow{A_1A_5} \quad \text{et} \quad \overrightarrow{A_2A_6} = c\overrightarrow{A_1A_2} + \beta\overrightarrow{A_1A_4} + d\overrightarrow{A_1A_5}.$$

Donc

$$\mathcal{J}(x) = |\overrightarrow{A_1A_2} \quad (1-x)\overrightarrow{A_1A_4} + x\overrightarrow{A_2A_3} \quad (1-x)\overrightarrow{A_1A_5} + x\overrightarrow{A_2A_6}|,$$

s'écrit, successivement

$$\mathcal{J}(x) = |\overrightarrow{A_1A_2} \quad (1-x)\overrightarrow{A_1A_4} + x\overrightarrow{A_2A_3} \quad (1-x)\overrightarrow{A_1A_5} + x\overrightarrow{A_2A_6}|,$$

$$\mathcal{J}(x) = |\overrightarrow{A_1A_2} \quad (1-x+xb)\overrightarrow{A_1A_4} + x\gamma\overrightarrow{A_1A_5} \quad (1-x+xd)\overrightarrow{A_1A_5} + x\beta\overrightarrow{A_1A_4}|,$$

$$\mathcal{J}(x) = (1-x+xb)(1-x+xd) |\overrightarrow{A_1A_2} \quad \overrightarrow{A_1A_4} \quad \overrightarrow{A_1A_5}| + x^2\beta\gamma |\overrightarrow{A_1A_2} \quad \overrightarrow{A_1A_5} \quad \overrightarrow{A_1A_4}|,$$

ou encore

$$\begin{aligned} \mathcal{J}(x) &= \{(1-x+xb)(1-x+xd) - \beta\gamma x^2\} |\overrightarrow{A_1A_2} \quad \overrightarrow{A_1A_4} \quad \overrightarrow{A_1A_5}| \\ &= \{(1-x+xb)(1-x+xd) - \beta\gamma x^2\} \mathcal{J}(\hat{A}_1). \end{aligned}$$

On regarde le signe de  $(1-x+xb)(1-x+xd) - \beta\gamma x^2$  qui s'exprime comme  $(1-x)^2 + x(1-x)(b+d) + (bd - \beta\gamma)x^2$  et sera positif comme ci-dessus et si de plus  $bd - \beta\gamma$  est positif ce que l'on ne sait pas démontrer.

L'étude du cas où les faces sont planes et du cas où elles ne le sont pas conduit au résultat suivant :

**Théorème** Une condition nécessaire et suffisante de validité du jacobien sur les arêtes d'un hexaèdre Q1 à faces planes est que les huit jacobiens correspondant aux coins soient strictement positifs. En cas contraire, on ne sait pas conclure.  $\square$

Au passage, on a vu que ceci signifie que les faces sont convexes. Par ailleurs, dans le cas de faces planes, pour des combinaison comme  $bd = 1$  et  $b$  et  $d$  positifs, le jacobien est constant sur l'arête correspondante.

**Le jacobien sur une face (cas général).** Regardons comment varie le jacobien quand  $\hat{x}$  et  $\hat{y}$  varient dans  $[0, 1]$  et pour  $\hat{z} = 0$ . On a, pour les dérivées, la matrice suivante :

$$\begin{bmatrix} -(1-y) & (1-y) & y & -y & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -(1-x) & -x & x & (1-x) & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -(1-x)(1-y) & -x(1-y) & -xy & -(1-x)y & (1-x)(1-y) & x(1-y) & xy & (1-x)y \end{bmatrix}.$$

<sup>6</sup>Les valeurs  $b = -2, d = -1$  conduisent à un  $x$  compris entre  $\frac{1}{3}$  et  $\frac{1}{2}$ , par exemple  $\frac{5}{12}$ , qui est admissible mais le jacobien  $\mathcal{J}(\hat{A}_6)$  ou un plusieurs autres sont négatifs, donc ce contre-exemple n'en est pas un.

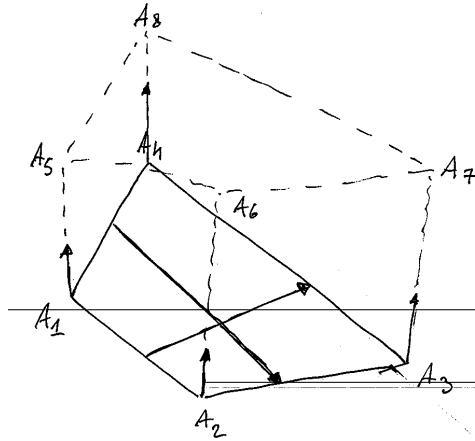


FIG. 5 – Le jacobien relatif à une face, ici  $A_1A_2A_3A_4$ , est une combinaison de volumes de tétraèdres définis par deux arêtes balayant la faces et une expression bilinéaire faisant intervenir les 4 arêtes incidentes à la face.

Donc

$$\vec{u} = -(1-y)A_1 + (1-y)A_2 + yA_3 - yA_4 = (1-y)\overrightarrow{A_1A_2} + y\overrightarrow{A_4A_3},$$

$$\vec{v} = -(1-x)A_1 - xA_2 + xA_3 + (1-x)A_4 = (1-x)\overrightarrow{A_1A_4} + x\overrightarrow{A_2A_3},$$

$$\vec{w} = -(1-x)(1-y)A_1 - x(1-y)A_2 - xyA_3 - (1-x)yA_4 + (1-x)(1-y)A_5 + x(1-y)A_6 + xyA_7 + (1-x)yA_8,$$

$$\vec{w} = (1-x)(1-y)\overrightarrow{A_1A_5} + x(1-y)\overrightarrow{A_2A_6} + xy\overrightarrow{A_3A_7} + (1-x)y\overrightarrow{A_4A_8}.$$

Le vecteur  $\vec{u}$  varie linéairement entre  $\overrightarrow{A_1A_2}$  et  $\overrightarrow{A_4A_3}$ . Le vecteur  $\vec{v}$  varie linéairement entre  $\overrightarrow{A_1A_4}$  et  $\overrightarrow{A_2A_3}$ . Le vecteur  $\vec{w}$  est construit avec les arêtes incidentes à la face. Ces huit vecteurs sont ceux de la face et des quatre autre faces issus des arêtes de la face observée.

Pour discuter du signe du jacobien, on va regarder ses dérivées. On a

$$\mathcal{J}(x, y) = \langle \vec{u} \cdot (\vec{v} \wedge \vec{w}) \rangle,$$

$$\frac{\partial \mathcal{J}(x, y)}{\partial x} = \langle \vec{u} \cdot \left( \frac{\partial \vec{v}}{\partial x} \wedge \vec{w} \right) \rangle + \langle \vec{u} \cdot (\vec{v} \wedge \frac{\partial \vec{w}}{\partial x}) \rangle,$$

$$\frac{\partial \mathcal{J}(x, y)}{\partial y} = \langle \frac{\partial \vec{u}}{\partial y} \cdot (\vec{v} \wedge \vec{w}) \rangle + \langle \vec{u} \cdot (\vec{v} \wedge \frac{\partial \vec{w}}{\partial y}) \rangle.$$

Avec, pour les dérivées non nulles *a priori*,

$$\frac{\partial \vec{u}}{\partial y} = -\overrightarrow{A_1A_2} + \overrightarrow{A_4A_3} = 2\left(\frac{A_1 + A_3}{2} - \frac{A_2 + A_4}{2}\right)$$

$$\frac{\partial \vec{v}}{\partial x} = -\overrightarrow{A_1A_4} + \overrightarrow{A_2A_3} = 2\left(\frac{A_1 + A_3}{2} - \frac{A_2 + A_4}{2}\right) = \frac{\partial \vec{u}}{\partial y}$$

$$\frac{\partial \vec{w}}{\partial x} = (1-y)(-\overrightarrow{A_1A_5} + \overrightarrow{A_2A_6}) + y(\overrightarrow{A_3A_7} - \overrightarrow{A_4A_8})$$

$$\frac{\partial \vec{w}}{\partial y} = (1-x)(-\overrightarrow{A_1A_5} + \overrightarrow{A_4A_8}) + x(-\overrightarrow{A_2A_6} + \overrightarrow{A_3A_7}),$$

où l'on observe, pour chaque dérivée, la présence du vecteur mesurant l'écart entre les milieux des diagonales des faces de l'élément. Avec des notations évidentes (se rapportant aux faces), on a

$$\frac{\partial \vec{u}}{\partial y} = 2\overrightarrow{A_{1234}}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial \vec{w}}{\partial x} &= 2\overrightarrow{A_{1234}} \\ \frac{\partial \vec{w}}{\partial x} &= 2(1-y)\overrightarrow{A_{1256}} + 2y\overrightarrow{A_{3478}} \\ \frac{\partial \vec{w}}{\partial y} &= 2(1-x)\overrightarrow{A_{1458}} + 2x\overrightarrow{A_{2367}}.\end{aligned}$$

Pour la dérivée seconde, il vient

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2 \vec{w}}{\partial x \partial y} &= \frac{\partial^2 \vec{w}}{\partial y \partial x} = \overrightarrow{A_1 A_5} - \overrightarrow{A_2 A_6} + \overrightarrow{A_3 A_7} - \overrightarrow{A_4 A_8} \\ \frac{\partial^2 \vec{w}}{\partial x \partial y} &= \frac{\partial^2 \vec{w}}{\partial y \partial x} = 4\left(\frac{A_2 + A_4 + A_5 + A_7}{4} - \frac{A_1 + A_3 + A_6 + A_8}{4}\right) = 4\overrightarrow{A_{12345678}},\end{aligned}$$

où l'on observe la présence du vecteur mesurant l'écart entre les barycentres du tétraèdre "central" des deux découpes en 5 de l'hexaèdre.

**Le jacobien sur une face (cas d'un parallélépipède).** On vérifie donc que pour un parallélépipède, les deux dérivées premières sont nulles et le jacobien est constant,  $\mathcal{J}(x, y) = \mathcal{J}(\hat{A}_1)$ , sur la face considérée.

**Le jacobien sur une face (retour au cas général).** Pour étudier le jacobien, on va réaliser un développement au voisinage d'un supposé extremum noté  $P_0 = (x_0, y_0)$  obtenu en résolvant le système

$$\frac{\partial \mathcal{J}(x, y)}{\partial x} = \frac{\partial \mathcal{J}(x, y)}{\partial y} = 0.$$

Le développement s'écrit

$$\mathcal{J}(x, y) = \mathcal{J}(x_0, y_0) + (x-x_0)\frac{\partial \mathcal{J}(x_0, y_0)}{\partial x} + (y-y_0)\frac{\partial \mathcal{J}(x_0, y_0)}{\partial y} + {}^t[(x-x_0)(y-y_0)]\mathcal{H}(x_0, y_0)[(x-x_0)(y-y_0)] + \dots,$$

avec

$$\mathcal{H}(x_0, y_0) = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 \mathcal{J}(x_0, y_0)}{\partial x \partial x} & \frac{\partial^2 \mathcal{J}(x_0, y_0)}{\partial x \partial y} \\ \frac{\partial^2 \mathcal{J}(x_0, y_0)}{\partial x \partial y} & \frac{\partial^2 \mathcal{J}(x_0, y_0)}{\partial y \partial y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A & B \\ B & C \end{bmatrix}.$$

Au voisinage de  $P_0$ , le comportement du jacobien est comme celui de

$$\mathcal{J}(x_0, y_0) + {}^t[(x-x_0)(y-y_0)]\mathcal{H}(x_0, y_0)[(x-x_0)(y-y_0)],$$

et l'étude de la partie quadratique permet de savoir si le jacobien en  $P_0$  est un minimum ou non afin d'en tirer les conclusions cherchées. Si on note  $X = x - x_0$  et  $Y = y - y_0$ , la forme quadratique s'exprime par

$$AX^2 + 2BXY + CY^2.$$

De manière abstraite, s'il existe un extremum  $P_0$ , l'étude de la forme quadratique (le signe de son déterminant et le signe de  $A$  et  $C$ ) donne le signe du jacobien quand  $x$  et  $y$  varient.

**Le jacobien sur une face (cas où toutes les faces sont planes).** Faire une analyse analogue à celle faite dans le cas d'une arête semble fastidieux, nous allons donc étudier ce cas dans l'approche Bézier, présumée plus agréable, voir plus bas.

**Le jacobien dans l'élément (cas où toutes les faces sont planes).** Même conclusion, voir l'approche Bézier.

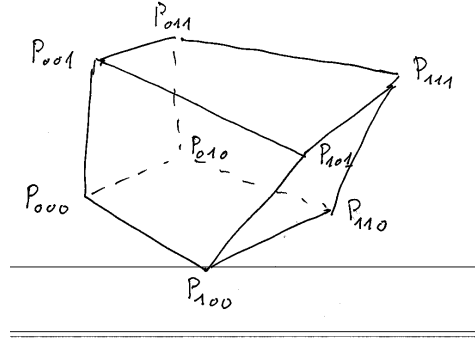


FIG. 6 – Numérotation des points de contrôle de l'hexaèdre courant.

**Le jacobien dans l'élément (cas général).** Même conclusion, voir l'approche Bézier.

Pour conclure cette analyse directe sur la formulation éléments finis classique, on peut dire que l'on n'a que des conclusions partielles. On va voir que l'on peut aller beaucoup plus loin en adoptant la vision Bézier de l'élément, c'est l'objet de la section qui suit.

## 4.2 Le jacobien vu par Bézier

On part de la Relation (11), à savoir

$$\theta(u, v, w) = \sum_{i=0,1} \sum_{j=0,1} \sum_{k=0,1} B_i^1(u) B_j^1(v) B_k^1(w) P_{ijk}.$$

On définit  $\vec{u} = \frac{\partial \theta(u, v, w)}{\partial u}$ ,  $\vec{v} = \frac{\partial \theta(u, v, w)}{\partial v}$  et  $\vec{w} = \frac{\partial \theta(u, v, w)}{\partial w}$ . Avec ces notations, le jacobien,  $\mathcal{J}(u, v, w)$ , s'écrit encore comme le produit mixte  $\langle \vec{u} \cdot (\vec{v} \wedge \vec{w}) \rangle$ . On a

$$\vec{u} = \sum_{j=0,1} \sum_{k=0,1} B_j^1(v) B_k^1(w) \overrightarrow{P_{0jk} P_{1jk}},$$

$$\vec{v} = \sum_{i=0,1} \sum_{k=0,1} B_i^1(u) B_k^1(w) \overrightarrow{P_{i0k} P_{i1k}},$$

$$\vec{w} = \sum_{i=0,1} \sum_{j=0,1} B_i^1(u) B_j^1(v) \overrightarrow{P_{ij0} P_{ij1}}.$$

Vu sous cette forme, le jacobien, produit mixte de ces vecteurs, va s'écrire, par réarrangement, sous une forme plus parlante faisant intervenir les polynômes de Bernstein de degré 2. Formellement, on va trouver une expression de la forme classique

$$\mathcal{J}(u, v, w) = \sum_{i=0,2} \sum_{j=0,2} \sum_{k=0,2} B_i^2(u) B_j^2(v) B_k^2(w) N_{ijk},$$

et le jeu est de calculer les coefficients  $N_{ijk}$  afin de trouver une condition suffisante de positivité.

On réarrange, en premier, les termes relatifs aux  $B_i^1(u)$ , il vient

$$\langle \vec{u} \cdot (\vec{v} \wedge \vec{w}) \rangle = \langle \vec{u} \cdot \left( \sum_{I=0,2} \sum_{i_1+i_2=I} \sum_{j=0,1} \sum_{k=0,1} B_I^2(u) B_j^1(v) B_k^1(w) K_I \overrightarrow{P_{i_1 0 k} P_{i_1 1 k}} \wedge \overrightarrow{P_{i_2 j 0} P_{i_2 j 1}} \right) \rangle,$$

avec  $K_I = \frac{I!(2-I)!}{2!}$ . Écrit autrement, on a

$$\langle \vec{u} \cdot (\vec{v} \wedge \vec{w}) \rangle = \langle \vec{u} \cdot \left( \sum_{I=0,2} \sum_{j=0,1} \sum_{k=0,1} B_I^2(u) B_j^1(v) B_k^1(w) \overrightarrow{M_{Ijk}} \right) \rangle,$$



avec

$$\overrightarrow{M_{Ijk}} = K_I \sum_{i_1+i_2=I} \overrightarrow{P_{i_1 0k} P_{i_1 1k}} \wedge \overrightarrow{P_{i_2 j0} P_{i_2 j1}}.$$

On regroupe ensuite les termes en  $B_j^1(v)$  et  $B_k^1(w)$ , il vient, en premier, pour  $j$ ,

$$\sum_{J=0,2} K_J \sum_{j_1+j_2=J} \langle \overrightarrow{P_{0j_1 k} P_{1j_1 k}} \cdot \overrightarrow{M_{Ij_2 k}} \rangle,$$

qui permet de dire que

$$N_{Ijk} = K_I K_J \sum_{j_1+j_2=J} \langle \overrightarrow{P_{0j_1 k} P_{1j_1 k}} \cdot \overrightarrow{M_{Ij_2 k}} \rangle,$$

puis, pour  $k$ , le regroupement induit le terme

$$\sum_{K=0,2} K_K \sum_{k_1+k_2=K} \langle \overrightarrow{P_{0j_1 k_1} P_{1j_1 k_1}} \cdot \overrightarrow{M_{Ij_2 k_2}} \rangle.$$

Ainsi, on a l'expression cherchée

$$\mathcal{J}(u, v, w) = \sum_{I=0,2} \sum_{J=0,2} \sum_{K=0,2} B_I^2(u) B_J^2(v) B_K^2(w) N_{IJK},$$

avec

$$N_{IJK} = K_I K_J K_K \sum_{i_1+i_2=I} \sum_{j_1+j_2=J} \sum_{k_1+k_2=K} \langle \overrightarrow{P_{0j_1 k_1} P_{1j_1 k_1}} \cdot (\overrightarrow{P_{i_1 0k_2} P_{i_1 1k_2}} \wedge \overrightarrow{P_{i_2 j_2 0} P_{i_2 j_2 1}}) \rangle,$$

ou encore

$$N_{IJK} = K_I K_J K_K \sum_{i_1+i_2=I} \sum_{j_1+j_2=J} \sum_{k_1+k_2=K} |\overrightarrow{P_{0j_1 k_1} P_{1j_1 k_1}} \cdot \overrightarrow{P_{i_1 0k_2} P_{i_1 1k_2}} \cdot \overrightarrow{P_{i_2 j_2 0} P_{i_2 j_2 1}}|. \quad (15)$$

La conclusion est la suivante :

**Théorème** Une condition suffisante de validité d'un hexaèdre Q1 est que les huit  $N_{IJK}$  correspondant aux coins soient strictement positifs tandis que les autres coefficients sont positifs ou nuls.  $\square$

À titre d'exercice, on vérifie aisément que, par exemple,  $N_{000}$  n'est autre que la formule de la Relation (13). On retrouve également le fait que, sur une arête, le jacobien est un polynôme de degré 2 tandis que sur une face, c'est un polynôme de degré 4.

Le coefficient  $N_{000}$  et les coefficients  $N_{IJK}$  avec un ou plusieurs indices à la valeur 2 sont les jacobiens des coins. Les autres coefficients, 12 pour les arêtes, 6 pour les faces et le coefficient "central" ne sont pas des jacobiens. Notons que le jacobien d'un simple hexaèdre Q1 est contrôlé par pas moins de 27 coefficients.

Si certains coefficients (autres que pour les coins) ne sont pas adéquats, on peut appliquer les algorithmes de raffinement basés sur la méthode de De Casteljau comme pour les autres éléments finis et s'approcher ainsi d'une condition nécessaire et suffisante.

Pour conclure sur ce théorème, on aimerait voir s'il est bien nécessaire de calculer les 27 coefficients de la formule.

**Le jacobien sur une arête, expression générale.** Revenons un instant sur la variation du jacobien sur une arête en regardant l'arête définie par  $u \in [0, 1]$ ,  $v = w = 0$ . Alors

$$\mathcal{J}(u, v, w) = \sum_{I=0,2} \sum_{J=0,2} \sum_{K=0,2} B_I^2(u) B_J^2(v) B_K^2(w) N_{IJK},$$

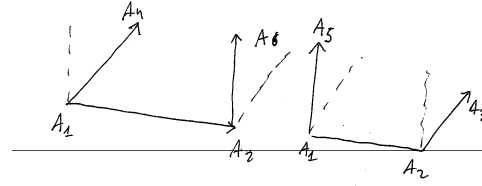


FIG. 7 – Les coefficients de contrôle du jacobien relatif à une arête, ici  $A_1A_2$ , comprennent les jacobiens relatifs à ses extrémités et une combinaison de deux volumes construits sur l'arête, une arête incidente et une arête "opposée".

se réduit à

$$\mathcal{J}(u, 0, 0) = \sum_{I=0,2} B_I^2(u) B_J^2(v=0) B_K^2(w=0) N_{I00} = \sum_{I=0,2} B_I^2(u) N_{I00}$$

avec

$$N_{I00} = K_I \sum_{i_1+i_2=I} |\overrightarrow{P_{000}P_{100}} \quad \overrightarrow{P_{i_100}P_{i_110}} \quad \overrightarrow{P_{i_200}P_{i_201}}|,$$

donc

$$\begin{aligned} \mathcal{J}(u, 0, 0) &= (1-u)^2 |\overrightarrow{P_{000}P_{100}} \quad \overrightarrow{P_{000}P_{010}} \quad \overrightarrow{P_{000}P_{001}}| \\ &+ 2u(1-u) \left( \frac{|\overrightarrow{P_{000}P_{100}} \quad \overrightarrow{P_{000}P_{010}} \quad \overrightarrow{P_{100}P_{101}}| + |\overrightarrow{P_{000}P_{100}} \quad \overrightarrow{P_{100}P_{110}} \quad \overrightarrow{P_{000}P_{001}}|}{2} \right) \\ &+ u^2 |\overrightarrow{P_{000}P_{100}} \quad \overrightarrow{P_{100}P_{110}} \quad \overrightarrow{P_{100}P_{101}}| \end{aligned}$$

soit encore, en fonction des nœuds :

$$\mathcal{J}(u, 0, 0) = (1-u)^2 \mathcal{J}(\hat{A}_1) + 2u(1-u) \frac{|\overrightarrow{A_1A_2} \quad \overrightarrow{A_1A_4} \quad \overrightarrow{A_2A_6}| + |\overrightarrow{A_1A_2} \quad \overrightarrow{A_2A_3} \quad \overrightarrow{A_1A_5}|}{2} + u^2 \mathcal{J}(\hat{A}_2), \quad (16)$$

expression dans laquelle on reconnaît les vecteurs déjà vus dans le coefficient  $\alpha$ . On trouve donc pour lieu des points  $(u, \mathcal{J}(u, 0, 0))$  un arc de parabole comme en (6) ou (7).

**Le jacobien sur une arête, faces incidentes planes.** Dans la vision éléments finis, on a montré que le jacobien était positif si les jacobiens coins l'étaient. Ceci ne semble pas évident au regard de la formule (16). Comme les faces sont planes, on écrit

$$\overrightarrow{A_2A_3} = a\overrightarrow{A_1A_2} + b\overrightarrow{A_1A_4} \quad \text{et} \quad \overrightarrow{A_2A_6} = c\overrightarrow{A_1A_2} + d\overrightarrow{A_1A_5}.$$

Alors,  $\mathcal{J}(\hat{A}_2)$ , alias  $\mathcal{J}(1, 0, 0)$ , s'exprime en fonction de  $\mathcal{J}(\hat{A}_1)$  comme suit :

$$\begin{aligned} \mathcal{J}(\hat{A}_2) &= |\overrightarrow{P_{000}P_{100}} \quad \overrightarrow{P_{100}P_{110}} \quad \overrightarrow{P_{100}P_{101}}| = |\overrightarrow{A_1A_2} \quad \overrightarrow{A_2A_3} \quad \overrightarrow{A_2A_6}|, \\ \mathcal{J}(\hat{A}_2) &= |\overrightarrow{A_1A_2} \quad b\overrightarrow{A_1A_4} \quad d\overrightarrow{A_1A_5}| = bd\mathcal{J}(\hat{A}_1), \end{aligned}$$

avec, on le sait,  $b$  et  $d$  positifs (faces convexes). On regarde maintenant  $N_{I00}$ , on a successivement :

$$\begin{aligned} N_{100} &= \frac{|\overrightarrow{A_1A_2} \quad \overrightarrow{A_1A_4} \quad \overrightarrow{A_2A_6}| + |\overrightarrow{A_1A_2} \quad \overrightarrow{A_2A_3} \quad \overrightarrow{A_1A_5}|}{2}, \\ N_{100} &= \frac{|\overrightarrow{A_1A_2} \quad \overrightarrow{A_1A_4} \quad c\overrightarrow{A_1A_2} + d\overrightarrow{A_1A_5}| + |\overrightarrow{A_1A_2} \quad a\overrightarrow{A_1A_2} + b\overrightarrow{A_1A_4} \quad \overrightarrow{A_1A_5}|}{2}, \\ N_{100} &= \frac{|\overrightarrow{A_1A_2} \quad \overrightarrow{A_1A_4} \quad d\overrightarrow{A_1A_5}| + |\overrightarrow{A_1A_2} \quad b\overrightarrow{A_1A_4} \quad \overrightarrow{A_1A_5}|}{2}, \\ N_{100} &= \frac{b+d}{2} |\overrightarrow{A_1A_2} \quad \overrightarrow{A_1A_4} \quad \overrightarrow{A_1A_5}|, \end{aligned}$$

donc  $N_{100}$  est positif et le jacobien est positif sur l'arête dès que les (huit) jacobiens coins sont positifs. On retrouve ainsi le résultat établi en regardant le point de vue élément fini.

**Le jacobien sur une arête, faces incidentes non planes.** On reprend la même discussion mais, ici, comme les faces ne sont pas planes, on écrit

$$\overrightarrow{A_2A_3} = a\overrightarrow{A_1A_2} + b\overrightarrow{A_1A_4} + \alpha\overrightarrow{A_1A_5} \quad \text{et} \quad \overrightarrow{A_2A_6} = c\overrightarrow{A_1A_2} + \beta\overrightarrow{A_1A_4} + d\overrightarrow{A_1A_5}.$$

Alors

$$\mathcal{J}(\hat{A}_2) = |\overrightarrow{A_1A_2} \quad \overrightarrow{A_2A_3} \quad \overrightarrow{A_2A_6}|,$$

s'exprime comme

$$\mathcal{J}(\hat{A}_2) = |\overrightarrow{A_1A_2} \quad a\overrightarrow{A_1A_2} + b\overrightarrow{A_1A_4} + \alpha\overrightarrow{A_1A_5} \quad c\overrightarrow{A_1A_2} + \beta\overrightarrow{A_1A_4} + d\overrightarrow{A_1A_5}|,$$

soit

$$\begin{aligned} &= |\overrightarrow{A_1A_2} \quad b\overrightarrow{A_1A_4} + \alpha\overrightarrow{A_1A_5} \quad \beta\overrightarrow{A_1A_4} + d\overrightarrow{A_1A_5}| = |\overrightarrow{A_1A_2} \quad b\overrightarrow{A_1A_4} \quad d\overrightarrow{A_1A_5}| + |\overrightarrow{A_1A_2} \quad \alpha\overrightarrow{A_1A_5} \quad \beta\overrightarrow{A_1A_4}| \\ &= bd|\overrightarrow{A_1A_2} \quad \overrightarrow{A_1A_4} \quad \overrightarrow{A_1A_5}| + \alpha\beta|\overrightarrow{A_1A_2} \quad \overrightarrow{A_1A_5} \quad \overrightarrow{A_1A_4}| = (bd - \alpha\beta)|\overrightarrow{A_1A_2} \quad \overrightarrow{A_1A_4} \quad \overrightarrow{A_1A_5}| \\ &= (bd - \alpha\beta)\mathcal{J}(\hat{A}_1). \end{aligned}$$

Le signe du terme  $bd - \alpha\beta$  est *a priori* quelconque et on ne sait pas conclure sur la relation entre ces deux jacobiens contrairement au cas faces planes.

On regarde maintenant  $N_{100}$ , on a

$$N_{100} = \frac{|\overrightarrow{A_1A_2} \quad \overrightarrow{A_1A_4} \quad \overrightarrow{A_2A_6}| + |\overrightarrow{A_1A_2} \quad \overrightarrow{A_2A_3} \quad \overrightarrow{A_1A_5}|}{2},$$

$$N_{100} = \frac{|\overrightarrow{A_1A_2} \quad \overrightarrow{A_1A_4} \quad c\overrightarrow{A_1A_2} + \beta\overrightarrow{A_1A_4} + d\overrightarrow{A_1A_5}| + |\overrightarrow{A_1A_2} \quad a\overrightarrow{A_1A_2} + b\overrightarrow{A_1A_4} + \alpha\overrightarrow{A_1A_5} \quad \overrightarrow{A_1A_5}|}{2},$$

$$N_{100} = \frac{|\overrightarrow{A_1A_2} \quad \overrightarrow{A_1A_4} \quad d\overrightarrow{A_1A_5}| + |\overrightarrow{A_1A_2} \quad b\overrightarrow{A_1A_4} \quad \overrightarrow{A_1A_5}|}{2},$$

et on retrouve exactement l'expression du cas de faces planes.

Cette étude du cas plan et du cas non plan conduit au résultat suivant :

**Théorème pour les arêtes** Une condition nécessaire et suffisante de validité du jacobien sur les arêtes d'un hexaèdre Q1 à faces planes est que les huit jacobiens correspondant aux coins soient strictement positifs. Sinon, on a une condition suffisante, les jacobiens coins sont strictement positifs et le coefficient de contrôle autre est positif ou nul.  $\square$

**Le jacobien sur une face, expression générale.** On regarde maintenant le cas d'une face, par exemple, la face  $w = 0$ . Alors

$$\mathcal{J}(u, v, w) = \sum_{I=0,2} \sum_{J=0,2} \sum_{K=0,2} B_I^2(u)B_J^2(v)B_K^2(w)N_{IJK}$$

se réduit à

$$\mathcal{J}(u, v, w) = \sum_{I=0,2} \sum_{J=0,2} B_I^2(u)B_J^2(v)B_0^2(w=0)N_{IJ0}, = \sum_{I=0,2} \sum_{J=0,2} B_I^2(u)B_J^2(v)N_{IJ0}$$

avec

$$N_{IJ0} = K_I K_J \sum_{i_1+i_2=I} \sum_{j_1+j_2=J} |\overrightarrow{P_{0j_10}P_{1j_10}} \quad \overrightarrow{P_{i_100}P_{i_110}} \quad \overrightarrow{P_{i_2j_20}P_{i_2j_21}}|,$$

ainsi, il y a 9 coefficients  $N_{IJ0}$  pour contrôler la face. Le seul à étudier est le coefficient "central" (les autres ayant été discuté en regardant les coins et les arêtes), soit  $N_{110}$ . On a

$$N_{110} = \frac{1}{2} \sum_{i_1+i_2=1} \sum_{j_1+j_2=1} |\overrightarrow{P_{0j_10}P_{1j_10}} \quad \overrightarrow{P_{i_100}P_{i_110}} \quad \overrightarrow{P_{i_2j_20}P_{i_2j_21}}|,$$

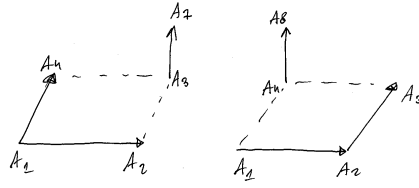


FIG. 8 – Le coefficient de contrôle du jacobien relatif à une face autre que ceux de ses arêtes. Il comprend 4 termes (nous en montrons 2 sur le dessin) construits de manière analogue, le volume d'un tétraèdre construit sur les arêtes de la face et une arête incidente "opposée".

que l'on ouvre en  $j_1$  et  $j_2$ . Il y a donc les deux couples (0, 1) et (1, 0) soit :

$$N_{110} = \frac{1}{4} \sum_{i_1+i_2=1} \left( |\overrightarrow{P_{000}P_{100}} \quad \overrightarrow{P_{i_100}P_{i_110}} \quad \overrightarrow{P_{i_210}P_{i_211}}| + |\overrightarrow{P_{010}P_{110}} \quad \overrightarrow{P_{i_100}P_{i_110}} \quad \overrightarrow{P_{i_200}P_{i_201}}| \right),$$

que l'on ouvre en  $i_1$  et  $i_2$ . Il y a donc les deux couples (0, 1) et (1, 0) soit 4 termes :

$$N_{110} = \frac{1}{4} \left( |\overrightarrow{P_{000}P_{100}} \quad \overrightarrow{P_{000}P_{010}} \quad \overrightarrow{P_{110}P_{111}}| + |\overrightarrow{P_{010}P_{110}} \quad \overrightarrow{P_{000}P_{010}} \quad \overrightarrow{P_{100}P_{101}}| \right. \\ \left. + |\overrightarrow{P_{000}P_{100}} \quad \overrightarrow{P_{100}P_{110}} \quad \overrightarrow{P_{010}P_{011}}| + |\overrightarrow{P_{010}P_{110}} \quad \overrightarrow{P_{100}P_{110}} \quad \overrightarrow{P_{000}P_{001}}| \right).$$

En fonction de la numérotation en  $A_i$ , il vient :

$$N_{110} = \frac{1}{4} \left( |\overrightarrow{A_1A_2} \quad \overrightarrow{A_1A_4} \quad \overrightarrow{A_3A_7}| + |\overrightarrow{A_4A_3} \quad \overrightarrow{A_1A_4} \quad \overrightarrow{A_2A_6}| \right. \\ \left. + |\overrightarrow{A_1A_2} \quad \overrightarrow{A_2A_3} \quad \overrightarrow{A_4A_8}| + |\overrightarrow{A_4A_3} \quad \overrightarrow{A_2A_3} \quad \overrightarrow{A_1A_5}| \right).$$

Géométriquement, ces quatres termes sont analogues. On prend l'un des triangles des deux découpes en deux de la face puis le vecteur joignant le quatrième sommet de la face (opposé à ce triangle) et le sommet correspondant de la face en face de la face considérée.

**Le jacobien sur une face, faces planes.** Comme les termes sont analogues, on n'en étudie qu'un seul, par exemple  $|\overrightarrow{A_1A_2} \quad \overrightarrow{A_2A_3} \quad \overrightarrow{A_4A_8}|$ , que l'on exprime par rapport à une base appuyée sur le sommet  $A_1$ , soit les vecteurs  $\overrightarrow{A_1A_2}$ ,  $\overrightarrow{A_1A_4}$  et  $\overrightarrow{A_1A_5}$ . Ainsi, on a, avec des coefficients adéquats :

$$\overrightarrow{A_2A_3} = a\overrightarrow{A_1A_2} + b\overrightarrow{A_1A_4} \quad \text{et} \quad \overrightarrow{A_4A_8} = c\overrightarrow{A_1A_4} + d\overrightarrow{A_1A_5}.$$

Il vient successivement :

$$|\overrightarrow{A_1A_2} \quad \overrightarrow{A_2A_3} \quad \overrightarrow{A_4A_8}| = |\overrightarrow{A_1A_2} \quad a\overrightarrow{A_1A_2} + b\overrightarrow{A_1A_4} \quad c\overrightarrow{A_1A_4} + d\overrightarrow{A_1A_5}| \\ |\overrightarrow{A_1A_2} \quad \overrightarrow{A_2A_3} \quad \overrightarrow{A_4A_8}| = |\overrightarrow{A_1A_2} \quad b\overrightarrow{A_1A_4} \quad d\overrightarrow{A_1A_5}| = bd|\overrightarrow{A_1A_2} \quad \overrightarrow{A_1A_4} \quad \overrightarrow{A_1A_5}| = bd\mathcal{J}(\hat{A}_1),$$

comme l'élément est valide, ses faces sont convexes et  $b$  et  $d$  sont positifs. Par suite, le terme est positif.

**Le jacobien sur une face, faces non planes.** Comme l'hypothèse de planéité n'est pas vérifiée, on écrit

$$\overrightarrow{A_2A_3} = a\overrightarrow{A_1A_2} + b\overrightarrow{A_1A_4} + \alpha\overrightarrow{A_1A_5} \quad \text{et} \quad \overrightarrow{A_4A_8} = \beta\overrightarrow{A_1A_2} + c\overrightarrow{A_1A_4} + d\overrightarrow{A_1A_5}.$$

Alors

$$|\overrightarrow{A_1A_2} \quad \overrightarrow{A_2A_3} \quad \overrightarrow{A_4A_8}| = |\overrightarrow{A_1A_2} \quad a\overrightarrow{A_1A_2} + b\overrightarrow{A_1A_4} + \alpha\overrightarrow{A_1A_5} \quad \beta\overrightarrow{A_1A_2} + c\overrightarrow{A_1A_4} + d\overrightarrow{A_1A_5}|,$$

$$\begin{aligned}
&= |\overrightarrow{A_1A_2} \quad b\overrightarrow{A_1A_4} + \alpha\overrightarrow{A_1A_5} \quad c\overrightarrow{A_1A_4} + d\overrightarrow{A_1A_5}|, \\
&= |\overrightarrow{A_1A_2} \quad b\overrightarrow{A_1A_4} \quad d\overrightarrow{A_1A_5}| + |\overrightarrow{A_1A_2} \quad \alpha\overrightarrow{A_1A_5} \quad c\overrightarrow{A_1A_4}| \\
&= bd|\overrightarrow{A_1A_2} \quad \overrightarrow{A_1A_4} \quad \overrightarrow{A_1A_5}| + \alpha c|\overrightarrow{A_1A_2} \quad \overrightarrow{A_1A_5} \quad \overrightarrow{A_1A_4}|, \\
&= (bd - \alpha c)|\overrightarrow{A_1A_2} \quad \overrightarrow{A_1A_4} \quad \overrightarrow{A_1A_5}| = (bd - \alpha c)\mathcal{J}(\hat{A}_1),
\end{aligned}$$

et la conclusion est identique à celle du cas des arêtes, on ne sait pas garantir le signe de  $(bd - \alpha c)$ .

Cette étude du cas plan et du cas non plan conduit au résultat suivant :

**Théorème pour les faces** Une condition nécessaire et suffisante de validité du jacobien sur les faces d'un hexaèdre Q1 à faces planes est que les huit jacobiens correspondant aux coins soient strictement positifs. Sinon, on a une condition suffisante, les jacobiens coins sont strictement positifs et les coefficient de contrôle autre et celui de la face, hors arête, sont positifs ou nul.  $\square$

Ce qui revient. encore une fois, à ce que les faces soient convexes dans le cas de faces planes.

**Le jacobien dans l'élément, expression générale.** Il reste à étudier la variation du jacobien dans tout l'élément. On a

$$\mathcal{J}(u, v, w) = \sum_{I=0,2} \sum_{J=0,2} \sum_{K=0,2} B_I^2(u)B_J^2(v)B_K^2(w)N_{IJK}$$

et le seul terme non déjà étudié, parmi les 27 termes, est  $N_{111}$ . On a

$$N_{111} = \frac{1}{8} \sum_{i_1+i_2=1} \sum_{j_1+j_2=1} \sum_{k_1+k_2=1} |\overrightarrow{P_{0j_1k_1}P_{1j_1k_1}} \quad \overrightarrow{P_{i_10k_2}P_{i_11k_2}} \quad \overrightarrow{P_{i_2j_20}P_{i_2j_21}}|,$$

que l'on ouvre en  $k_1$  et  $k_2$ . Il y a donc les deux couples  $(0, 1)$  et  $(1, 0)$  soit :

$$\begin{aligned}
N_{111} = \frac{1}{8} \sum_{i_1+i_2=1} \sum_{j_1+j_2=1} &\left( |\overrightarrow{P_{0j_10}P_{1j_10}} \quad \overrightarrow{P_{i_101}P_{i_111}} \quad \overrightarrow{P_{i_2j_20}P_{i_2j_21}}| \right. \\
&\left. + |\overrightarrow{P_{0j_11}P_{1j_11}} \quad \overrightarrow{P_{i_100}P_{i_110}} \quad \overrightarrow{P_{i_2j_20}P_{i_2j_21}}| \right)
\end{aligned}$$

que l'on ouvre en  $j_1$  et  $j_2$ . Il y a donc les deux couples  $(0, 1)$  et  $(1, 0)$  soit :

$$\begin{aligned}
N_{111} = \frac{1}{8} \sum_{i_1+i_2=1} &\left( |\overrightarrow{P_{000}P_{100}} \quad \overrightarrow{P_{i_101}P_{i_111}} \quad \overrightarrow{P_{i_210}P_{i_211}}| + |\overrightarrow{P_{001}P_{101}} \quad \overrightarrow{P_{i_100}P_{i_110}} \quad \overrightarrow{P_{i_210}P_{i_211}}| \right. \\
&\left. + |\overrightarrow{P_{010}P_{110}} \quad \overrightarrow{P_{i_101}P_{i_111}} \quad \overrightarrow{P_{i_200}P_{i_201}}| + |\overrightarrow{P_{011}P_{111}} \quad \overrightarrow{P_{i_100}P_{i_110}} \quad \overrightarrow{P_{i_200}P_{i_201}}| \right),
\end{aligned}$$

que l'on ouvre enfin en  $i_1$  et  $i_2$ . Il y a donc les deux couples  $(0, 1)$  et  $(1, 0)$  soit :

$$\begin{aligned}
N_{111} = \frac{1}{8} &\left( |\overrightarrow{P_{000}P_{100}} \quad \overrightarrow{P_{001}P_{011}} \quad \overrightarrow{P_{110}P_{111}}| + |\overrightarrow{P_{001}P_{101}} \quad \overrightarrow{P_{000}P_{010}} \quad \overrightarrow{P_{110}P_{111}}| \right. \\
&+ |\overrightarrow{P_{010}P_{110}} \quad \overrightarrow{P_{001}P_{011}} \quad \overrightarrow{P_{100}P_{101}}| + |\overrightarrow{P_{011}P_{111}} \quad \overrightarrow{P_{000}P_{010}} \quad \overrightarrow{P_{100}P_{101}}| \\
&+ |\overrightarrow{P_{000}P_{100}} \quad \overrightarrow{P_{101}P_{111}} \quad \overrightarrow{P_{010}P_{011}}| + |\overrightarrow{P_{001}P_{101}} \quad \overrightarrow{P_{100}P_{110}} \quad \overrightarrow{P_{010}P_{011}}| \\
&\left. + |\overrightarrow{P_{010}P_{110}} \quad \overrightarrow{P_{101}P_{111}} \quad \overrightarrow{P_{000}P_{001}}| + |\overrightarrow{P_{011}P_{111}} \quad \overrightarrow{P_{100}P_{110}} \quad \overrightarrow{P_{000}P_{001}}| \right).
\end{aligned}$$

En fonction de la numérotation en  $A_i$ , il vient :

$$\begin{aligned}
N_{111} = \frac{1}{8} &\left( |\overrightarrow{A_1A_2} \quad \overrightarrow{A_5A_8} \quad \overrightarrow{A_3A_7}| + |\overrightarrow{A_5A_6} \quad \overrightarrow{A_1A_4} \quad \overrightarrow{A_3A_7}| + |\overrightarrow{A_4A_3} \quad \overrightarrow{A_5A_8} \quad \overrightarrow{A_2A_6}| + |\overrightarrow{A_8A_7} \quad \overrightarrow{A_1A_4} \quad \overrightarrow{A_2A_6}| \right. \\
&\left. + |\overrightarrow{A_1A_2} \quad \overrightarrow{A_6A_7} \quad \overrightarrow{A_4A_8}| + |\overrightarrow{A_5A_6} \quad \overrightarrow{A_2A_3} \quad \overrightarrow{A_4A_8}| + |\overrightarrow{A_4A_3} \quad \overrightarrow{A_6A_7} \quad \overrightarrow{A_1A_5}| + |\overrightarrow{A_8A_7} \quad \overrightarrow{A_2A_3} \quad \overrightarrow{A_1A_5}| \right).
\end{aligned}$$

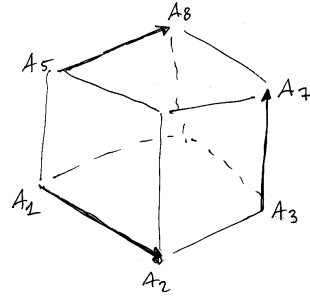


FIG. 9 – Le coefficient de contrôle du jacobien relatif à l'élément lui-même autre que ceux de ses faces et ceux de ses arêtes. Il comprend 8 termes (dont l'un est montré sur le dessin) construits de manière analogue, le volume d'un tétraèdre construit sur trois arêtes "opposées".

**Le jacobien dans l'élément, faces planes.** Pour analyser ce coefficient dans le cas où les faces sont planes, on regarde maintenant un seul de ses 8 termes, par exemple,  $|\overrightarrow{A_1A_2} \ \overrightarrow{A_5A_8} \ \overrightarrow{A_3A_7}|$ . Comme la face  $A_1A_4A_8A_5$  est plane, on écrit, avec des coefficients adéquats

$$\overrightarrow{A_5A_8} = a\overrightarrow{A_1A_4} + b\overrightarrow{A_1A_5},$$

puis on exprime  $\overrightarrow{A_3A_7}$  dans la base formée des trois vecteurs  $\overrightarrow{A_1A_2}, \overrightarrow{A_1A_4}$  et  $\overrightarrow{A_1A_5}$ , soit, avec des coefficients adéquats

$$\overrightarrow{A_3A_7} = c\overrightarrow{A_1A_2} + d\overrightarrow{A_1A_4} + e\overrightarrow{A_1A_5},$$

alors

$$|\overrightarrow{A_1A_2} \ \overrightarrow{A_5A_8} \ \overrightarrow{A_3A_7}| = |\overrightarrow{A_1A_2} \ (a\overrightarrow{A_1A_4} + b\overrightarrow{A_1A_5}) \ (c\overrightarrow{A_1A_2} + d\overrightarrow{A_1A_4} + e\overrightarrow{A_1A_5})|,$$

par suite,

$$|\overrightarrow{A_1A_2} \ \overrightarrow{A_5A_8} \ \overrightarrow{A_3A_7}| = |\overrightarrow{A_1A_2} \ a\overrightarrow{A_1A_4} \ c\overrightarrow{A_1A_2} + d\overrightarrow{A_1A_4} + e\overrightarrow{A_1A_5}| + |\overrightarrow{A_1A_2} \ b\overrightarrow{A_1A_5} \ c\overrightarrow{A_1A_2} + d\overrightarrow{A_1A_4} + e\overrightarrow{A_1A_5}|,$$

qui se réduit à

$$|\overrightarrow{A_1A_2} \ a\overrightarrow{A_1A_4} \ e\overrightarrow{A_1A_5}| + |\overrightarrow{A_1A_2} \ b\overrightarrow{A_1A_5} \ d\overrightarrow{A_1A_4}| = ae|\overrightarrow{A_1A_2} \ \overrightarrow{A_1A_4} \ \overrightarrow{A_1A_5}| + bd|\overrightarrow{A_1A_2} \ \overrightarrow{A_1A_5} \ \overrightarrow{A_1A_4}|$$

soit, au final

$$(ae - bd)|\overrightarrow{A_1A_2} \ \overrightarrow{A_1A_4} \ \overrightarrow{A_1A_5}| = (ae - bd)\mathcal{J}(\hat{A}_1).$$

Il reste donc à analyser le signe de  $ae - bd$ . Pour ce faire, on considère les composantes du vecteur  $\overrightarrow{A_3A_7}$  sur le plan  $A_1A_4A_8A_5$  et l'on note  $\overrightarrow{\pi A_3A_7}$  le vecteur ayant ces composantes. Ainsi

$$ae - bd = |\overrightarrow{A_5A_8} \ \overrightarrow{\pi A_3A_7}|.$$

Si  $\vec{n}$  est le vecteur normal au plan  $A_1A_4A_8A_5$  orienté comme  $\overrightarrow{A_1A_2}$ , on a

$$ae - bd = |\overrightarrow{A_5A_8} \ \overrightarrow{\pi A_3A_7} \ \vec{n}|.$$

Ceci sera positif si rapporté en  $A_5$ , le sommet  $A_5 + \overrightarrow{\pi A_3A_7}$  est situé "au-dessus" de  $A_8$ , mais on ne sait pas en dire plus.

**Le jacobien dans l'élément, faces non planes.** On pose

$$\overrightarrow{A_5A_8} = \alpha\overrightarrow{A_1A_2} + a\overrightarrow{A_1A_4} + b\overrightarrow{A_1A_5},$$

puis on exprime  $\overrightarrow{A_3A_7}$  dans la base formée des trois vecteurs  $\overrightarrow{A_1A_2}, \overrightarrow{A_1A_4}$  et  $\overrightarrow{A_1A_5}$ , soit

$$\overrightarrow{A_3A_7} = c\overrightarrow{A_1A_2} + d\overrightarrow{A_1A_4} + e\overrightarrow{A_1A_5},$$

alors

$$|\overrightarrow{A_1A_2} \quad \overrightarrow{A_5A_8} \quad \overrightarrow{A_3A_7}| = |\overrightarrow{A_1A_2} \quad \alpha\overrightarrow{A_1A_2} + a\overrightarrow{A_1A_4} + b\overrightarrow{A_1A_5} \quad c\overrightarrow{A_1A_2} + d\overrightarrow{A_1A_4} + e\overrightarrow{A_1A_5}|,$$

qui se réduit à

$$|\overrightarrow{A_1A_2} \quad a\overrightarrow{A_1A_4} + b\overrightarrow{A_1A_5} \quad d\overrightarrow{A_1A_4} + e\overrightarrow{A_1A_5}|,$$

donc comme pour le cas des arêtes ou des faces et *a fortiori*, on ne sait pas conclure.

### 4.3 En pratique

Il faut calculer les 27 coefficients de contrôle (incluant les 8 jacobiens coins) et vérifier que les 8 jacobiens coins sont strictement positifs tandis que les autres coefficients sont positifs ou nuls.

Il est important de noter que cet élément de degré 1, d'apparence simple, est délicat à analyser même dans le cas où ses faces sont planes.

### 4.4 Sur la transformation inverse

Soit  $P$  un point quelconque du plan de coordonnées  $x, y$  et  $z$  et soit  $[A_1A_2A_3A_4A_5A_6A_7A_8]$  un hexaèdre  $Q1$ . On désigne par  $x_i, y_i$  et  $z_i$  les coordonnées de  $A_i$ . On note cet hexaèdre,  $K$ , sous la forme habituelle (écrite ici en  $u, v$  et  $w$ )

$$K = \{M(u, v, w) = (1-u)(1-v)(1-w)A_1 \\ + u(1-v)(1-w)A_2 + uv(1-w)A_3 + (1-u)v(1-w)A_4 \\ + (1-u)(1-v)wA_5 + u(1-v)wA_6 + uvwA_7 + (1-u)vwA_8, u \in [0, 1], v \in [0, 1], w \in [0, 1]\}.$$

Ceci s'écrit également

$$K = \{M(u, v, w) = uvw(-A_1 + A_2 - A_3 + A_4 + A_5 - A_6 + A_7 - A_8) \\ + uv(A_1 - A_2 + A_3 - A_4) + uw(A_1 - A_2 - A_5 + A_6) + vw(A_1 - A_4 - A_5 + A_8) \\ u(-A_1 + A_2) + v(-A_1 + A_4) + w(-A_1 + A_5) + A_1, u \in [0, 1], v \in [0, 1], w \in [0, 1]\}.$$

Connaissant  $P$ , on cherche  $u, v$  et  $w$ . Dans la relation ci-dessus, on fixe  $P = M(u, v, w)$ , il vient :

$$\overrightarrow{A_1P} = uvw\overrightarrow{A_{uvw}} + uv\overrightarrow{A_{uv}} + uw\overrightarrow{A_{uw}} + vw\overrightarrow{A_{vw}} + u\overrightarrow{A_{12}} + v\overrightarrow{A_{14}} + w\overrightarrow{A_{15}}, \quad (17)$$

avec des notations évidentes. Notons que, comme ci-dessus mais avec des notations adaptées,  $\overrightarrow{A_{uv}}$  mesure la différence entre les milieux des diagonales de la face  $w = 0$ , en effet :

$$\overrightarrow{A_{uv}} = A_1 - A_2 + A_3 - A_4 = 2\left(\frac{A_1 + A_3}{2} - \frac{A_2 + A_4}{2}\right),$$

et que des relations analogues valent pour  $\overrightarrow{A_{uw}}$  et  $\overrightarrow{A_{vw}}$ . De même,  $\overrightarrow{A_{uvw}}$  mesure la différence entre les barycentres des tétraèdres centraux des deux découpes en 5 d'un hexaèdre, en effet :

$$\overrightarrow{A_{uvw}} = -A_1 + A_2 - A_3 + A_4 + A_5 - A_6 + A_7 - A_8 = 4\left(\frac{A_2 + A_4 + A_5 + A_7}{4} - \frac{A_1 + A_3 + A_6 + A_8}{4}\right).$$

**Cas d'un parallélépipède.** Dans ce cas, la Relation (17) se réduit à

$$\overrightarrow{A_1P} = u\overrightarrow{A_{12}} + v\overrightarrow{A_{14}} + w\overrightarrow{A_{15}},$$

et la solution est triviale. On a

$$u = \frac{[\overrightarrow{A_1P} \quad \overrightarrow{A_{14}} \quad \overrightarrow{A_{15}}]}{[\overrightarrow{A_{12}} \quad \overrightarrow{A_{14}} \quad \overrightarrow{A_{15}}]}, \quad v = \frac{[\overrightarrow{A_{12}} \quad \overrightarrow{A_1P} \quad \overrightarrow{A_{15}}]}{[\overrightarrow{A_{12}} \quad \overrightarrow{A_{14}} \quad \overrightarrow{A_{15}}]} \quad \text{et} \quad w = \frac{[\overrightarrow{A_{12}} \quad \overrightarrow{A_{14}} \quad \overrightarrow{A_1P}]}{[\overrightarrow{A_{12}} \quad \overrightarrow{A_{14}} \quad \overrightarrow{A_{15}}]}.$$

**Cas général.** Dans ce cas, on part de la Relation (17) et on chasse les termes afin d'obtenir un système facile à résoudre. Comme  $\overrightarrow{A_{uvw}} \neq 0$ , on obtient d'abord

$$\overrightarrow{A_1 P} \wedge \overrightarrow{A_{uvw}} = uv \overrightarrow{A_{uv}} \wedge \overrightarrow{A_{uvw}} + uv \overrightarrow{A_{uv}} \wedge \overrightarrow{A_{uvw}} + v \overrightarrow{A_{vw}} \wedge \overrightarrow{A_{uvw}} + u \overrightarrow{A_{12}} \wedge \overrightarrow{A_{uvw}} + v \overrightarrow{A_{14}} \wedge \overrightarrow{A_{uvw}} + w \overrightarrow{A_{15}} \wedge \overrightarrow{A_{uvw}},$$

si  $\overrightarrow{A_{uv}} \neq 0$ , on fait de même, de proche en proche, il reste

$$\begin{aligned} \overrightarrow{A_1 P} \wedge \overrightarrow{A_{uvw}} \wedge \overrightarrow{A_{uv}} \wedge \overrightarrow{A_{uv}} \wedge \overrightarrow{A_{vw}} &= u \overrightarrow{A_{12}} \wedge \overrightarrow{A_{uvw}} \wedge \overrightarrow{A_{uv}} \wedge \overrightarrow{A_{uv}} \wedge \overrightarrow{A_{vw}} + v \overrightarrow{A_{14}} \wedge \overrightarrow{A_{uvw}} \wedge \overrightarrow{A_{uv}} \wedge \overrightarrow{A_{uv}} \wedge \overrightarrow{A_{vw}} \\ &\quad + w \overrightarrow{A_{15}} \wedge \overrightarrow{A_{uvw}} \wedge \overrightarrow{A_{uv}} \wedge \overrightarrow{A_{uv}} \wedge \overrightarrow{A_{vw}}, \end{aligned}$$

et, par suite, on a la solution comme ci-dessus. Par exemple, pour  $u$ , on trouve :

$$u = \frac{[\overrightarrow{A_1 P} \wedge \overrightarrow{A_{uvw}} \wedge \overrightarrow{A_{uv}} \wedge \overrightarrow{A_{uv}} \wedge \overrightarrow{A_{vw}} \overrightarrow{A_{14}} \wedge \overrightarrow{A_{uvw}} \wedge \overrightarrow{A_{uv}} \wedge \overrightarrow{A_{uv}} \wedge \overrightarrow{A_{vw}} \overrightarrow{A_{15}} \wedge \overrightarrow{A_{uvw}} \wedge \overrightarrow{A_{uv}} \wedge \overrightarrow{A_{uv}} \wedge \overrightarrow{A_{vw}}]}{[\overrightarrow{A_{12}} \wedge \overrightarrow{A_{uvw}} \wedge \overrightarrow{A_{uv}} \wedge \overrightarrow{A_{uv}} \wedge \overrightarrow{A_{vw}} \overrightarrow{A_{14}} \wedge \overrightarrow{A_{uvw}} \wedge \overrightarrow{A_{uv}} \wedge \overrightarrow{A_{uv}} \wedge \overrightarrow{A_{vw}} \overrightarrow{A_{15}} \wedge \overrightarrow{A_{uvw}} \wedge \overrightarrow{A_{uv}} \wedge \overrightarrow{A_{uv}} \wedge \overrightarrow{A_{vw}}]}.$$

À noter que cette (élégante) formule est numériquement peu robuste, on préférera trouver la solution via une dichotomie.

## 5 Élément fini hexaédrique de degré 2, le Q2 à 27 nœuds

**Numérotation des nœuds.** La convention<sup>7</sup> de numérotation des nœuds est la suivante, les 8 sommets en premier (1 à 8), les 4 nœuds "milieux" des arêtes de la face du bas (9 à 12), les 4 nœuds "milieux" des arêtes des faces latérales (13 à 16), les 4 nœuds "milieux" des arêtes de la face du haut (17 à 20), les 6 nœuds "centraux" des faces (21 à 26) et, enfin, le nœud "central" (27), soit le schéma suivant, coupes de bas (à gauche) en haut (à droite) :

4	11	3	16	26	15	8	19	7
12	21	10	22	27	25	20	24	18
1	9	2	13	23	14	5	17	6

**Les 27 polynômes de base de l'élément.** L'élément de référence est choisi comme  $\hat{K} = [-1, 1] \times [-1, 1] \times [-1, 1]$ . Les polynômes de base correspondant à la convention de numérotation sont les suivants :

$$\begin{aligned} -p_1 &= -\frac{1}{8} \hat{x} \hat{y} \hat{z} (1 - \hat{x})(1 - \hat{y})(1 - \hat{z}), \\ -p_2 &= \frac{1}{8} \hat{x} \hat{y} \hat{z} (1 + \hat{x})(1 - \hat{y})(1 - \hat{z}), \\ -p_3 &= -\frac{1}{8} \hat{x} \hat{y} \hat{z} (1 + \hat{x})(1 + \hat{y})(1 - \hat{z}), \\ -p_4 &= \frac{1}{8} \hat{x} \hat{y} \hat{z} (1 - \hat{x})(1 + \hat{y})(1 - \hat{z}), \\ -p_5 &= \frac{1}{8} \hat{x} \hat{y} \hat{z} (1 - \hat{x})(1 - \hat{y})(1 + \hat{z}), \\ -p_6 &= -\frac{1}{8} \hat{x} \hat{y} \hat{z} (1 + \hat{x})(1 - \hat{y})(1 + \hat{z}), \\ -p_7 &= \frac{1}{8} \hat{x} \hat{y} \hat{z} (1 + \hat{x})(1 + \hat{y})(1 + \hat{z}), \\ -p_8 &= -\frac{1}{8} \hat{x} \hat{y} \hat{z} (1 - \hat{x})(1 + \hat{y})(1 + \hat{z}), \\ -p_9 &= \frac{1}{4} (1 + \hat{x})(1 - \hat{x}) \hat{y} (1 - \hat{y}) \hat{z} (1 - \hat{z}), \\ -p_{10} &= -\frac{1}{4} \hat{x} (1 + \hat{x})(1 - \hat{y})(1 + \hat{y}) \hat{z} (1 - \hat{z}), \\ -p_{11} &= -\frac{1}{4} (1 - \hat{x})(1 + \hat{x}) \hat{y} (1 + \hat{y}) \hat{z} (1 - \hat{z}), \\ -p_{12} &= \frac{1}{4} \hat{x} (1 - \hat{x})(1 - \hat{y})(1 + \hat{y}) \hat{z} (1 - \hat{z}), \\ -p_{13} &= \frac{1}{4} \hat{x} \hat{y} (1 - \hat{x})(1 - \hat{y})(1 - \hat{z}^2), \\ -p_{14} &= -\frac{1}{4} \hat{x} \hat{y} (1 + \hat{x})(1 - \hat{y})(1 - \hat{z}^2), \\ -p_{15} &= \frac{1}{4} \hat{x} \hat{y} (1 + \hat{x})(1 + \hat{y})(1 - \hat{z}^2), \\ -p_{16} &= -\frac{1}{4} \hat{x} \hat{y} (1 - \hat{x})(1 + \hat{y})(1 - \hat{z}^2), \\ -p_{17} &= -\frac{1}{4} (1 + \hat{x})(1 - \hat{x}) \hat{y} (1 - \hat{y}) \hat{z} (1 + \hat{z}), \\ -p_{18} &= \frac{1}{4} \hat{x} (1 + \hat{x})(1 - \hat{y})(1 + \hat{y}) \hat{z} (1 + \hat{z}), \end{aligned}$$

<sup>7</sup>Il ne s'agit que d'une convention, assez naturelle pour les 20 premiers nœuds et le dernier, choisie arbitrairement pour les nœuds de 21 à 26, en fait, on suit ici la numérotation des faces du code Modulf.



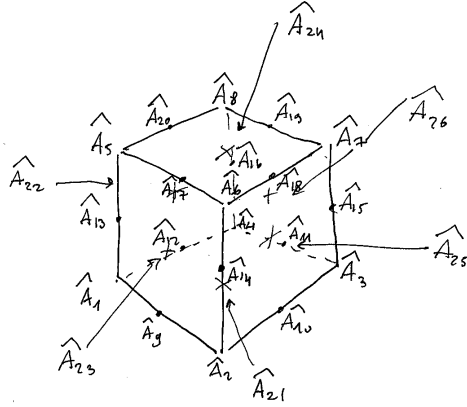


FIG. 10 – Numérotation des nœuds de l'hexaèdre de référence à 27 nœuds, le nœud  $\hat{A}_{27}$ , nœud "central" n'est pas montré.

$$\begin{aligned}
- p_{19} &= \frac{1}{4}(1 - \hat{x})(1 + \hat{x})\hat{y}(1 + \hat{y})\hat{z}(1 + \hat{z}), \\
- p_{20} &= -\frac{1}{4}\hat{x}(1 - \hat{x})(1 - \hat{y})(1 + \hat{y})\hat{z}(1 + \hat{z}), \\
- p_{23} &= -\frac{1}{2}(1 + \hat{x})(1 - \hat{x})\hat{y}(1 - \hat{y})(1 - \hat{z}^2), \\
- p_{25} &= \frac{1}{2}\hat{x}(1 + \hat{x})(1 - \hat{y})(1 + \hat{y})(1 - \hat{z}^2), \\
- p_{26} &= \frac{1}{2}(1 - \hat{x})(1 + \hat{x})\hat{y}(1 + \hat{y})(1 - \hat{z}^2), \\
- p_{22} &= -\frac{1}{2}\hat{x}(1 - \hat{x})(1 - \hat{y})(1 + \hat{y})(1 - \hat{z}^2), \\
- p_{21} &= -\frac{1}{2}(1 - \hat{x})(1 + \hat{x})(1 - \hat{y})(1 + \hat{y})\hat{z}(1 - \hat{z}), \\
- p_{24} &= \frac{1}{2}(1 - \hat{x})(1 + \hat{x})(1 - \hat{y})(1 + \hat{y})\hat{z}(1 + \hat{z}), \\
- p_{27} &= (1 - \hat{x})(1 + \hat{x})(1 - \hat{y})(1 + \hat{y})(1 - \hat{z}^2).
\end{aligned}$$

Il peut sembler fastidieux d'établir cette liste, en fait, on part du quadrilatère plan à 9 nœuds et on le "tensorise" dans la troisième direction au degré 2, ce qui est mécanique.

La transformation  $F_K$  permettant de passer de  $\hat{K}$  à  $K$ , l'élément courant de nœuds  $A_i$ , est  $F_K(\hat{M}) = \sum_{i=1,27} p_i(\hat{M})A_i$  avec  $\hat{M}$  le point de coordonnées  $\hat{x}$ ,  $\hat{y}$  et  $\hat{z}$  dans  $\hat{K}$ .

**Les arêtes sont des arcs de parabole.** Il est facile de voir que dans ces cas  $F_K$  se réduit à une courbe de Bézier de degré 2. Ainsi, pour  $\hat{y} = -1$  et  $\hat{z} = -1$ , seuls contribuent dans  $F_K$ ,  $p_1, p_2$  et  $p_9$  et on a  $p_1 = -\frac{1}{2}\hat{x}(1 - \hat{x})$ ,  $p_2 = -\frac{1}{2}\hat{x}(1 + \hat{x})$  et  $p_9 = (1 + \hat{x})(1 - \hat{x})$ , par suite

$$F_K = -\frac{1}{2}\hat{x}(1 - \hat{x})A_1 - (1 + \hat{x})(1 - \hat{x})A_9 - \frac{1}{2}\hat{x}(1 + \hat{x})A_2,$$

sur  $[-1, +1]$ , soit

$$F_K = (1 - \hat{x})(1 - 2\hat{x})A_1 + 4\hat{x}(1 - \hat{x})A_9 + \hat{x}(2\hat{x} - 1)A_2$$

sur  $[0, 1]$  qui est le résultat attendu. Pour le cas  $\hat{x} = \hat{y} = -1$ , on trouve les contributions de  $p_1 = -\frac{1}{2}\hat{z}(1 - \hat{z})$ ,  $p_5 = \frac{1}{2}\hat{z}(1 + \hat{z})$  et  $p_{13} = (1 - \hat{z}^2)$  et  $F_k$  par suite

$$F_K = -\frac{1}{2}\hat{z}(1 - \hat{z})A_1 + (1 - \hat{z}^2)A_{13} + \frac{1}{2}\hat{z}(1 + \hat{z})A_5,$$

sur  $[-1, +1]$ , soit

$$F_k = (1 - \hat{z})(1 - 2\hat{z})A_1 + 4\hat{z}(1 - \hat{z})A_{13} + \hat{z}(2\hat{z} - 1)A_5$$

sur  $[0, 1]$  qui est le résultat attendu.

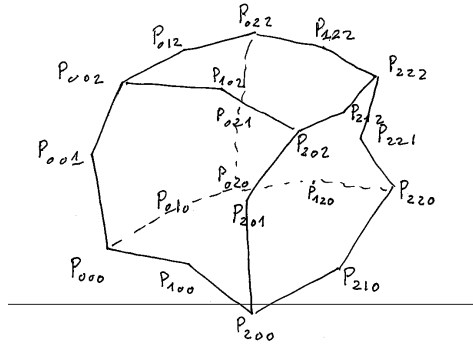


FIG. 11 – Numérotation des points de contrôle de l'hexaèdre courant, on ne montre que les points des arêtes. On devine, lorsque le point de contrôle, milieu d'une arête, n'est pas sur l'arête droite, la forme courbe de cette arête.

**Forme Bézier de l'élément.** On se place directement dans le cadre Bézier, on part donc de la Relation (12), à savoir

$$\theta(u, v, w) = \sum_{i=0,2} \sum_{j=0,2} \sum_{k=0,2} B_i^2(u) B_j^2(v) B_k^2(w) P_{ijk}.$$

Les points de contrôle sont les huit sommets, les 12 points de contrôle des arêtes, les 6 points "centraux" des faces et le point "central", soient 27 points de contrôle qui sont associés, et réciproquement, aux 27 nœuds de l'élément fini.

La numérotation, donc l'agencement des points de contrôle, est ici non arbitraire (cf. ci-dessus pour la numérotation éléments finis). Le réseau, de bas (à gauche) en haut (à droite) est le suivant (et donne la correspondance entre les  $A_i$ , les sommets, les  $C_i$ , les points de contrôle autres, et les  $P_{ijk}$ ) :

P020	P120	P220	P021	P121	P221	P022	P122	P222
P010	P110	P210	P011	P111	P211	P012	P112	P212
P000	P100	P200	P001	P101	P201	P002	P102	P202

## 5.1 Les dérivées et le jacobien

Pour trouver la dérivée, par exemple en  $u$ , on ouvre  $\theta(u, v, w)$  en  $u$ , il vient :

$$\frac{\partial \theta(u, v, w)}{\partial u} = \sum_{j=0,2} \sum_{k=0,2} B_j^2(v) B_k^2(w) (B_0^{2'}(u) P_{0jk} + B_1^{2'}(u) P_{1jk} + B_2^{2'}(u) P_{2jk}).$$

En calculant les dérivées de  $B_i^2(u)$  puis en regroupant les termes et en posant

$$\Delta_{ijk}^{100} = \overrightarrow{P_{ijk} P_{i+1jk}},$$

il vient :

$$\frac{\partial \theta(u, v, w)}{\partial u} = 2 \sum_{i=0,1} \sum_{j=0,2} \sum_{k=0,2} B_i^1(u) B_j^2(v) B_k^2(w) \Delta_{ijk}^{100}.$$

De même on a :

$$\frac{\partial \theta(u, v, w)}{\partial v} = 2 \sum_{i=0,2} \sum_{j=0,1} \sum_{k=0,2} B_i^2(u) B_j^1(v) B_k^2(w) \Delta_{ijk}^{010}$$

et

$$\frac{\partial \theta(u, v, w)}{\partial w} = 2 \sum_{i=0,2} \sum_{j=0,2} \sum_{k=0,1} B_i^2(u) B_j^2(v) B_k^1(w) \Delta_{ijk}^{001}.$$

avec  $\Delta_{ijk}^{010} = \overrightarrow{P_{ijk} P_{ij+1k}}$  et  $\Delta_{ijk}^{001} = \overrightarrow{P_{ijk} P_{ijk+1}}$ . La définition même du jacobien est la suivante, c'est le déterminant :

$$\mathcal{J}(u, v, w) = \left| \frac{\partial \theta(u, v, w)}{\partial u} \quad \frac{\partial \theta(u, v, w)}{\partial v} \quad \frac{\partial \theta(u, v, w)}{\partial w} \right|,$$

soit

$$8 \left| \sum_{i=0,1} \sum_{j=0,2} \sum_{k=0,2} B_i^1(u) B_j^2(v) B_k^2(w) \Delta_{ijk}^{100} \quad \sum_{i=0,2} \sum_{j=0,1} \sum_{k=0,2} B_i^2(u) B_j^1(v) B_k^2(w) \Delta_{ijk}^{010} \quad \sum_{i=0,2} \sum_{j=0,2} \sum_{k=0,1} B_i^2(u) B_j^2(v) B_k^1(w) \Delta_{ijk}^{001} \right|. \quad (18)$$

## 5.2 Quelques jacobiens particuliers

**En un sommet.** Par l'exemple en  $(u, v, w) = (0, 0, 0)$ , l'expression (18) se réduit à

$$\mathcal{J}(0, 0, 0) = 8 \left| B_i^1(0) B_j^2(0) B_k^2(0) \Delta_{ijk}^{100} \quad B_i^2(0) B_j^1(0) B_k^2(0) \Delta_{ijk}^{010} \quad B_i^2(0) B_j^2(0) B_k^1(0) \Delta_{ijk}^{001} \right|,$$

avec  $i = j = k = 0$ , soit

$$\mathcal{J}(0, 0, 0) = 8 \left| \Delta_{000}^{100} \quad \Delta_{000}^{010} \quad \Delta_{000}^{001} \right|,$$

soit, en fonction des  $P_{ijk}$  :

$$\mathcal{J}(0, 0, 0) = 8 \left| \overrightarrow{P_{000} P_{100}} \quad \overrightarrow{P_{000} P_{010}} \quad \overrightarrow{P_{000} P_{001}} \right|,$$

qui, en numérotation en  $A_i$  et en  $C_i$ , s'écrit :

$$\mathcal{J}(0, 0, 0) = \mathcal{J}(\hat{A}_1) = 8 \left| \overrightarrow{A_1 C_9} \quad \overrightarrow{A_1 C_{12}} \quad \overrightarrow{A_1 C_{13}} \right|,$$

où le point  $C_9$  est le point de contrôle de l'arête  $A_1 A_2$ , etc. Comme pour tous les éléments de degré 2, un jacobien coin contrôle l'angle entre les tangentes des arêtes incidentes au sommet correspondant ou, autrement dit, entre les trois plans tangents au sommet considéré. Géométriquement, le jacobien correspond au volume à un facteur près du tétraèdre de sommet le sommet considéré et les trois points de contrôle adjacents.

**Sur une arête.** Par l'exemple en  $(v, w) = (0, 0)$ , l'expression (18) se réduit à

$$\mathcal{J}(u, 0, 0) = 8 \left| \sum_{i=0,1} B_i^1(u) \Delta_{i00}^{100} \quad \sum_{i=0,2} B_i^2(u) \Delta_{i00}^{010} \quad \sum_{i=0,2} B_i^2(u) \Delta_{i00}^{001} \right|,$$

mais, compte tenu des propriétés des polynômes de Bernstein, cela va s'écrire plus simplement encore comme :

$$\mathcal{J}(u, 0, 0) = \sum_{i=0,5} B_i^5(u) N_{i00},$$

avec les polynômes de degré 5, soit 6 termes. Il reste donc à calculer les 6 coefficients  $N_{i00}$ . On a successivement :

$$\mathcal{J}(u, 0, 0) = 8 \sum_{i=0,1} B_i^1(u) \sum_{j=0,2} B_j^2(u) \sum_{k=0,2} B_k^2(u) \left| \Delta_{i00}^{100} \quad \Delta_{j00}^{010} \quad \Delta_{k00}^{001} \right|,$$

qui s'écrit :

$$\mathcal{J}(u, 0, 0) = 8 \sum_{I=0,5} \sum_{i_1+i_2+i_3=I} \frac{C_{i_1}^1 C_{i_2}^2 C_{i_3}^2}{C_I^5} B_{i_1+i_2+i_3}^5(u) \left| \Delta_{i_1 00}^{100} \quad \Delta_{i_2 00}^{010} \quad \Delta_{i_3 00}^{001} \right|,$$

Par suite, on a :

$$\mathcal{J}(u, 0, 0) = 8 \sum_{I=0,5} B_I^5(u) \sum_{i_1+i_2+i_3=I} \frac{C_{i_1}^1 C_{i_2}^2 C_{i_3}^2}{C_I^5} |\Delta_{i_1 00}^{100} \quad \Delta_{i_2 00}^{010} \quad \Delta_{i_3 00}^{001}|,$$

et, ainsi :

$$N_{i00} = 8 \sum_{i_1+i_2+i_3=i} \frac{C_{i_1}^1 C_{i_2}^2 C_{i_3}^2}{C_i^5} |\Delta_{i_1 00}^{100} \quad \Delta_{i_2 00}^{010} \quad \Delta_{i_3 00}^{001}|.$$

Pour  $i = 0$ , on a  $i_1 = i_2 = i_3 = 0$  et on retrouve

$$N_{000} = 8 |\Delta_{000}^{100} \quad \Delta_{000}^{010} \quad \Delta_{000}^{001}|,$$

c'est-à-dire  $\mathcal{J}(\hat{A}_1)$ . Pour  $i = 5$ , on a  $i_1 = 1$  et  $i_2 = i_3 = 2$  et on trouve

$$N_{500} = 8 |\Delta_{100}^{100} \quad \Delta_{200}^{010} \quad \Delta_{200}^{001}| = 8 |\overrightarrow{P_{100}P_{200}} \quad \overrightarrow{P_{200}P_{210}} \quad \overrightarrow{P_{200}P_{201}}| = 8 |\overrightarrow{C_9A_2} \quad \overrightarrow{A_2C_{10}} \quad \overrightarrow{A_2C_{14}}|,$$

c'est-à-dire, comme attendu,  $\mathcal{J}(\hat{A}_2)$ .

Ainsi  $N_{000}$  et  $N_{500}$  comprennent 1 seul terme, le jacobien coin correspondant,  $N_{100}$  et  $N_{400}$  comprennent 3 termes tandis que  $N_{300}$  et  $N_{400}$  comprennent 5 termes.

L'interprétation géométrique de  $N_{000}$  et  $N_{500}$  est immédiate, c'est le volume du tétraèdre coin construit sur le sommet et ses points de contrôle adjacents. Pour les autres coefficients, c'est moins évident.

$N_{100}$  et  $N_{400}$  jouent le même rôle. Regardons  $N_{100}$ . On a :

$$N_{100} = 8 \sum_{i_1+i_2+i_3=1} \frac{C_{i_1}^1 C_{i_2}^2 C_{i_3}^2}{C_1^5} |\Delta_{i_1 00}^{100} \quad \Delta_{i_2 00}^{010} \quad \Delta_{i_3 00}^{001}|,$$

soit les trois termes, pour les triplets  $(0, 0, 1)$ ,  $(0, 1, 0)$  et  $(1, 0, 0)$  :

$$8 \left( \frac{C_0^1 C_0^2 C_1^2}{C_1^5} |\Delta_{000}^{100} \quad \Delta_{000}^{010} \quad \Delta_{100}^{001}| + \frac{C_0^1 C_1^2 C_0^2}{C_1^5} |\Delta_{000}^{100} \quad \Delta_{100}^{010} \quad \Delta_{000}^{001}| + \frac{C_1^1 C_0^2 C_0^2}{C_1^5} |\Delta_{100}^{100} \quad \Delta_{000}^{010} \quad \Delta_{000}^{001}| \right),$$

ou encore

$$8 \left( \frac{2}{5} |\Delta_{000}^{100} \quad \Delta_{000}^{010} \quad \Delta_{100}^{001}| + \frac{2}{5} |\Delta_{000}^{100} \quad \Delta_{100}^{010} \quad \Delta_{000}^{001}| + \frac{1}{5} |\Delta_{100}^{100} \quad \Delta_{000}^{010} \quad \Delta_{000}^{001}| \right),$$

$$\frac{8}{5} (2 |\Delta_{000}^{100} \quad \Delta_{000}^{010} \quad \Delta_{100}^{001}| + 2 |\Delta_{000}^{100} \quad \Delta_{100}^{010} \quad \Delta_{000}^{001}| + |\Delta_{100}^{100} \quad \Delta_{000}^{010} \quad \Delta_{000}^{001}|),$$

en fonction des  $P_{ijk}$ , on trouve :

$$\frac{8}{5} \left( 2 |\overrightarrow{P_{000}P_{100}} \quad \overrightarrow{P_{000}P_{010}} \quad \overrightarrow{P_{100}P_{101}}| + 2 |\overrightarrow{P_{000}P_{100}} \quad \overrightarrow{P_{100}P_{110}} \quad \overrightarrow{P_{000}P_{001}}| + |\overrightarrow{P_{100}P_{200}} \quad \overrightarrow{P_{000}P_{010}} \quad \overrightarrow{P_{000}P_{001}}| \right),$$

et, en  $A_i$  et  $C_i$  :

$$\frac{8}{5} \left( 2 |\overrightarrow{A_1C_9} \quad \overrightarrow{A_1C_{12}} \quad \overrightarrow{C_9C_{23}}| + 2 |\overrightarrow{A_1C_9} \quad \overrightarrow{C_9C_{21}} \quad \overrightarrow{A_1C_{13}}| + |\overrightarrow{C_9A_2} \quad \overrightarrow{A_1C_{12}} \quad \overrightarrow{A_1C_{13}}| \right).$$

Ce terme ressemble furieusement aux termes correspondants trouvé pour le quadrilatère Q2 avec des contributions des arêtes incidentes ou éloignées pondérées par des poids en accord. Pour  $N_{400}$  on a la même forme et des poids inversés (l'arête  $A_1C_9$  aura le poids 1 ici et l'arête  $A_2C_9$  le poids 2).

Il reste à voir  $N_{200}$  et  $N_{400}$  qui sont analogues. Regardons  $N_{200}$ . On a :

$$N_{200} = 8 \sum_{i_1+i_2+i_3=2} \frac{C_{i_1}^1 C_{i_2}^2 C_{i_3}^2}{C_2^5} |\Delta_{i_1 00}^{100} \quad \Delta_{i_2 00}^{010} \quad \Delta_{i_3 00}^{001}|,$$

soit les cinq termes, pour les triplets  $(0, 0, 2)$ ,  $(1, 0, 1)$ ,  $(0, 1, 1)$ ,  $(1, 1, 0)$  et  $(0, 2, 0)$  :

$$8 \left( \frac{C_0^1 C_0^2 C_2^2}{C_2^5} |\Delta_{000}^{100} \quad \Delta_{000}^{010} \quad \Delta_{200}^{001}| + \frac{C_1^1 C_0^2 C_1^2}{C_2^5} |\Delta_{100}^{100} \quad \Delta_{000}^{010} \quad \Delta_{100}^{001}| \frac{C_0^1 C_1^2 C_1^2}{C_2^5} |\Delta_{000}^{100} \quad \Delta_{100}^{010} \quad \Delta_{100}^{001}| \right. \\ \left. + \frac{C_1^1 C_1^2 C_0^2}{C_2^5} |\Delta_{100}^{100} \quad \Delta_{100}^{010} \quad \Delta_{000}^{001}| + \frac{C_0^1 C_2^2 C_0^2}{C_2^5} |\Delta_{000}^{100} \quad \Delta_{200}^{010} \quad \Delta_{000}^{001}| \right).$$

soit :

$$\frac{8}{10} \left( |\Delta_{000}^{100} \quad \Delta_{000}^{010} \quad \Delta_{200}^{001}| + 2 |\Delta_{100}^{100} \quad \Delta_{000}^{010} \quad \Delta_{100}^{001}| + 4 |\Delta_{000}^{100} \quad \Delta_{100}^{010} \quad \Delta_{100}^{001}| \right. \\ \left. + 2 |\Delta_{100}^{100} \quad \Delta_{100}^{010} \quad \Delta_{000}^{001}| + |\Delta_{000}^{100} \quad \Delta_{200}^{010} \quad \Delta_{000}^{001}| \right).$$

soit, en fonction des  $P_{ijk}$  :

$$\frac{8}{10} \left( |\overrightarrow{P_{000}P_{100}} \quad \overrightarrow{P_{000}P_{010}} \quad \overrightarrow{P_{200}P_{201}}| + 2 |\overrightarrow{P_{100}P_{200}} \quad \overrightarrow{P_{000}P_{010}} \quad \overrightarrow{P_{100}P_{101}}| + 4 |\overrightarrow{P_{000}P_{100}} \quad \overrightarrow{P_{100}P_{110}} \quad \overrightarrow{P_{100}P_{101}}| \right. \\ \left. + 2 |\overrightarrow{P_{100}P_{200}} \quad \overrightarrow{P_{100}P_{110}} \quad \overrightarrow{P_{000}P_{001}}| + |\overrightarrow{P_{000}P_{100}} \quad \overrightarrow{P_{200}P_{210}} \quad \overrightarrow{P_{000}P_{001}}| \right),$$

et, en  $A_i$  et  $C_i$  :

$$\frac{8}{10} \left( |\overrightarrow{A_1C_9} \quad \overrightarrow{A_1C_{12}} \quad \overrightarrow{A_2C_{14}}| + 2 |\overrightarrow{C_9A_2} \quad \overrightarrow{A_1C_{12}} \quad \overrightarrow{C_9C_{23}}| + 4 |\overrightarrow{A_1C_9} \quad \overrightarrow{C_9C_{21}} \quad \overrightarrow{C_9C_{23}}| \right. \\ \left. + 2 |\overrightarrow{C_9A_2} \quad \overrightarrow{C_9C_{21}} \quad \overrightarrow{A_1C_{13}}| + |\overrightarrow{A_1C_9} \quad \overrightarrow{A_2C_{10}} \quad \overrightarrow{A_1C_{13}}| \right).$$

Pour  $N_{300}$ , on a la même forme, avec un rôle symétrique de l'arête  $A_2C_9$  vis à vis de  $A_1C_9$ .

**Sur une face.** Par l'exemple en  $w = o$ , l'expression (18) se réduit à

$$8 \left| \sum_{i=0,1} \sum_{j=0,2} B_i^1(u) B_j^2(v) \Delta_{ij0}^{100} \quad \sum_{i=0,2} \sum_{j=0,1} B_i^2(u) B_j^1(v) \Delta_{ij0}^{010} \quad \sum_{i=0,2} \sum_{j=0,2} B_i^2(u) B_j^2(v) \Delta_{ij0}^{001} \right|.$$

Comme ci-dessus, ceci s'exprime comme

$$\mathcal{J}(u, v, 0) = \sum_{i=0,5} \sum_{j=0,5} B_i^5(u) B_j^5(v) N_{ij0},$$

avec des polynômes de degré 5, soit 36 coefficients. Les coefficients  $N_{ij0}$  s'obtiennent comme ci-dessus, suivant l'expression générique qui va être calculée plus bas après avoir rappelé l'expression générique.

L'interprétation géométrique des coefficients est, pour ceux des arêtes, comme ci-dessus, celle du coefficient "central" est peu évidente et nous n'en dirons pas plus.

### 5.3 Le jacobien et ses coefficients de contrôle

L'expression générale du jacobien est la suivante :

$$\mathcal{J}(u, v, w) = \sum_{i=0,5} \sum_{j=0,5} \sum_{k=0,5} B_i^5(u) B_j^5(v) B_k^5(w) N_{ijk},$$

qui comprend donc 216 coefficients de contrôle. La forme générique des coefficients est la suivante :

$$N_{ijk} = 8 \sum_{i_1+i_2+i_3=i} \sum_{j_1+j_2+j_3=j} \sum_{k_1+k_2+k_3=k} \frac{C_{i_1}^1 C_{i_2}^2 C_{i_3}^2 C_{j_1}^2 C_{j_2}^1 C_{j_3}^2 C_{k_1}^2 C_{k_2}^2 C_{k_3}^1}{C_i^5 C_j^5 C_k^5} |\Delta_{i_1 j_1 k_1}^{100} \quad \Delta_{i_2 j_2 k_2}^{010} \quad \Delta_{i_3 j_3 k_3}^{001}|.$$

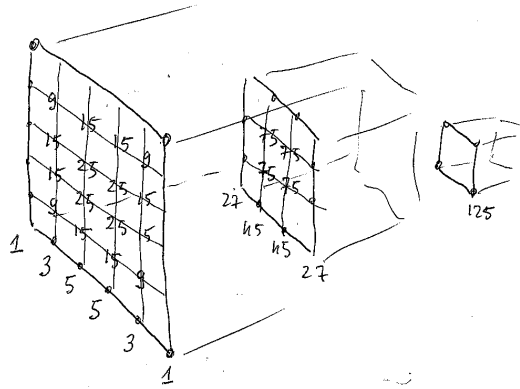


FIG. 12 – Le nombre de termes entrant dans les combinaisons linéaires constitutives des coefficients de contrôle.

En partant de cette formule générale, on va exhiber un coefficient de face, ici  $N_{101}$ . Tout calcul fait, on trouve, au facteur 8 près :

$$\begin{aligned}
 N_{101} = & \frac{4}{25} |\overrightarrow{A_1 C_9} \quad \overrightarrow{C_{23} C_{27}} \quad \overrightarrow{A_1 C_{13}}| + \frac{4}{25} |\overrightarrow{A_1 C_9} \quad \overrightarrow{C_{13} C_{22}} \quad \overrightarrow{C_9 C_{23}}| + \frac{2}{25} |\overrightarrow{A_1 C_9} \quad \overrightarrow{C_9 C_{21}} \quad \overrightarrow{C_{13} A_5}| \\
 & + \frac{2}{25} |\overrightarrow{A_1 C_9} \quad \overrightarrow{A_1 C_{12}} \quad \overrightarrow{C_{23} C_{17}}| \\
 & + \frac{2}{25} |\overrightarrow{C_9 A_2} \quad \overrightarrow{C_{13} C_{22}} \quad \overrightarrow{A_1 C_{13}}| + \frac{1}{25} |\overrightarrow{C_9 A_2} \quad \overrightarrow{A_1 C_{12}} \quad \overrightarrow{C_{13} A_5}| \\
 & + \frac{4}{25} |\overrightarrow{C_{13} C_{23}} \quad \overrightarrow{C_9 C_{21}} \quad \overrightarrow{A_1 C_{13}}| + \frac{4}{25} |\overrightarrow{C_{13} C_{23}} \quad \overrightarrow{A_1 C_{12}} \quad \overrightarrow{C_9 C_{23}}| + \frac{2}{25} |\overrightarrow{C_{23} C_{24}} \quad \overrightarrow{A_1 C_{12}} \quad \overrightarrow{A_1 C_{13}}|,
 \end{aligned}$$

les autres coefficients similaires s'expriment de façon analogue, voir également ci-dessous, les différents types de coefficients de face.

**Sur les termes constitutifs des coefficients.** On va vérifier que le nombre de termes (volumes) des coefficients est de 5832 soit  $18 \times 18 \times 18$ , c'est-à-dire toutes les combinaisons possibles entre les 18 vecteurs de chaque direction. On symbolise l'agencement des coefficients sur un cube, voir la figure, et on analyse chaque coefficient pour en donner le nombre de termes. En premier on regarde les faces de ce cube complet. On découvre successivement :

- les coins où le coefficient n'a qu'un terme, le volume du tétraèdre coin, ceci donne donc, au total, 8 termes, un par sommet,
- les arêtes avec deux coefficients avec 3 termes et deux coefficients avec 5 termes, soit, au total,  $12(6 + 10)$  volumes,
- les 16 coefficients restant qui s'agencent en un carré  $4 \times 4$  dans lequel on a 4 coefficients (les coins) avec 9 termes, 2 coefficients par arête avec 15 termes et 4 coefficients centraux avec 25 termes, soit, au final  $6(4 \times 9 + 8 \times 15 + 4 \times 15)$  termes,

on "épluche" le cube complet pour faire apparaître un sous-cube  $4 \times 4$  où les coefficients sont les suivants :

- aux coins où le coefficient a 27 termes, ceci donne donc, au total,  $8 \times 27$  termes,
- les arêtes avec 2 coefficients avec 45 termes, soit, au total,  $12 \times 2 \times 45$  volumes,
- les 4 coefficients restant qui s'agencent en un carré  $2 \times 2$  dans lequel les 4 coefficients ont 75 termes, soit, au final  $6 \times 4 \times 75$  termes,

on "épluche" le cube ci-dessus pour faire apparaître un sous-cube  $2 \times 2$  où les coefficients ont 125 termes, soit, au final  $8 \times 125$  volumes. En additionnant le nombre de tous les termes trouvés, on trouve exactement 5832.

Une question qui reste pendante, si on suppose que tous les coefficients de la frontière (sommets, arêtes et faces) sont valides, alors est-il nécessaire de calculer les autres coefficients ? À ce jour, nous ne savons pas répondre.

## 5.4 En pratique

Pour valider un élément hexaédrique de degré 2 à 27 nœuds, on calcule d'abord les points de contrôle puis les 8 jacobiens coins. S'ils sont strictement positifs, on calcule alors les 198 coefficients restant qui doivent être positifs ou nuls, bon courage.

## 6 Élément fini hexaédrique de degré 2, le Q2 à 20 nœuds

Cet élément a pour nœuds ses sommets et ses nœuds "milieux" d'arête, soit 8+12, 20 nœuds.

**Numérotation des nœuds.** La convention<sup>8</sup> de numérotation des nœuds est la suivante, les 8 sommets en premier (1 à 8), les 4 nœuds "milieux" des arêtes de la face du bas (9 à 12), les 4 nœuds "milieux" des arêtes des faces latérales (13 à 16), les 4 nœuds "milieux" des arêtes de la face du haut (17 à 20), soit le schéma suivant, coupes de bas (à gauche) en haut (à droite) :

4	11	3	16	15	8	19	7
12		10			20		18
1	9	2	13	14	5	17	6

**Les 20 polynômes de base de l'élément.** L'élément de référence est choisi comme  $\hat{K} = [-1, 1] \times [-1, 1] \times [-1, 1]$ . Les polynômes de base correspondant à la convention de numérotation sont les suivants :

$$\begin{aligned}
-p_1 &= \frac{1}{8}(-2 - \hat{x} - \hat{y} - \hat{z})(1 - \hat{x})(1 - \hat{y})(1 - \hat{z}), \\
-p_2 &= \frac{1}{8}(-2 + \hat{x} - \hat{y} - \hat{z})(1 + \hat{x})(1 - \hat{y})(1 - \hat{z}), \\
-p_3 &= \frac{1}{8}(-2 + \hat{x} + \hat{y} - \hat{z})(1 + \hat{x})(1 + \hat{y})(1 - \hat{z}), \\
-p_4 &= \frac{1}{8}(-2 - \hat{x} + \hat{y} - \hat{z})(1 - \hat{x})(1 + \hat{y})(1 - \hat{z}), \\
-p_9 &= \frac{1}{4}(1 - \hat{x}^2)(1 - \hat{y})(1 - \hat{z}) \\
-p_{10} &= \frac{1}{4}(1 + \hat{x})(1 - \hat{y}^2)(1 - \hat{z}) \\
-p_{11} &= \frac{1}{4}(1 - \hat{x}^2)(1 + \hat{y})(1 - \hat{z}) \\
-p_{12} &= \frac{1}{4}(1 - \hat{x})(1 - \hat{y}^2)(1 - \hat{z}) \\
-p_{13} &= \frac{1}{4}(1 - \hat{x})(1 - \hat{y})(1 - \hat{z}^2) \\
-p_{14} &= \frac{1}{4}(1 + \hat{x})(1 - \hat{y})(1 - \hat{z}^2) \\
-p_{15} &= \frac{1}{4}(1 + \hat{x})(1 + \hat{y})(1 - \hat{z}^2) \\
-p_{16} &= \frac{1}{4}(1 - \hat{x})(1 + \hat{y})(1 - \hat{z}^2) \\
-p_5 &= \frac{1}{8}(-2 - \hat{x} - \hat{y} + \hat{z})(1 - \hat{x})(1 - \hat{y})(1 + \hat{z}), \\
-p_6 &= \frac{1}{8}(-2 + \hat{x} - \hat{y} + \hat{z})(1 + \hat{x})(1 - \hat{y})(1 + \hat{z}), \\
-p_7 &= \frac{1}{8}(-2 + \hat{x} + \hat{y} + \hat{z})(1 + \hat{x})(1 + \hat{y})(1 + \hat{z}), \\
-p_8 &= \frac{1}{8}(-2 - \hat{x} + \hat{y} + \hat{z})(1 - \hat{x})(1 + \hat{y})(1 + \hat{z}), \\
-p_{17} &= \frac{1}{4}(1 - \hat{x}^2)(1 - \hat{y})(1 + \hat{z}) \\
-p_{18} &= \frac{1}{4}(1 + \hat{x})(1 - \hat{y}^2)(1 + \hat{z}) \\
-p_{19} &= \frac{1}{4}(1 - \hat{x}^2)(1 + \hat{y})(1 + \hat{z}) \\
-p_{20} &= \frac{1}{4}(1 - \hat{x})(1 - \hat{y}^2)(1 + \hat{z})
\end{aligned}$$

La transformation  $F_K$  permettant de passer de  $\hat{K}$  à  $K$ , l'élément courant de nœuds  $A_i$ , est  $F_K(\hat{M}) = \sum_{i=1,20} p_i(\hat{M})A_i$  avec  $\hat{M}$  le point de coordonnées  $\hat{x}, \hat{y}$  et  $\hat{z}$  dans  $\hat{K}$ .

**Les arêtes sont des arcs de parabole.** Il est facile, ici aussi, de voir que dans ces cas  $F_K$  se réduit à une courbe de Bézier de degré 2. Ainsi, pour  $\hat{y} = -1$  et  $\hat{z} = -1$ , seuls contribuent

<sup>8</sup>Il ne s'agit que d'une convention, assez naturelle ici.

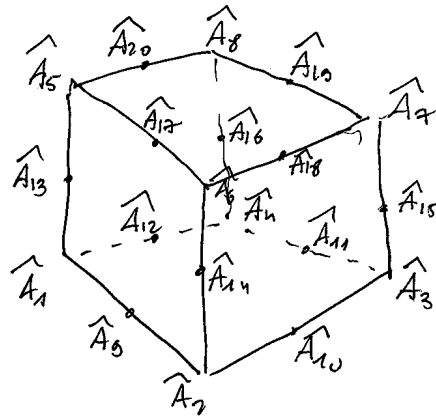


FIG. 13 – Numérotation des nœuds de l'hexaèdre réduit de référence à 20 nœuds.

dans  $F_K$ ,  $p_1, p_2$  et  $p_9$  et on a  $p_1 = -\frac{1}{2}\hat{x}(1 - \hat{x})$ ,  $p_2 = -\frac{1}{2}\hat{x}(1 + \hat{x})$  et  $p_9 = (1 - \hat{x}^2)$ , par suite, on retrouve la même situation que pour l'élément à 27 nœuds et

$$F_K = (1 - \hat{x})(1 - 2\hat{x})A_1 + 4\hat{x}(1 - \hat{x})A_9 + \hat{x}(2\hat{x} - 1)A_2$$

sur  $[0, 1]$ , ce qui est le résultat attendu. Pour le cas  $\hat{x} = \hat{y} = -1$ , on trouve les contributions de  $p_1 = -\frac{1}{2}\hat{z}(1 - \hat{z})$ ,  $p_5 = \frac{1}{2}\hat{z}(1 + \hat{z})$  et  $p_{13} = (1 - \hat{z}^2)$  et on retrouve également la même situation que pour l'élément à 27 nœuds donc

$$F_k = (1 - \hat{z})(1 - 2\hat{z})A_1 + 4\hat{z}(1 - \hat{z})A_{13} + \hat{z}(2\hat{z} - 1)A_5$$

sur  $[0, 1]$ , ce qui est le résultat attendu.

**Forme Bézier de l'élément.** Il n'y a pas de telle écriture, du moins dans sa version complète<sup>9</sup>, nous allons donc prendre la même forme que pour l'élément à 27 nœuds en supposant que les valeurs manquantes sont liées. C'est d'ailleurs comme cela que cet élément peut être construit. On part en effet de l'élément complet et on construit l'élément réduit en imposant des relations entre les nœuds afin d'éliminer 7 d'entre eux, les nœuds "centraux" des faces et le nœud "central".

## 6.1 Construction de cet élément fini

Tout comme le quadrilatère Q2 réduit à 8 nœuds qui correspond à une interpolation transfinie définie à partir des quatre courbes associées aux quatre arêtes, l'hexaèdre Q2 réduit à 20 nœuds se construit par interpolation transfinie. La construction est la suivante :

- on se donne les 12 arêtes comme des courbes de Bézier,
- on définit les 6 faces à partir de leur quatre arêtes,
- on définit l'élément à partir de ses six faces.

**Construction effective.** Pour illustrer cette construction, on donne quelques détails. L'élément est construit sur ses 6 faces,  $\sigma_i(\cdot, \cdot)$ , par interpolation transfinie :

$$\begin{aligned} \theta(u, v, w) = & \frac{1}{2} \left[ (1 - w)\sigma_1(u, v) + (1 - v)\sigma_2(u, w) + (1 - u)\sigma_3(v, w) \right. \\ & + w\sigma_4(u, v) + v\sigma_5(u, w) + u\sigma_6(v, w) \\ & - ((1 - u)(1 - v)(1 - w)A_1 + u(1 - v)(1 - w)A_2 \\ & + uv(1 - w)A_3 + (1 - u)v(1 - w)A_4 + (1 - u)(1 - v)wA_5 \\ & \left. + u(1 - v)wA_6 + uvwA_7 + (1 - u)vwA_8 \right]. \end{aligned} \quad (19)$$



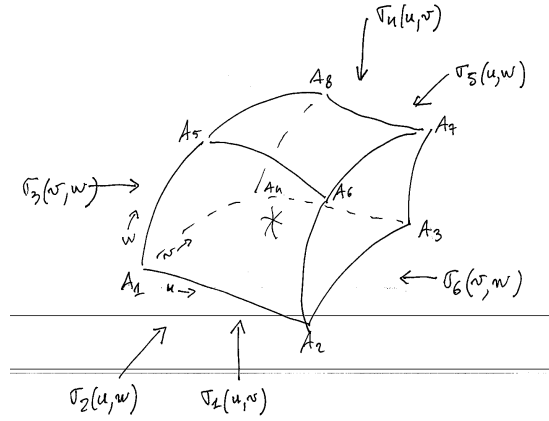


FIG. 14 – Définition de l'élément à partir de ses 6 faces par interpolation transfinie.

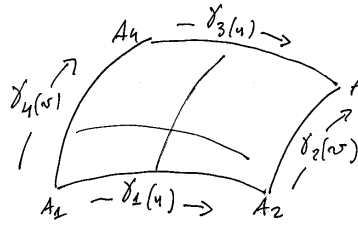


FIG. 15 – Définition d'une face de l'élément, ici la première, à partir de ses 4 arêtes par interpolation transfinie.

Chaque face est construite sur ses 4 arêtes,  $\gamma_i(\cdot)$ , par interpolation transfinie, par exemple pour la première face :

$$\begin{aligned} \sigma_1(u, v) &= (1 - v)\gamma_1(u) + u\gamma_2(v) + v\gamma_3(u) + (1 - u)\gamma_4(v) \\ &- \{(1 - u)(1 - v)A_1 + u(1 - v)A_2 + uvA_3 + (1 - u)vA_4\}. \end{aligned} \quad (20)$$

Chaque arête est une courbe de Bézier de degré 2, par exemple pour la première :

$$\gamma_1(u) = (1 - u)(1 - 2u)A_1 + 4u(1 - u)A_9 + u(2u - 1)A_2,$$

en fonction des nœuds, ou, en fonction des points de contrôle :

$$\gamma_1(u) = (1 - u)^2 A_1 + 2u(1 - u)C_9 + u^2 A_2.$$

**Vérifications immédiates.** On vérifie immédiatement que  $\theta(0, 0, 0) = A_1$ , en effet

$$\begin{aligned} \theta(0, 0, 0) &= \frac{1}{2}[(\sigma_1(0, 0) + \sigma_2(0, 0) + \sigma_3(0, 0) - A_1)] = \frac{1}{2}[(\gamma_1(0) + \gamma_2(0) + \gamma_3(0) - A_1)] \\ &= \frac{1}{2}(A_1 + A_1 + A_1 - A_1) = A_1. \end{aligned}$$

De même  $\theta(u, 0, 0) = \gamma_1(u)$ , en effet

$$\theta(u, 0, 0) = \frac{1}{2}[\sigma_1(u, 0) + \sigma_2(u, 0) + (1 - u)\sigma_3(0, 0) + u\sigma_6(0, 0) - ((1 - u)A_1 + uA_2)].$$

<sup>9</sup>Comme pour le quadrilatère réduit à 8 nœuds, voir [9], on pourrait néanmoins trouver une écriture à la Bézier en prenant des polynômes incomplets.

$$= \frac{1}{2} [\gamma_1(u) + \gamma_1(u) + (1-u)A_1 + uA_2 - ((1-u)A_1 + uA_2)] = \gamma_1(u).$$

De même, pour finir,  $\theta(u, v, 0) = \sigma_1(u, v)$ , en effet

$$\begin{aligned} \theta(u, v, 0) &= \frac{1}{2} [\sigma_1(u, v) + (1-v)\sigma_2(u, 0) + (1-u)\sigma_3(v, 0) + v\sigma_5(u, 0) + u\sigma_6(v, 0) \\ &\quad - ((1-u)(1-v)A_1 + u(1-v)A_2 + uvA_3 + (1-u)vA_4)] . \\ \theta(u, v, 0) &= \frac{1}{2} [\sigma_1(u, v) + (1-v)\gamma_1(u) + (1-u)\gamma_4(v) + v\gamma_3(u) + u\gamma_2(v) \\ &\quad - ((1-u)(1-v)A_1 + u(1-v)A_2 + uvA_3 + (1-u)vA_4)] , \end{aligned}$$

et les 8 derniers termes ne sont autres que  $\sigma_1(u, v)$ , donc

$$\theta(u, v, 0) = \frac{1}{2} [\sigma_1(u, v) + \sigma_1(u, v)] = \sigma_1(u, v).$$

**Identité des deux définitions.** À titre d'exercice, on va montrer que l'on retrouve bien dans cette formulation les polynômes de base listés au départ en prenant le cas du premier,  $p_1$ . Pour ce faire, on regarde dans  $\theta(u, v, w)$  les termes qui contribuent sur  $A_1$ . Il reste uniquement des contributions cachées dans :

$$\frac{1}{2} [(1-w)\sigma_1(u, v) + (1-v)\sigma_2(u, w) + (1-u)\sigma_3(v, w) - (1-u)(1-v)(1-w)A_1] ,$$

on ne retient que les contributions sur  $A_1$  des différents  $\sigma_i$ , il reste alors les contributions cachées dans

$$\begin{aligned} &\frac{1}{2} [(1-w)((1-v)\gamma_1(u) + (1-u)\gamma_4(v) - (1-u)(1-v)A_1) \\ &\quad + (1-v)((1-w)\gamma_1(u) + (1-u)\gamma_9(w) - (1-u)(1-w)A_1) \\ &\quad + (1-u)((1-w)\gamma_4(v) + (1-v)\gamma_9(w) - (1-v)(1-w)A_1) \\ &\quad - (1-u)(1-v)(1-w)A_1] , \end{aligned}$$

soit

$$\begin{aligned} &\frac{1}{2} [(1-w)((1-v)\gamma_1(u) + (1-u)\gamma_4(v)) + (1-v)((1-w)\gamma_1(u) + (1-u)\gamma_9(w)) \\ &\quad + (1-u)((1-w)\gamma_4(v) + (1-v)\gamma_9(w)) - 4(1-u)(1-v)(1-w)A_1] , \end{aligned}$$

et, au final, on ne retient dans les différents  $\gamma_i$  que le terme en  $A_1$ . On a pour  $\gamma_1(u)$  le terme  $(1-u)(1-2u)$ , pour  $\gamma_4(v)$  on a  $(1-v)(1-2v)$  et pour  $\gamma_9(w)$  on a  $(1-w)(1-2w)$ . Il ne reste alors, au facteur  $\frac{1}{2}$  près, que :

$$\begin{aligned} &(1-w)((1-u)(1-v)(1-2u) + (1-u)(1-v)(1-2v)) \\ &\quad + (1-v)((1-u)(1-w)(1-2u) + (1-u)(1-w)(1-2w)) \\ &\quad + (1-u)((1-v)(1-w)(1-2v) + (1-v)(1-w)(1-2w)) \\ &\quad - 4(1-u)(1-v)(1-w) , \end{aligned}$$

que l'on écrit sous la forme

$$\begin{aligned} &(1-u)(1-v)(1-w)((1-2u) + (1-2v) + (1-2u) + (1-2w) + (1-2v) + (1-2w) - 4) , \\ &\quad (1-u)(1-v)(1-w)(2 - 4u - 4v - 4w) , \end{aligned}$$

et, au final, en tenant compte du facteur  $\frac{1}{2}$ , on trouve

$$q_1(u, v, w) = (1 - u)(1 - v)(1 - w) (1 - 2u - 2v - 2w) ,$$

par changement de variable, dilatation de 2 et translation de  $-1$ , on retrouve exactement  $p_1$ . Le même genre de manipulations pour les sept autres des huit premiers polynômes conduit à vérifier que  $q_i(u, v, w) = p_i, i = 1, 8$ .

Pour vérifier les 12 autres polynômes, c'est plus facile, la contribution sur un nœud donné se réduit à considérer les deux faces partageant l'arête support de ce nœud. Par exemple, pour  $A_9$ , donc pour retrouver  $p_9$ , on prend les deux faces  $\sigma_1$  et  $\sigma_2$ , ce qui donne seulement :

$$\frac{1}{2} [(1 - w) \sigma_1(u, v) + (1 - v) \sigma_2(u, w)] ,$$

ensuite, on ne prend que l'arête  $\gamma_1$  de ces deux faces, ce qui donne seulement :

$$\frac{1}{2} [(1 - w) (1 - v) \gamma_1(u) + (1 - v) (1 - w) \gamma_1(u)] ,$$

on regroupe, il reste  $(1 - v)(1 - w) \gamma_1(u)$  et le terme en  $A_9$ , donc  $q_9$ , est  $4u(1 - u)(1 - v)(1 - w)$ , par changement de variable, dilatation de 2 et translation de  $-1$ , on retrouve exactement  $p_9$ . Les 11 autres polynômes s'obtiennent de la même manière. Ceci conduit au résultat attendu, le Q2 à 20 nœuds et l'élément construit par une interpolation transfinie sont identiques.

**Construction par élimination.** Cet élément se construit également par élimination à partir de l'élément complet. En premier on calcule la position de l'image, par la transformation de l'élément réduit des triplets  $(0, 0, -1), (0, 0, 1), (-1, 0, 0), (1, 0, 0), (0, -1, 0), (0, 1, 0)$  puis  $(0, 0, 0)$  et on nomme ces points de  $A_{21}$  à  $A_{26}$  puis  $A_{27}$  pour le dernier. On trouve successivement :

$$A_{21} = -\frac{1}{4}(A_1 + A_2 + A_3 + A_4) + \frac{1}{2}(A_9 + A_{10} + A_{11} + A_{12})$$

$$A_{24} = -\frac{1}{4}(A_5 + A_6 + A_7 + A_8) + \frac{1}{2}(A_{17} + A_{18} + A_{19} + A_{20})$$

$$A_{22} = -\frac{1}{4}(A_1 + A_5 + A_4 + A_8) + \frac{1}{2}(A_{12} + A_{13} + A_{16} + A_{20})$$

$$A_{25} = -\frac{1}{4}(A_2 + A_6 + A_3 + A_7) + \frac{1}{2}(A_{10} + A_{14} + A_{15} + A_{18})$$

$$A_{23} = -\frac{1}{4}(A_1 + A_2 + A_5 + A_6) + \frac{1}{2}(A_{13} + A_{14} + A_9 + A_{17})$$

$$A_{26} = -\frac{1}{4}(A_3 + A_4 + A_8 + A_7) + \frac{1}{2}(A_{11} + A_{15} + A_{16} + A_{19}) ,$$

et, enfin

$$A_{27} = -\frac{1}{4}(A_1 + \dots + A_8) + \frac{1}{4}(A_9 + \dots + A_{20}) ,$$

Ensuite, on construit un élément complet avec les 20 nœuds de notre élément réduit enrichi avec ces 7 nouveaux nœuds. On regarde alors comment les polynômes de la transformation de l'élément complet se regroupent. Il y a uniquement deux cas à examiner, le cas d'un sommet et le cas d'un nœud d'arête. Par exemple  $A_1$  et  $A_9$ . Notons  $q_1$  la contribution liée à  $A_1$ , il est facile de voir que

$$q_1 = p_1 - \frac{1}{4}(p_{21} + p_{22} + p_{23} + p_{27}) ,$$

et, ainsi, tout calcul fait, on trouve

$$q_1 = \frac{1}{8}(-2 - \hat{x} - \hat{y} - \hat{z})(1 - \hat{x})(1 - \hat{y})(1 - \hat{z}) ,$$

qui est le premier polynôme de la transformation de l'élément réduit. Pour  $A_9$ , il est facile de voir que, de même :

$$q_9 = p_9 + \frac{1}{2}(p_{21} + p_{23}) + \frac{1}{4}p_{27},$$

et, ainsi, tout calcul fait, on trouve

$$q_9 = \frac{1}{4}(1 - \hat{x}^2)(1 - \hat{y})(1 - \hat{z}),$$

qui est le neuvième polynôme de la transformation de l'élément réduit. Les autres polynômes se retrouvent de la même façon. En conclusion, l'élément réduit se trouve par élimination à partir de l'élément complet.

Une fois les nœuds manquants construits, on calcule les points de contrôle manquants. Pour ce faire, on dispose de 7 relations avec 7 inconnues. Il est immédiat de voir que les points de contrôle des faces sont découplés et s'obtiennent directement. Le point de contrôle central, quant à lui, est couplé avec tous les autres points de contrôle. Par suite, on évalue en premier les points de contrôle des faces et il ne reste qu'une seule relation avec une seule inconnue à résoudre pour avoir  $C_{27}$ .

## 6.2 En pratique

Pour valider un élément hexaédrique de degré 2 à 20 nœuds, on calcule les 7 nœuds manquants puis les points de contrôle manquants et les 8 jacobiens coins. S'ils sont strictement positifs, on se ramène au cas de l'élément à 27 nœuds et on calcule alors les 198 coefficients restants qui doivent être positifs ou nuls, bon courage encore.

## 7 Vers une définition de la qualité d'un élément

**Distorsion du jacobien.** On définit  $Q_{\mathcal{J}}(K)$  par :

$$Q_{\mathcal{J}}(K) = \frac{\min_K \mathcal{J}(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z})}{\max_K \mathcal{J}(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z})}.$$

Ce critère permet de quantifier l'écart entre un élément Q2 et l'élément Q1 correspondant (construits sur ses seuls sommets). En pratique, on ne sait pas calculer efficacement ce critère, certains auteurs utilisent simplement les jacobiens des nœuds. Cependant, on peut utiliser les extrema des "points" de contrôle du jacobien (les  $N_{ijk}$ ) et définir  $Q_{\mathcal{J}}(K)$  par :

$$Q_{\mathcal{J}}(K) = \frac{\min_{ijk} N_{ijk}}{\max_{ijk} N_{ijk}}.$$

Notons que  $Q_{\mathcal{J}}(K) = 1$  uniquement dans le cas d'un cube droit.

**Vers un critère de qualité purement géométrique.** On a ici deux difficultés à résoudre puisque l'élément n'est pas simplicial et, de plus, est courbe.

L'idée est de quantifier la qualité avec plusieurs objectifs, la continuité d'un élément droit à un élément courbe, la continuité d'un élément hexaédrique à un élément simplicial (cas d'un maillage mixte) et la faculté de bien caractériser et différencier les éléments entre eux.

La mesure classique pour les simplexes,  $Q = \alpha \frac{h}{\rho}$  où  $h$  est le diamètre,  $\rho$  est le rayon inscrit et  $\alpha$  un coefficient de normalisation ne peut être utilisé ici car on ne sait pas définir<sup>10</sup>  $\rho$ . Par conséquent, on va partir d'une définition (en forme) de la forme rapport des longueurs (d'arêtes ou de diagonales) avec le volume. Nous proposons donc la forme générale suivante :

$$Q_F = \alpha \frac{h S_{max}}{V_{min}},$$

avec, en Q1 :

<sup>10</sup>On pourrait considérer le maximum du rayon de tout cercle inscrit mais, en pratique, c'est peu réaliste.

- $h$ , dit le diamètre de l'élément, évalué comme la plus grande distance entre deux nœuds,
- $S_{max}$  la plus grande surface des triangles formés par les différents découpages des faces quadrilatérales du bord de l'élément,
- $V_{min}$  le volume du plus petit tétraèdre des deux découpages en 5 de l'élément. Il semble important de prendre en compte les tétraèdres "centraux" de ce découpage,

et, avec, en Q2 :

- $h$ , dit le diamètre de l'élément, évalué comme la plus grande distance entre deux nœuds,
- $S_{max}$  la plus grande surface des triangles formés par les différents découpages des sous-faces quadrilatérales du bord de l'élément,
- $V_{min}$  le volume du plus petit tétraèdre des deux découpages en 5 des sous-éléments (Q1) du découpage de l'élément (Q2) en considérant les points de Bézier. Il semble, ici aussi, important de prendre en compte les tétraèdres "centraux" de ce découpage,

## 8 Conclusion

On a discuté de la validité des éléments hexaédrique de degré 1 et 2. Bien que construits simplement via un produit tensoriel, ces éléments se révèlent assez délicats à analyser même au degré 1, seule une formulation via des formes de Bézier permet en pratique de conclure avec, toutefois, une condition suffisante seulement sauf pour un Q1 à faces planes ou on a une condition nécessaire et suffisante. Pour le Q2 complet à 27 nœuds, on a 216 coefficients à calculer et à évaluer, pour des éléments complets de degré plus élevé,  $d$ , le nombre de nœuds est  $(d + 1)^3$  et le nombre de coefficients à calculer, à savoir  $(3d - 1)^3$ , explose rapidement<sup>11</sup>.

## Références

- [1] P. BÉZIER, *Courbes et surfaces, Mathématiques et CAO*, 4, Hermès, Paris, 1986.
- [2] H. BOROUCAKI AND P.L. GEORGE, Quality mesh generation, *C.R. Acad. Sci. Paris*, Concise review paper, t. 328, Serie II-b, pp. 505-518, 2000.
- [3] P. LAUG AND H. BOROUCAKI, The BL2D Mesh Generator, Beginner's Guide, User's and Programmer's Manual, *RT INRIA 0194 (0185 in French)*, 1996.
- [4] H. BOROUCAKI ET P. LAUG, Construction d'un maillage de degré 2. Partie 2 : Surface P2, à paraître.
- [5] S. DEY, R.M. O'BARA AND M.S. SHEPHARD, Curvilinear mesh generation in 3D, *8<sup>th</sup> Inter. Meshing Roundtable*, pp. 407-417, 1999.
- [6] P.L. GEORGE, H. BOROUCAKI ET P. LAUG, Construction d'un maillage de degré 2. Partie 1 : Triangle P2, *RR INRIA 7519*, 2011.
- [7] P.L. GEORGE ET H. BOROUCAKI, Construction d'un maillage de degré 2. Partie 3 : Tétraèdre P2, *RR INRIA 7626*, 2011.
- [8] P.L. GEORGE ET H. BOROUCAKI, Analyse et correction des maillages de surface de degré 2, *RR INRIA 7668*, 2011.
- [9] P.L. GEORGE ET H. BOROUCAKI, Sur les éléments finis quadrilatéraux de degré 1 et 2 (version 2), *RR INRIA 7964*, 2012.
- [10] P.L. GEORGE ET H. BOROUCAKI, Sur les éléments finis pentaédriques de degré 1 et 2, *RR INRIA 7992*, 2012.
- [11] P.G. CIARLET, *The Finite Element Method*, North Holland, 1978.
- [12] P.G. CIARLET, *Basic Error Estimates for Elliptic Problems*, in Handbook of Numerical Analysis, vol II, Finite Element methods (Part 1), P.G. Ciarlet and J.L. Lions Eds, North Holland, 17-352, 1991.
- [13] G. FARIN, *Curves and surfaces for CAGD. A practical guide*. 5<sup>th</sup> edition, Academic Press, 2002.
- [14] P.J. FREY AND P.L. GEORGE, *Mesh Generation*, 2<sup>nd</sup> edition, ISTE and Wiley, 2008.
- [15] S.J. SHERWIN AND J. PEIRO, Mesh generation in curvilinear domains using high-order elements, *Int. J. Numer. Meth. and Engng.*, 55, 207-223, 2002.

<sup>11</sup>En Q3, on a 64 nœuds et 512 coefficients, en Q4, on a 125 nœuds et 1331 coefficients, en Q5, on a 216 nœuds et 2744 coefficients, ..., en Q9, on a 1000 nœuds et 17576 coefficients,

- [16] X.J. XUO, M.S. SHEPHARD, R.M. O'BARA, R. NATASIA AND M.W. BEAL, Automatic p-version mesh generation for curved domains, *Eng. with Comp.*, 20, 273-285, 2004.
- [17] O. SAHNI, X.J. XUO, K.E. JANSE AND M.S. SHEPHARD, Curved boundary layer meshing for adaptive viscous flow simulations, *FEAD*, 46, 132-139, 2010.

## Annexe

Dans cette annexe, on donne, en pseudo-code, deux algorithmes de calcul des coefficients de l'élément à 27 nœuds. Dans le premier, on énumère les différents triplets en  $i$ ,  $j$  et  $k$  qui interviennent pour le calcul du coefficient  $N_{IJK}$  puis on effectue le calcul proprement dit, dans le second, on calcule directement de manière brutale.

### Énumération puis calculs.

1.1 - Trouver les triplets en I :

```
-----
Input : I
indice = 0
Faire pour i_1 = 0,1
  Faire pour i_2 = 0,2
    Faire pour i_3 = 0,2
      S = i_1 + i_2 + i_3
      Si S = I alors
        indice = indice + 1
        tabi(1,indice) = i_1
        tabi(2,indice) = i_2
        tabi(3,indice) = i_3
      Fin si
    Fin faire
  Fin faire
Fin faire
nbrindice_i = indice
```

1.2 - Trouver les triplets en J :

```
-----
Input : J
indice = 0
Faire pour j_1 = 0,2
  Faire pour j_2 = 0,1
    Faire pour j_3 = 0,2
      S = j_1 + j_2 + j_3
      Si S = J alors
        indice = indice + 1
        tabj(1,indice) = j_1
        tabj(2,indice) = j_2
        tabj(3,indice) = j_3
      Fin si
    Fin faire
  Fin faire
Fin faire
nbrindice_j = indice
```

1.3 - Trouver les triplets en K :

```
-----
Input : K
indice = 0
```

```

Faire pour k_1 = 0,2
  Faire pour k_2 = 0,2
    Faire pour k_3 = 0,1
      S = k_1 + k_2 + k_3
      Si S = K alors
        indice = indice + 1
        tabk(1,indice) = k_1
        tabk(2,indice) = k_2
        tabk(3,indice) = k_3
      Fin si
    Fin faire
  Fin faire
Fin faire
nbrindice_k = indice

```

Ensuite, on construit les coefficient  $N_{IJK}$  au facteur 8 près.

Input: nbrindice\_i, nbrindice\_j et nbrindice\_k et les  $P_{\{ijk\}}$

nbre = 0

$N_{\{IJK\}} = 0$  pour  $I=0,5$ ,  $J=0,5$  et  $K=0,5$

```

Faire pour i=1,nbrindice_i
  i_1 = tabi(1,i)
  i_2 = tabi(2,i)
  i_3 = tabi(3,i)
  I = i_1 + i_2 + i_3
  Faire pour j=1,nbrindice_j
    j_1 = tabj(1,j)
    j_2 = tabj(2,j)
    j_3 = tabj(3,j)
    J = j_1 + j_2 + j_3
    Faire pour k=1,nbrindice_k
      k_1 = tabk(1,k)
      k_2 = tabk(2,k)
      k_3 = tabk(3,k)
      K = k_1 + k_2 + k_3
      coef = ( C2(i_2) C2(i_3) C2(j_1) C2(j_3) C2(k_1) C2(k_2) )
      coef = coef / ( C5(I) C5(J) C5(K) )

      DET = | P_{ i_1, j_1, k_1 } P_{ i_1 + 1, j_1, k_1 }
              P_{ i_2, j_2, k_2 } P_{ i_2, j_2 + 1, k_2 }
              P_{ i_3, j_3, k_3 } P_{ i_3, j_3, k_3 + 1 } |

      N_{IJK} = N_{IJK} + coef * DET
      nbre = nbre + 1
    Fin faire
  Fin faire
Fin faire

```

On vérifie que  $nbre$  vaut 5832.

En conclusion, un programme très simple permet les calculs voulus. Notons que trouver les coefficients pour un degré,  $d$ , autre que 2 se fait exactement de la même façon. Dans la construction des triplets, on remplace, par exemple pour les indices  $i$  :

```

Faire pour i_1 = 0,1
  Faire pour i_2 = 0,2
    Faire pour i_3 = 0,2

```

par

```
Faire pour i_1 = 0,d-1
  Faire pour i_2 = 0,d
    Faire pour i_3 = 0,d
```

Par ailleurs, dans le calcul proprement dit, on remplace :

$$\text{coef} = ( C2(i_2) C2(i_3) C2(j_1) C2(j_3) C2(k_1) C2(k_2) )$$

$$\text{coef} = \text{coef} / ( C5(I) C5(J) C5(K) )$$

par

$$\text{coef} = ( Cdm1(i_1) Cd(i_2) Cd(i_3) Cd(j_1) Cdm1(j_2) Cd(j_3) \\ Cd(k_1) Cd(k_2) Cdm1(k_3) )$$

$$\text{coef} = \text{coef} / ( Cddd(I) Cddd(J) Cddd(K) )$$

avec  $dm1 = d - 1$  et  $ddd = 3d - 1$ .

### Calculs directs.

Input: les  $P_{\{ijk\}}$

nbre = 0

$N_{\{IJK\}} = 0$  pour  $I=0,5$ ,  $J=0,5$  et  $K=0,5$

Faire pour  $i_1=0,1$

  Faire pour  $i_2=0,2$

    Faire pour  $i_3=0,2$

$I = i_1 + i_2 + i_3$

      Faire pour  $j_1=0,2$

        Faire pour  $j_2=0,1$

          Faire pour  $j_3=0,2$

$J = j_1 + j_2 + j_3$

            Faire pour  $k_1=0,2$

              Faire pour  $k_2=0,2$

                Faire pour  $k_3=0,1$

$K = k_1 + k_2 + k_3$

$\text{coef} = ( C2(i_2) C2(i_3) C2(j_1) C2(j_3) C2(k_1) C2(k_2) )$

$\text{coef} = \text{coef} / ( C5(I) C5(J) C5(K) )$

$$\text{DET} = \begin{vmatrix} P_{\{i_1, j_1, k_1\}} & P_{\{i_1 + 1, j_1, k_1\}} \\ P_{\{i_2, j_2, k_2\}} & P_{\{i_2, j_2 + 1, k_2\}} \\ P_{\{i_3, j_3, k_3\}} & P_{\{i_3, j_3, k_3 + 1\}} \end{vmatrix}$$

$N_{\{IJK\}} = N_{\{IJK\}} + \text{coef} * \text{DET}$

                  nbre = nbre + 1

                  Fin faire

                  Fin faire

                  Fin faire

                  Fin faire

                  Fin faire

                  Fin faire

                  Fin faire

                  Fin faire

                  Fin faire

Pour conclure, il est plus facile de calculer tous les coefficients que tel ou tel.





**RESEARCH CENTRE  
PARIS – ROCQUENCOURT**

Domaine de Voluceau, - Rocquencourt  
B.P. 105 - 78153 Le Chesnay Cedex

Publisher  
Inria  
Domaine de Voluceau - Rocquencourt  
BP 105 - 78153 Le Chesnay Cedex  
[inria.fr](http://inria.fr)

ISSN 0249-6399