



HAL
open science

Méthodes de domaine fictif pour des problèmes elliptiques avec conditions aux limites générales en vue de la simulation numérique d'écoulements diphasiques.

Isabelle Ramière

► **To cite this version:**

Isabelle Ramière. Méthodes de domaine fictif pour des problèmes elliptiques avec conditions aux limites générales en vue de la simulation numérique d'écoulements diphasiques.. Mathématiques [math]. Université de Provence - Aix-Marseille I, 2006. Français. NNT : . tel-00122916

HAL Id: tel-00122916

<https://theses.hal.science/tel-00122916>

Submitted on 5 Jan 2007

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.



UNIVERSITÉ DE PROVENCE - AIX-MARSEILLE I

U.F.R. de Mathématiques, Informatique et Mécanique

THÈSE

pour obtenir le grade de

DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ AIX-MARSEILLE I

Discipline : Mathématiques Appliquées

École Doctorale Mathématiques et Informatique de Marseille

E.D. numéro 184

présentée par

Isabelle RAMIÈRE

et soutenue publiquement le *26 Septembre 2006*

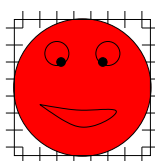
**Méthodes de domaine fictif pour des problèmes elliptiques
avec conditions aux limites générales
en vue de la simulation numérique d'écoulements diphasiques**

Jury :

Philippe ANGOT	Professeur à l'Université d'Aix-Marseille I	<i>Directeur de thèse</i>
Michel BELLARD	Ingénieur-Chercheur au CEA Cadarache	<i>Encadrant</i>
Jean-Marc HÉRARD	Ingénieur-Sénieur à EDF Chatou	<i>Examineur</i>
Patrick JOLY	Directeur de Recherche à l'INRIA Rocquencourt	<i>Rapporteur</i>
Bertrand MAURY	Professeur à l'Université de Paris-Sud	<i>Rapporteur</i>
Frédéric NATAF	Directeur de Recherche CNRS - Université Paris VI	<i>Président du jury</i>



Les domaines fictifs



ESSAYER DE FAIRE SIMPLE
QUAND ON PEUT FAIRE
COMPLIQUÉ!!...

Remerciements

Je voudrais tout d'abord faire un clin d'œil à tous les petits curieux qui liront ces quelques mots... Que les personnes horripilées par les mathématiques savourent à sa juste valeur cette page où toute équation et autre symbole barbare ont été bannis.

Ma plus profonde gratitude s'adresse à Michel Belliard, surnommé à ses dépend « Chouchou » depuis mon arrivée, pour avoir encadré mon travail de thèse durant ces 3 années. Merci pour avoir toujours été là pour moi et avoir su prendre tout le temps nécessaire (et même plus) pour m'expliquer, m'écouter ou encore discuter de ma thèse. La confiance que tu as témoignée à mon travail m'a permis de mener à bien ce long projet... Tes qualités humaines et scientifiques font de toi un excellent encadrant de thèse (enfin il faudrait peut-être revoir ton humour douteux parfois !). Merci aussi pour ton amitié...

Je voudrais également exprimer ma sincère reconnaissance à Philippe Angot, mon directeur de thèse, pour m'avoir donné la possibilité d'effectuer ce doctorat. La cohérence de ce travail résulte de la prise en compte de ses judicieuses orientations autour du sujet de thèse proposé.

Un grand merci à mon encadrant de DEA, Christian Gout, pour m'avoir ouvert les portes de la Recherche. Tu as su comprendre mon besoin de soleil tout en continuant à me soutenir à distance depuis. Notre amitié compte beaucoup à mes yeux.

En acceptant d'être rapporteurs de cette thèse, Patrick Joly et Bertrand Maury m'ont fait un grand honneur. Merci de l'intérêt qu'ils ont porté à mes travaux. Que Jean-Marc Herard trouve ici mes sincères remerciements pour avoir suivi et soutenu mon travail en tant que responsable du lot « méthodes numériques » du projet Neptune, ainsi que pour avoir accepté de faire partie de mon jury de thèse. Merci également à Frédéric Nataf pour l'enthousiasme qu'il a témoigné lorsqu'il a accepté d'être membre du jury.

Précieuses et longues conversations avec « Syssy » (Sylviane Pascal-Ribot) ont rythmé ma vie quotidienne de thésarde. Mille mercis pour ton soutien moral sans limite. Ton immense gentillesse n'a d'égal que ton enthousiasme et ton dynamisme. Je ne te remercierai jamais assez pour tout ce que tu as fait pour moi (et vive L^AT_EX!!!). Un grand merci à toutes les autres personnes du CEA qui m'ont supportée, je pense notamment à Marc, Marie, Pierre, Delphine et bien sûr les « techs d'en bas »...

Je tiens également à exprimer ma plus profonde reconnaissance à Franck Boyer pour m'avoir tendu la main dans les moments difficiles et avoir toujours pris de mes nouvelles, même quand je n'étais pas physiquement à l'Université. Un énorme merci à lui et à Jean-Claude Latché pour leur disponibilité et leurs remarques pertinentes qui ont permis de

faire aboutir l'analyse de convergence.

Je remercie toute l'équipe d'Analyse Appliquée du LATP de Marseille pour m'avoir intégrée, notamment Thierry Gallouët, Raphaële Herbin et Florence Hubert. Merci aux ingénieurs informatiques pour avoir mis à ma disposition les moyens nécessaires au bon déroulement de ma thèse.

S *comment oublier les thésards, post-docs, stagiaires et autres CDD ou intérimaires qui ont partagé mon bureau, ma chambre de congrès, les pauses cafés, les repas à la cantine ou encore quelques soirées animées. Certains sont devenus au fil des jours mes amis, je pense tout spécialement à Nathalie, Céline, Florence, Hugo... Je voudrais adresser des remerciements tous particuliers à mes biologistes adorés : Camille, Mila, Brunal, et une spéciale dédicace à « Mamie »...*

S *ncontestablement, c'est à ma famille et mes amis que revient le plus grand mérite. Je les remercie vivement de m'accepter comme je suis sans jamais me juger. Merci à mes amis pour les milliers (voire millions?) de mails échangés, pour les longues heures au téléphone (merci France Telecom...), pour les supers week-ends et vacances. Ils ont toujours été présents, dans les bons moments comme dans les plus difficiles. Je finirai par ma famille qui a une valeur inestimable à mes yeux... Un coucou tout particulier à mes sœurs et mon frère pour leurs nombreuses questions sur le pourquoi du comment de la thèse, et de gros bisous à mes deux nièces. Un éternel merci à ceux sans qui rien n'aurait été possible, mes parents bien sûr! L'amour qu'ils me portent a toujours été sans faille : je leur dédie cette thèse.*

M E R C I

Table des matières

Notations	1
Introduction générale	3
I Introduction	5
I.1 Méthodes de domaine fictif	7
I.2 Résumé détaillé de la thèse	17
II Une méthode de domaine fictif avec interface diffuse	27
II.1 Introduction	29
II.2 Spread interface approach for diffusion problems	30
II.3 Spread interface approach for convection-diffusion problems	37
II.4 Spread interface approach and local adaptive mesh refinement	39
II.5 Numerical examples	41
II.6 Conclusion	55
III Une méthode de domaine fictif avec interface fine et sauts immergés	57
III.1 Introduction and motivation	59
III.2 Fictitious domain method with immersed jumps	61
III.3 Finite volume (FV) discretization	63
III.4 Adaptive mesh refinement (AMR) solver	69
III.5 Numerical results	75
III.6 Conclusion and perspectives	102
IV Analyse de convergence en maillage non adapté à la frontière	103
IV.1 Introduction	105
IV.2 Dirichlet problem	107
IV.3 Robin problem	125
IV.4 Numerical experiments	133
V Application industrielle	139
V.1 Contexte industriel	141
V.2 Le cas test	143
V.3 Approche par domaine fictif avec interface diffuse	146
V.4 Résolution numérique	150
V.5 Résultats	152
V.6 Résultats complémentaires	161
Conclusion	167

ANNEXES	171
A L'élément fini \mathbb{Q}_1	171
A.1 Eléments finis de Lagrange	173
A.2 Eléments finis parallélotopes	174
A.3 L'élément fini \mathbb{Q}_1	175
B Méthodes de descente basées sur des espaces de Krylov	177
B.1 Méthodes de résolution de systèmes linéaires	179
B.2 Préconditionnement	179
B.3 Méthodes de projection sur des espaces de Krylov	181
Bibliographie	187

Notations

Les principales notations introduites dans cette thèse sont rassemblées dans cette nomenclature. Nous notons **en gras** les grandeurs vectorielles et les matrices.

Géométrie

d	dimension de l'espace,
$\Omega, \tilde{\Omega}$	ouvert borné de \mathbb{R}^d , généralement domaine physique ou domaine fictif,
Ω_e	domaine extérieur (complémentaire du domaine physique dans le domaine fictif),
$\Gamma, \tilde{\Gamma}, \Gamma_e$	frontière ou partie de la frontière de Ω , $\tilde{\Omega}$ ou Ω_e ,
Σ	frontière immergée,
\mathbf{n}	normale extérieure unitaire (rattachée à des domaines différents selon le contexte),
\mathcal{T}_h	maillage de Ω (adapté ou non),
K	élément du maillage, rectangle ou parallélépipède rectangle dans notre cas,
σ	face d'un élément K du maillage,
h_K	diamètre de K : distance maximum entre deux points de K ,
h	pas du maillage : maximum des diamètres h_K , $K \in \mathcal{T}_h$,
Ω_h	domaine polygonal approchant Ω , $\bar{\Omega}_h = \bigcup_{K \in \mathcal{T}_h} K$,
$\Omega_{e,h}$	domaine polygonal approchant Ω_e ,
$\tilde{\Omega}_h$	domaine polygonal, généralement domaine approchant $\tilde{\Omega}$,
Γ_h	frontière ou partie de la frontière de Ω_h ,
Σ_h	interface approchant Σ par des faces d'éléments K du maillage \mathcal{T}_h ,
$\omega_{h,\Sigma}, \omega_{h,\Gamma}$	interface diffuse : union des mailles $K \in \mathcal{T}_h$ traversées par Σ ou Γ .

Paramètres

η	paramètre de pénalisation (tendant vers 0),
ϵ	correction géométrique de surface globale.

Espaces fonctionnels, normes et semi-normes

Les espaces fonctionnels et normes suivants sont définis sur un ouvert quelconque $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ pour une fonction v mesurable.

$$\begin{aligned}
dx & : \text{ mesure de Lebesgue sur } \mathbb{R}^d, \\
L^p(\Omega) & = \{v : \Omega \rightarrow \mathbb{R}; v \text{ mesurable et } \int_{\Omega} |v(x)|^p dx < \infty\}, \quad 1 \leq p < \infty, \\
\|v\|_{L^p(\Omega)} & = \left(\int_{\Omega} |v(x)|^p dx \right)^{1/p}, \quad 1 \leq p < \infty, \\
\text{p.p.} & = \text{ presque partout,} \\
L^\infty(\Omega) & = \{v : \Omega \rightarrow \mathbb{R}; v \text{ mesurable et il existe une constante } C \text{ telle que } |v(x)| \leq C \text{ p.p. sur } \Omega\} \\
\|v\|_{L^\infty(\Omega)} & = \text{Inf}\{C; |v(x)| \leq C \text{ p.p. sur } \Omega\}, \\
\alpha & = (\alpha_1, \dots, \alpha_d) \text{ multi-indice dans } \mathbb{N}^d, \\
|\alpha| & = \sum_{i=1}^d \alpha_i, \text{ utilisé pour la définition des espaces de Sobolev,} \\
\partial^\alpha v & = \frac{\partial^{|\alpha|} v}{\partial^{\alpha_1} x_1 \dots \partial^{\alpha_d} x_d}, \\
W^{m,p}(\Omega) & = \{v \in L^p(\Omega), \partial^\alpha v \in L^p(\Omega), \alpha \in \mathbb{N}^d, |\alpha| \leq m\}, \text{ espace de Sobolev,} \\
\|v\|_{W^{m,p}(\Omega)} & = \begin{cases} \sum_{|\alpha| \leq m} \|\partial^\alpha v\|_{L^p(\Omega)}, \text{ norme sur } W^{m,p}(\Omega), \\ \left(\sum_{|\alpha| \leq m} \|\partial^\alpha v\|_{L^p(\Omega)}^p \right)^{1/p}, \text{ norme équivalente sur } W^{m,p}(\Omega), 1 \leq p < \infty, \end{cases} \\
H^m(\Omega) & = W^{m,2}(\Omega), \text{ espace de Hilbert,} \\
\|v\|_{H^m(\Omega)} & = \left(\sum_{|\alpha| \leq m} \|\partial^\alpha v\|_{L^2(\Omega)}^2 \right)^{1/2}, \text{ norme équivalente sur } H^m(\Omega), \\
|v|_{H^m(\Omega)} & = \left(\sum_{|\alpha|=m} \|\partial^\alpha v\|_{L^2(\Omega)}^2 \right)^{1/2}, \text{ semi-norme sur } H^m(\Omega).
\end{aligned}$$

Dans la suite, pour tout vecteur $\boldsymbol{\xi} = (\xi_1, \dots, \xi_d) \in \mathbb{R}^d$, nous noterons par $|\boldsymbol{\xi}|$ sa norme Euclidienne définie par

$$|\boldsymbol{\xi}| = \left(\sum_{i=1}^d \xi_i^2 \right)^{1/2}.$$

Introduction générale

Depuis plusieurs années, de nouvelles recherches sur l'utilisation de méthodes numériques basées sur des maillages structurés réguliers (principalement cartésiens) sont en cours, notamment dans le milieu industriel pour la simulation numérique en mécanique des fluides. L'objectif est de pouvoir bénéficier des nombreux avantages de ces méthodes (solveurs rapides, bonnes propriétés de convergence, formulation tensorielle naturelle...) tout en essayant d'en limiter les inconvénients (difficulté de prendre en compte les frontières complexes des domaines physiques) qui font que jusqu'à présent la majorité des logiciels industriels utilisent des maillages non structurés.

Cette thèse a été financée par le CEA (Commissariat à l'Energie Atomique) dans le cadre du projet NEPTUNE, co-développé par le CEA et EDF (Electricité de France) et consacré à la simulation des écoulements diphasiques dans les centrales nucléaires. Ce travail de thèse est dédié à la mise en place de deux méthodes originales de type domaine fictif pour la résolution de problèmes de convection-diffusion elliptiques ou paraboliques associés avec des conditions aux limites générales : Dirichlet, Robin ou Neumann. L'idée fondatrice des approches de domaine fictif est d'immerger le domaine originel d'étude (ou domaine physique) dans un domaine fictif de forme géométrique plus simple (souvent rectangulaire en 2D) qui devient le domaine de calcul. L'intérêt principal est d'utiliser un maillage cartésien sur le domaine de calcul permettant ainsi la résolution simple et rapide du problème fictif. Cependant la difficulté majeure réside dans la prise en compte des frontières immergées afin de recouvrer sur le domaine physique la solution du problème originel.

L'originalité des méthodes de domaine fictif développées ici consiste à utiliser le maillage du domaine fictif, généralement non adapté à la géométrie du domaine physique, pour définir une frontière immergée approchée sur laquelle seront appliquées les conditions aux limites immergées. Un même schéma numérique générique permet de traiter toutes les conditions aux limites générales. Ainsi, contrairement aux approches classiques de domaine fictif, ces méthodes ne nécessitent ni l'introduction d'un maillage surfacique de la frontière (cf. multiplicateurs de Lagrange par exemple) ni la modification locale du schéma numérique. La structure de la matrice du système linéaire permet l'utilisation de solveurs rapides et le cas de frontières mobiles et/ou déformables serait géré sans difficulté supplémentaire de maillage.

Deux méthodes de domaine fictif correspondant à deux modélisations de la frontière immergée sont étudiées. Dans la première modélisation, la frontière immergée approchée est l'union des mailles traversées par la frontière originelle. On parlera alors d'interface diffuse. Les conditions aux limites sont imposées via des termes volumiques (pénalisation par exemple). Un schéma aux éléments finis Q_1 est utilisé pour valider numériquement cette méthode de domaine fictif avec interface diffuse. Dans la deuxième modélisation, la frontière immergée est approchée par une interface dite fine s'appuyant sur les faces de cellules du maillage. Des conditions de transmissions algébriques combinant les sauts de la solution et du flux sont introduites. Dans ce cas, les conditions aux limites immergées sont prises en compte par des termes surfaciques ou volumiques ou les deux. Un nouveau schéma aux volumes finis est dérivé pour résoudre le système d'équations. Les deux types de modélisations approchées de la frontière immergée conduisent à une convergence du premier ordre en norme L^2 . Chaque méthode est alors combinée avec un algorithme de raffinement de maillage multi-niveaux

autour de la frontière immergée afin d'améliorer la précision de la solution obtenue. Un algorithme de type LDC (*Local Defect Correction*) est implémenté pour le modèle à interface diffuse et un nouvel algorithme de type FIC (*Flux Interface Correction*) avec décomposition de domaine a été spécialement développé pour le modèle à interface fine. Diverses applications numériques confirment l'amélioration de la précision obtenue : la méthode converge ainsi à l'ordre un en fonction du pas de maillage de la grille locale la plus fine jusqu'à ce que l'erreur due à la partie non raffinée du maillage initial soit atteinte.

Parallèlement, une analyse théorique de convergence en maillage non-conforme a été effectuée en 2D pour une méthode d'éléments finis \mathcal{Q}_1 . Le domaine physique est maillé à l'aide d'éléments rectangulaires uniformes dont les côtés sont parallèles aux axes du maillage. Le problème discret est alors posé sur le domaine approché, non adapté à la géométrie du domaine physique, défini par ce maillage. Cette étude correspond à un sous-problème de l'analyse des méthodes de domaine fictif introduites dans cette thèse. L'erreur liée à la manière d'imposer les conditions aux limites immergées est supposée négligeable par rapport à l'erreur de modélisation de la frontière immergée. L'ordre de convergence obtenu théoriquement (pour des conditions de Dirichlet et Robin) confirme les résultats numériques obtenus à l'aide des méthodes de domaine fictif mises en place. De plus, cette étude souligne l'intérêt de l'introduction d'un paramètre correctif de surface dans le cas d'une condition aux limites de Robin afin de conserver la convergence en maillage de ces approches de domaine fictif.

Parmi les nombreuses applications possibles de ces méthodes de domaine fictif, la résolution du bilan d'énergie sur une maquette d'un échangeur de chaleur (de forme cylindrique), représentatif d'un générateur de vapeur dans les centrales nucléaires, a été effectuée par la méthode de domaine fictif avec interface diffuse. Les solutions obtenues sont comparées à celles obtenues sur des maillages non structurés adaptés à la géométrie du domaine physique. La qualité des résultats des simulations permet de montrer la validité et l'intérêt de ce travail.

Chapitre I

Introduction

Sommaire

I.1	Méthodes de domaine fictif	7
I.1.1	Motivations	7
I.1.2	Approches de type interface fine	8
I.1.2.a	Origine des méthodes de domaine fictif	8
I.1.2.b	Multiplicateurs de Lagrange	11
I.1.2.c	Immersed Interface Method	12
I.1.2.d	Cartesian Grid Embedded Method	13
I.1.3	Approches de type interface diffuse	14
I.1.3.a	Immersed Boundary Method	14
I.1.3.b	Fat Boundary Method	15
I.2	Résumé détaillé de la thèse	17
I.2.1	Chapitre II	17
I.2.2	Chapitre III	18
I.2.3	Chapitre IV	21
I.2.4	Chapitre V	24

I.1 Méthodes de domaine fictif

I.1.1 Motivations

La modélisation de phénomènes physiques (en mécanique des fluides, électromagnétisme, biologie...) conduit généralement à la résolution d'un système d'équations aux dérivées partielles (EDP) sur des domaines géométriques complexes. Afin de calculer une approximation de la solution du système d'EDP originel, des méthodes numériques basées sur la discrétisation du problème continu sont mises en place. Le domaine de calcul est alors maillé à l'aide de cellules de formes géométriques simples (triangles ou rectangles en 2D) et de tailles variables. Se pose alors la question du choix du domaine de calcul et du type de maillage à utiliser.

Les techniques usuelles de résolution de systèmes d'EDP utilisent des maillages structurés ou non structurés (de type éléments finis ou volumes finis principalement) pour lesquels le domaine de calcul s'appuie sur le domaine physique d'étude (cf. figure I.1). Ces maillages prennent en compte de façon très précise la géométrie réelle du domaine physique. L'inconvénient principal de ce type de méthodes repose sur le coût important de calcul (temps de calcul et stockage) nécessaire pour obtenir une solution approchée car les maillages adaptés ne permettent pas en général l'utilisation de solveurs rapides. De plus, en cas de déformation ou de déplacement du domaine physique d'étude au cours du temps, la résolution du système d'EDP nécessite un remaillage du domaine. Afin de remédier à ces limitations, des méthodes numériques basées sur des maillages structurés cartésiens (de type différences finies ou volumes finis) se sont développées (cf. figure I.1(b)). Ces méthodes présentent l'avantage majeur de ne pas nécessiter la construction du maillage mais uniquement le repérage des cellules par des indices. Ainsi le cas de frontières mobiles ne pose aucun problème de remaillage. Des solveurs rapides et des préconditionneurs efficaces peuvent être utilisés. De plus, ces méthodes peuvent facilement être combinées à des algorithmes de raffinement local adaptatif de maillage ou des méthodes de type multi-échelles. Leur principal défaut réside dans la prise en compte précise des frontières complexes du domaine physique. Ainsi la structure cartésienne du maillage contraint ces méthodes à être utilisées sur des domaines de forme géométrique simple.

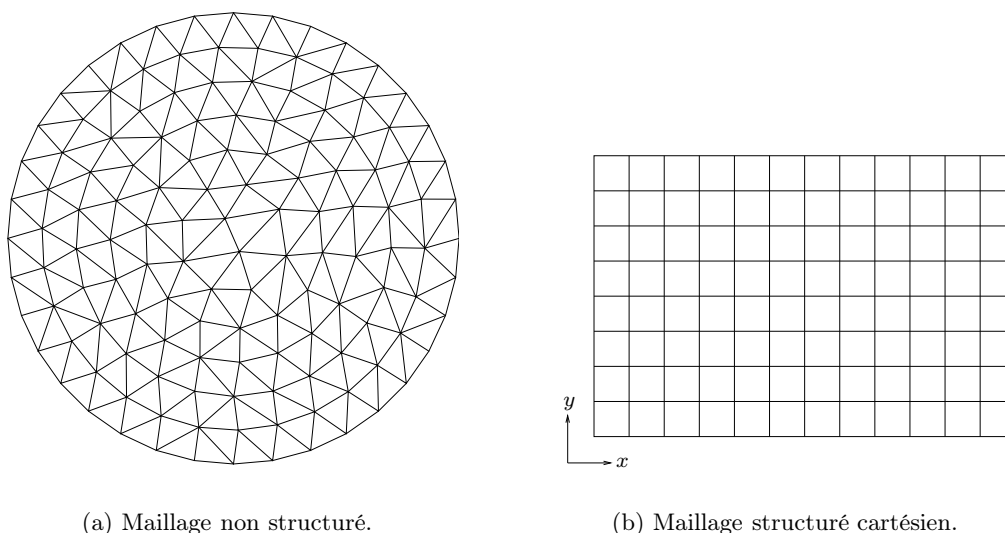


FIG. I.1 – Exemples de maillages structurés et non structurés.

L'idée de base des méthodes de type domaine fictif est de découpler la géométrie du domaine

physique d'étude de celle du domaine de calcul. Le domaine physique est alors immergé dans un domaine plus grand et de forme plus simple (généralement rectangulaire en 2D), appelé domaine fictif qui deviendra le domaine de calcul (cf. figure I.2).

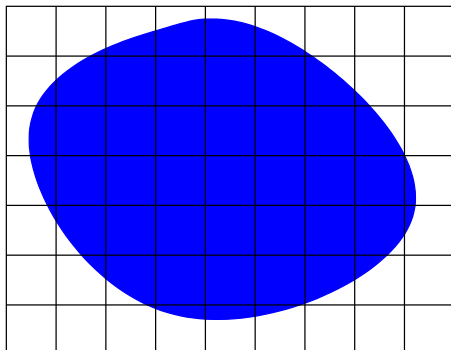


FIG. I.2 – Domaine physique immergé dans un domaine fictif rectangulaire.

Cette approche présente l'intérêt majeur de pouvoir mailler de façon structurée cartésienne (souvent uniforme) le domaine de calcul et ainsi bénéficier des avantages cités précédemment de ce type de maillages. Cependant, afin de recouvrer une solution approchée satisfaisante sur le domaine physique, c'est-à-dire une solution approchée proche de la solution obtenue dans le cas de maillages adaptés, il faut pouvoir tenir compte de façon précise des frontières immergées dans le domaine calcul.

Dans la littérature, les différentes modélisations de frontières immergées peuvent se regrouper en deux grands types d'approches. Ces approches se distinguent par la dimension de l'espace dans lequel est approchée l'interface immergée réelle :

- soit l'interface approchée est de même dimension que l'interface immergée réelle (*i.e.* une courbe en 2D ou une surface en 3D), on parlera alors d'**interface approchée fine**.
- soit l'interface approchée est élargie par rapport à l'interface immergée réelle (*i.e.* une surface en 2D ou un volume en 3D), on parlera alors d'**interface approchée diffuse**.

Nous allons exposer brièvement les principales approches de type domaine fictif, en se focalisant sur le traitement des conditions aux limites immergées. La plupart de ces approches ont été développées pour résoudre des problèmes modèles elliptiques sur le domaine physique d'étude $\Omega \subset \mathbb{R}^d$:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Etant donnés } \mathbf{a} \in L^\infty(\Omega)^{d \times d}, b \in L^\infty(\Omega) (b \geq 0), f \in L^2(\Omega), \text{ trouver } u \in H^1(\Omega) \text{ tel que} \\ -\text{div}(\mathbf{a}\nabla u) + bu = f, \end{array} \right. \quad (\text{I.1})$$

avec des conditions aux limites sur $\Gamma = \partial\Omega$ de type **Dirichlet**, $u = u_D$ (avec $u_D \in H^{1/2}(\Gamma)$), et/ou **Neumann**, $-\mathbf{a}\nabla u \cdot \mathbf{n} = g$ (avec $g \in L^2(\Gamma)$), où \mathbf{n} est la normale extérieure unitaire au domaine physique Ω . Peu d'approches se sont intéressées au traitement de conditions aux limites de type **Robin** : $-\mathbf{a}\nabla u \cdot \mathbf{n} = \alpha u + g$ (avec $0 \leq \alpha \in L^\infty(\Gamma)$ et $g \in L^2(\Gamma)$).

I.1.2 Approches de type interface fine

I.1.2.a Origine des méthodes de domaine fictif

Le nom de "fictitious domain method" (méthode de domaine fictif) a été introduit par V.K. Saul'ev dans [Sau63]. L'idée de Saul'ev consiste à modifier localement le maillage cartésien du domaine fictif afin de prendre en compte les conditions aux limites immergées (cf. figure I.3). Cette

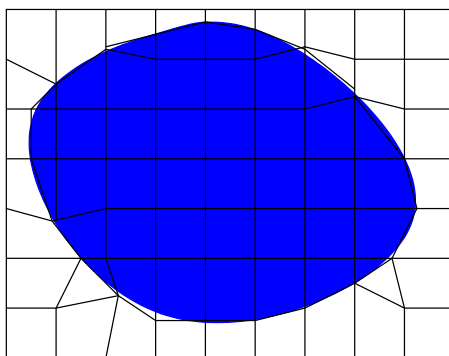


FIG. I.3 – Maillage cartésien localement adapté autour de la frontière immergée.

approche a été reprise et complétée dans [Kop68, Mar82]. La résolution de problèmes elliptiques avec conditions aux limites de Dirichlet homogène ($u_D = 0$) se fait en pénalisant le coefficient de diffusion sur le domaine fictif extérieur par $\mathbf{a} = (1 + \frac{1}{\eta})\mathbf{Id}$ où η , $0 < \eta \ll 1$, est un très petit paramètre appelé paramètre de pénalisation.

Kopčenov [Kop74] a également utilisé cette approche de maillage localement adapté pour simuler des conditions aux limites de type Robin, en imposant un saut de flux sur la frontière immergée. L'intérêt d'un maillage localement adapté est discutable étant donné la perte de la structure cartésienne globale et le coût de la modification locale (qui semble être du même ordre de grandeur que le coût de génération d'un maillage adapté). Cependant la matrice résultante du système linéaire est proche de la matrice obtenue avec une discrétisation sur le maillage cartésien global. Le système linéaire est alors préconditionné par la matrice du maillage cartésien.

Une approche similaire d'adaptation locale du maillage est utilisée dans [Ago95, MT99]. Dans ce cas, l'approche domaine fictif est utilisée comme technique de préconditionnement pour des problèmes de Dirichlet ou de Neumann.

Par la suite, toujours dans une approche de domaine fictif, les techniques de pénalisation ont été étudiées et employées principalement en mécanique des fluides [Ang99a, ABF99, KAPC00] pour imposer des conditions de type Dirichlet sur une frontière immergée ou dans un domaine (par exemple, pour avoir une vitesse nulle dans les solides). Deux types de pénalisation sont possibles :

- la pénalisation L^2 consiste à pénaliser la solution. Sur le domaine à pénaliser, un terme de réaction de la forme $b = \frac{1}{\eta}(u - u_D)$ est rajouté à l'EDP résolue dans le domaine fictif.
- la pénalisation H^1 consiste à pénaliser la solution et son gradient. Le coefficient de diffusion est alors de la forme $\mathbf{a} = \frac{1}{\eta}\mathbf{Id}$ sur le domaine à pénaliser. Le terme de réaction est pénalisé de la même manière que pour obtenir une pénalisation L^2 .

Remarque. Si les conditions aux limites sur le domaine fictif sont des conditions de Dirichlet, l'inégalité de Poincaré [Bre00] permet de ne pénaliser que le coefficient de diffusion pour obtenir une pénalisation H^1 . On retrouve alors l'approche de Saul'ev.

Le but de ces approches de pénalisation est de conserver le maillage cartésien du domaine fictif et de résoudre sur le domaine fictif un système d'EDP similaire au système original posé sur le domaine physique. Ainsi des méthodes de discrétisation standards peuvent être utilisées pour résoudre le problème fictif. La frontière immergée est généralement approchée par un ensemble de faces de

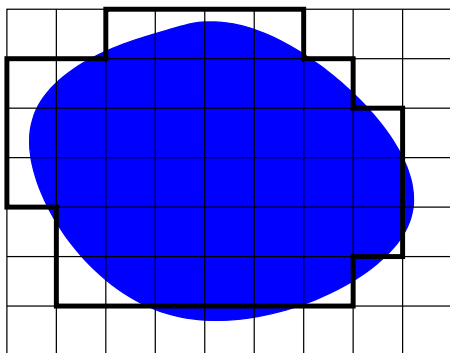


FIG. I.4 – Approximation de la frontière immergée par des faces du maillage.

mailles (cf. figure I.4).

Ces méthodes sont alors souvent combinées à des algorithmes de raffinement local multi-niveaux de maillage (voir [KAPC00] par exemple) pour approcher localement de manière plus précise la frontière immergée.

Une approche utilisant un paramètre de pénalisation comme paramètre de régularisation a été développée dans le cas d'un problème de Neumann dans [GPWZ96]. Cependant dans cette approche l'intégrale de surface sur la frontière immergée réelle ainsi que les intégrales de volume sur le domaine physique sont approchées à l'aide de formules de quadrature. L'aire d'intersection de chaque maille avec le domaine physique Ω est calculée de manière précise. On se retrouve avec une approche de type cellule coupée ou "cut cell" (voir section I.1.2.d).

Dans les années 1970, apparaît la méthode de matrice de capacité ou "Capacitance matrix method" [BDGG71, PW76]. Cette approche s'avère très efficace pour résoudre un système linéaire dont la matrice peut s'écrire comme la somme d'une matrice bien structurée (pour laquelle des solveurs numériques rapides existent) et d'une matrice de rang faible. Dans une approche de type domaine fictif, le stencil de discrétisation d'un schéma aux différences finies est localement modifié autour de la frontière immergée et la matrice résultante est écrite comme la somme de la matrice provenant du schéma de discrétisation standard sur le maillage cartésien global et d'une matrice de modification qui est de rang faible. Cette méthode est à l'origine des approches de type domaine fictif qui consistent à modifier localement le stencil de discrétisation (cf. "Grid Embedded Method", voir section I.1.2.d) ou à tenir compte de sauts immergés (cf. "Immersed Interface Method", voir section I.1.2.c, ou la méthode de sauts de flux et de solution étudiée dans cette thèse au chapitre III).

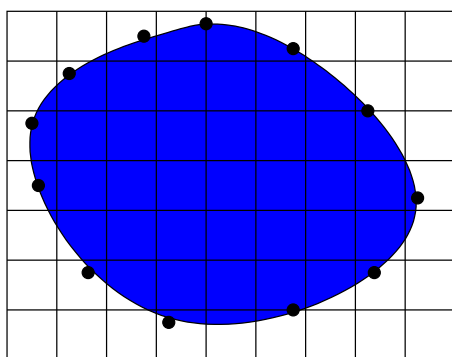
Une méthode proche des méthodes de matrice de capacité et provenant de la théorie des potentiels en électromagnétisme a été développée par Mayo *et al.* [May84, MGM94]. La solution de l'équation de Poisson est exprimée sous forme d'une équation intégrale. Le domaine originel est immergé dans le domaine fictif sur lequel des solveurs rapides basés sur une discrétisation standard du Laplacien sont implémentés. Cette méthode est combinée à des méthodes multipôles rapides ("Fast Multipole Method") pour résoudre l'équation intégrale sur la frontière immergée.

L'inconvénient de ce type d'approche est que la solution sous forme intégrale de problèmes elliptiques n'est connue que pour un opérateur de Laplace.

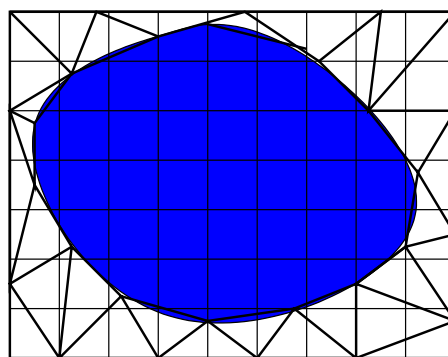
I.1.2.b Méthodes de domaine fictif avec multiplicateurs de Lagrange

Une des approches de type domaine fictif parmi les plus connues est l'approche avec multiplicateur de Lagrange introduite par R. Glowinski *et al.* [DDG⁺92, GPP94, GG95, GPWZ96, GK98, GPHJ99] et les références citées à l'intérieur. Afin de conserver un maillage cartésien du domaine fictif et de prendre en compte de façon adaptée les conditions aux limites immergées, un deuxième maillage est considéré. Ce deuxième maillage, sur lequel les multiplicateurs de Lagrange sont définis, est adapté à la géométrie du domaine physique. Deux types de multiplicateurs de Lagrange peuvent être considérés :

- soit les multiplicateurs sont définis sur un maillage surfacique sur la frontière immergée : on parle alors de multiplicateurs de Lagrange de frontière (ou de surface), voir figure I.5(a) ;
- soit les multiplicateurs sont définis sur le domaine fictif extérieur au domaine d'étude : il s'agit de multiplicateurs de Lagrange distribués, voir figure I.5(b).



(a) Approche avec multiplicateurs de frontière.



(b) Approche avec multiplicateurs distribués.

FIG. I.5 – Exemples de maillages pour l'approche avec multiplicateurs de Lagrange.

L'idée d'imposer des conditions aux limites au moyen de multiplicateurs de Lagrange de frontière est assez ancienne [Bab73]. La nouveauté de l'approche de Glowinski *et al.* est de pouvoir découpler la position des noeuds de discrétisation du maillage surfacique de celle des noeuds du maillage volumique.

L'approche avec multiplicateurs de Lagrange distribués a été introduite dans le cadre d'écoulements particuliers. Pour ce type de problèmes, le domaine originel ("physique") est la région occupée uniquement par le fluide alors que le domaine fictif est la région occupée par le fluide et les particules solides en mouvement. Dans ce cas, ce sont les particules solides immergées dans le fluide qui portent les multiplicateurs de Lagrange distribués. Le but de cette approche est d'imposer des mouvements de corps solide sans avoir à remailler le domaine solide mobile indéformable.

Après discrétisation (par éléments finis en général), l'approche avec multiplicateurs de Lagrange (de frontière ou distribués) conduit à résoudre des systèmes linéaires de type point-selle, où les conditions aux limites sont imposées sous forme faible à l'aide d'une contrainte (de surface ou de volume). Le problème de type point-selle s'écrit sous la forme :

$$\begin{cases} \mathbf{A} \mathbf{U} + \mathbf{B}^\top \boldsymbol{\Lambda} = \mathbf{b}, \\ \mathbf{B} \mathbf{U} = \mathbf{c}. \end{cases}$$

avec \mathbf{A}, \mathbf{B} sont des matrices, et \mathbf{b}, \mathbf{c} des vecteurs. Le vecteur \mathbf{U} contient la solution approchée aux noeuds de discrétisation du maillage volumique cartésien du domaine fictif, et le vecteur $\mathbf{\Lambda}$ correspond aux valeurs du multiplicateur de Lagrange approché aux noeuds de discrétisation du maillage adapté (surfaique ou volumique). La convergence de la solution approchée vers la solution du problème continu nécessite la vérification de la condition inf-sup discrète (voir par exemple [GG95, MT99]). De plus, dans le cas de multiplicateurs de frontière, des hypothèses de compatibilité entre les maillages de surface et de volume doivent être satisfaites (voir notamment [GG95, JR99]) : le pas de discrétisation du maillage surfaique doit être supérieur au pas du maillage cartésien (d'après [GG95], le pas surfaique doit être au moins trois fois supérieur au pas volumique). Les méthodes de domaine fictif avec multiplicateurs de Lagrange ont été appliquées sur de nombreux problèmes (de type elliptiques, Stokes, Navier-Stokes) avec des conditions aux limites de type Dirichlet ou Neumann (voir notamment [DDG⁺92, GPP94, GPP95, CJM97, GPHJ99, JR99]).

L'intérêt de l'approche avec multiplicateurs de Lagrange est de pouvoir conserver les propriétés d'un maillage cartésien du domaine fictif et d'avoir un maillage auxiliaire qui permet d'imposer de façon précise les conditions aux limites immergées. Cependant cette approche conduit à résoudre un système avec des inconnues supplémentaires (qui sont les multiplicateurs) et la construction du maillage auxiliaire (surtout en cas de déformation de la frontière) peut s'avérer aussi coûteuse que celle d'un maillage adapté au domaine physique.

I.1.2.c Méthode d'interface immergée ("Immersed interface method")

La méthode d'interface immergée (IIM), initialement introduite par Leveque et Li [LL94], a été développée pour améliorer la méthode de frontière immergée ("Immersed Boundary Method") de Peskin [Pes72, Pes02], voir plus de détails dans la section I.1.3.a. Le but de la méthode IIM est de résoudre des systèmes d'EDP à coefficients discontinus avec des termes sources pouvant être singuliers (fonction Dirac par exemple). Les sauts de solution et de flux qui en découlent sont alors des données du problème. Cette méthode a été ensuite étendue à la résolution de problèmes sur des domaines irréguliers.

La méthode IIM originelle est basée sur une discrétisation des équations sur une grille cartésienne à l'aide d'un schéma aux différences finies (voir une synthèse des méthodes de type IIM dans [Li03]). Cependant, cette méthode a été aussi combinée avec des éléments finis (voir par exemple [Li98b]). Le principe général consiste à discrétiser le domaine fictif à l'aide d'une grille cartésienne et à répartir les noeuds de discrétisation en deux familles selon leur position par rapport à l'interface où se situent les sauts :

- les noeuds "réguliers" sont les noeuds du maillage tels que le stencil de discrétisation centré en ces points ne fait intervenir que des noeuds situés d'un même côté de l'interface,
- les noeuds "irréguliers" sont les noeuds du maillage situés près de l'interface tels que le stencil de discrétisation est composé de noeuds de part et d'autre de l'interface (cf. figure I.6).

Un schéma aux différences finies centré standard est appliqué aux noeuds "réguliers" de la grille. Aux noeuds "irréguliers", un schéma aux différences finies localement modifié est déterminé. Ce schéma est basé sur le même stencil de discrétisation que le schéma standard mais possède des coefficients appropriés et un terme source corrigé afin de tenir compte des conditions de sauts sur l'interface. Les coefficients du schéma ainsi que le terme de correction sont obtenus à l'aide de développements en séries de Taylor autour de l'interface.

Cette méthode présente l'avantage de conserver une unique grille cartésienne (non modifiée) pour résoudre le problème sur le domaine fictif. De plus, le stencil de discrétisation est le même pour

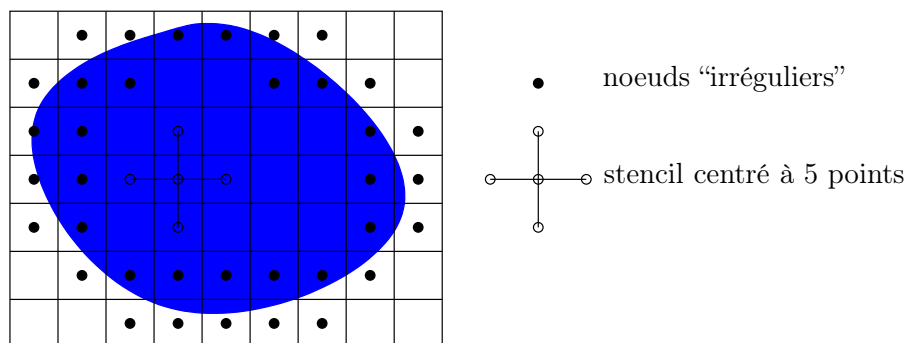


FIG. I.6 – Noeuds “irréguliers” dans le cas d’un stencil centré à 5 points.

tous les noeuds du maillage, ce sont les coefficients du schéma qui sont modifiés localement pour tenir compte de façon précise des conditions de sauts sur l’interface. Cependant, cette approche nécessite la connaissance de la localisation de la frontière.

Outre la résolution de problèmes elliptiques, la méthode IIM a aussi été combinée à des méthodes de suivi d’interface pour simuler des écoulements de Stokes et des équations de Navier-Stokes avec interfaces mobiles.

Comme l’approche originelle nécessite la donnée des conditions de sauts immergées, la méthode IIM a été étendue pour tenir compte de conditions aux limites immergées de type Dirichlet [Li98a, WB00] ou Neumann [FK00, DK03]. Pour des conditions de Dirichlet, des inconnues supplémentaires sont introduites sur la frontière immergée. Ces inconnues étant beaucoup moins nombreuses que les inconnues du maillage cartésien, le système linéaire est résolu en inversant le complément de Schur correspondant aux inconnues de frontière. La matrice du complément de Schur correspond à la discrétisation des équations intégrales (cf. matrice de capacité et théorie des potentiels, voir section I.1.2.a). Dans le cas de conditions de Neumann, le stencil de discrétisation est localement modifié autour de l’interface immergée.

I.1.2.d Méthode immergée avec grille cartésienne (“Cartesian grid embedded method” (CGEM))

Dans la méthode immergée avec grille cartésienne ou “Cartesian grid embedded method” [JC98, MCJ01, SBCL06], la frontière immergée est approchée linéairement par morceaux par un segment de droite dans chaque cellule du maillage cartésien qu’elle traverse (cf. figure I.7).

Cette approche est basée sur une discrétisation des EDP sur la grille cartésienne à l’aide d’un schéma aux volumes finis. La solution est calculée au centre des mailles même si celui-ci est situé à l’extérieur du domaine physique. Par contre l’approximation des flux se fait sur la partie des faces des volumes de contrôle strictement incluse dans le domaine physique (cf. figure I.7). L’interface immergée est reconstruite linéairement par morceaux dans chaque maille traversée par la frontière réelle. On retrouve ici l’idée de base des approches de type “volume-of-fluid” [HN81] de suivi d’interface grâce à des fractions volumiques, “front tracking” [UT01, TBE⁺01] où l’interface est représentée par des segments de droite s’appuyant sur des marqueurs Lagrangiens, ou encore des approches de type “cut-cell” (voir par exemple [YCI⁺97]) qui consistent à ne conserver que la partie des mailles incluse dans le domaine physique.

Le schéma numérique est modifié localement pour approcher correctement les flux sortants d’une maille traversée par la frontière immergée tout en conservant les inconnues aux centres des mailles.

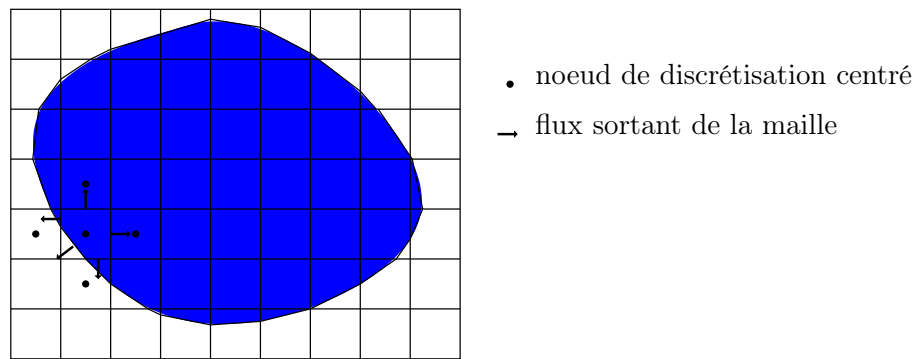


FIG. I.7 – Reconstruction locale de la frontière immergée.

De plus, il faut aussi évaluer le flux sortant sur la frontière immergée afin de garder une discrétisation conservative des flux même sur les cellules du maillage contenant la frontière immergée. Dans ce cas, le stencil de discrétisation ne tient compte que de noeuds intérieurs au domaine physique, le noeud de la cellule courante n'étant pas pris en compte.

Comme pour la méthode IIM, cette approche permet de conserver un unique maillage cartésien du domaine fictif sans introduction d'inconnues locales supplémentaires. Cependant le stencil de discrétisation doit être modifié localement afin de respecter la conservativité des flux sur le domaine physique. De plus, cette approche nécessite une reconstruction locale de la frontière immergée.

La méthode CGEM a été étudiée et appliquée pour des problèmes elliptiques avec des conditions aux limites de Dirichlet ou Neumann. Cette approche a été étendue au cas de frontière mobiles [MCJ01, SBCL06] et combinée avec des algorithmes de raffinement local multi-niveaux de maillage [JC98, SBCL06].

I.1.3 Approches de type interface diffuse

A notre connaissance, la première approche de type interface diffuse dans le cadre de domaine fictif remonte à Rukhovets [Ruk67]. Cette approche permet de simuler des conditions aux limites de type Robin en rajoutant un terme volumique dans l'EDP résolue sur le domaine fictif. Ce terme est non nul uniquement sur une bande de petite largeur autour de la frontière immergée : cette bande définit la frontière immergée approchée.

I.1.3.a Méthode de la frontière immergée (“Immersed boundary method”)

La méthode de la frontière élargie (IBM) a été initialement développée par Peskin [Pes72] pour modéliser les écoulements sanguins dans le coeur humain. Depuis, cette méthode a été appliquée sur de nombreux problèmes d'interaction fluide/structure notamment en biophysique (voir une synthèse des méthodes de type IBM dans [Pes02]). L'interaction entre le fluide et la structure (ici la frontière immergée) se modélise par un terme faisant intervenir une fonction delta de Dirac sur la frontière immergée. Ce terme de surface a la même influence qu'une condition aux limites de Dirichlet. Au niveau numérique, deux maillages coexistent de façon indépendante : le maillage volumique cartésien du domaine de calcul et un maillage surfacique sur la frontière immergée. La discrétisation des équations se fait à l'aide d'une méthode aux différences finies. La présence de la

frontière dans le domaine de calcul est simulée par un terme source volumique, sans modifier la grille de calcul. En effet, les termes sources singuliers (de type Dirac) portés par l'interface immergée sont distribués sur les points voisins de la grille volumique de calcul à l'aide d'une fonction Dirac discrète régulière. En 1D, la fonction Dirac discrète proposée par Peskin est

$$\delta_h(x) = \begin{cases} \frac{1}{4h}(1 + \cos(\frac{\pi x}{2h})) & \text{si } |x| < 2h, \\ 0 & \text{si } |x| \geq 2h. \end{cases}$$

En plusieurs dimensions, la fonction Dirac discrète est souvent le produit des fonctions Dirac mono-dimensionnelles (ex : $\delta_h(x, y) = \delta_h(x)\delta_h(y)$ en 2D). La zone d'influence des termes surfaciques sur le maillage cartésien peut-être vue comme la modélisation de la frontière immergée réelle à l'aide d'une frontière élargie (cf. figure I.8).

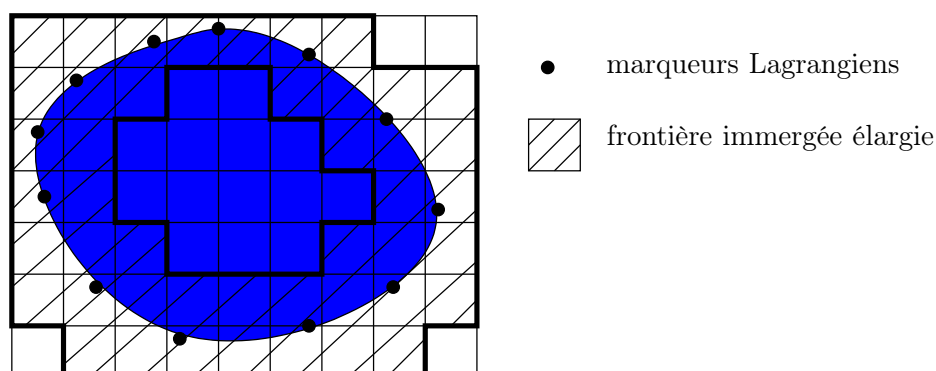


FIG. I.8 – Frontière immergée approchée par une fonction Dirac discrète.

La méthode IBM est simple à implémenter car elle permet de conserver une grille volumique cartésienne et de ne pas avoir à remailler le domaine de calcul en cas de mouvement de la frontière immergée. Cependant, un maillage surfacique de frontière est effectué à l'aide de marqueurs Lagrangiens afin d'évaluer les forces de surface. En cas de mouvement de la frontière, ce sont ces marqueurs qui suivront l'évolution de l'interface. Pour des frontières déformables, la position et le nombre de marqueurs Lagrangiens est à déterminer à chaque pas de temps.

I.1.3.b Méthode de la frontière élargie (“Fat boundary method”)

La méthode de la frontière élargie [Mau01, BIM04] (FBM) a été développée pour des problèmes de Dirichlet. L'approche FBM a pour but de tirer profit de l'approche de domaine fictif en utilisant un maillage cartésien pour calculer la solution du problème fictif, tout en introduisant un maillage volumique local adapté autour de la frontière immergée afin de conserver une précision suffisante de la solution au voisinage de la frontière immergée (cf. figure I.9). Le problème physique originel est remplacé par deux sous-problèmes :

- un problème local au voisinage de la frontière immergée,
- un problème global résolu sur le maillage cartésien du domaine fictif.

Ces deux sous-problèmes sont reliés par une interpolation du maillage cartésien sur le maillage adapté (comme dans l'approche avec décomposition de domaine avec recouvrement total [TT99]), et par l'introduction dans le problème fictif d'un saut porté par la frontière immergée de la dérivée

normale de la solution du maillage adapté (ce type de terme est aussi présent dans la modélisation de la méthode IIM [Li03], voir section I.1.2.c). Un processus itératif de point fixe permet de résoudre les deux sous-problèmes.

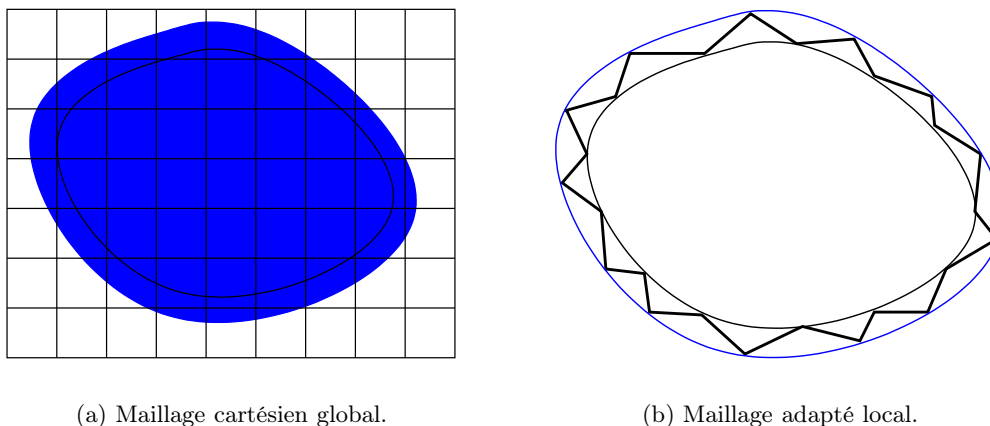


FIG. I.9 – Discrétisation sur le maillage global et local.

Une approche simplifiée a été développée dans [Ism04] permettant de remplacer la résolution du problème local par une estimation de la dérivée normale de la solution sur la frontière immergée. Seul un maillage surfacique de la frontière immergée est alors requis.

Dans le cas de conditions immergées de Neumann, Ismail [Ism04] propose un algorithme itératif faisant intervenir uniquement les noeuds du maillage cartésien du domaine fictif. L'approche de type "interface diffuse" est alors perdue. Une approximation du domaine immergé est obtenue par un processus de raffinement local du maillage de la grille cartésienne aux alentours de la frontière immergée. La frontière immergée est approchée par des faces du maillage cartésien composite. Cette approche ressemble aux approches de type pénalisation avec raffinement de maillage local (voir section I.1.2.a).

La méthode FBM a été validée numériquement sur des résolutions par éléments finis de problèmes elliptiques [Mau01] ou des équations de Naviers-Stokes [Ism04] (écoulement de type fluide-particules) dans des domaines perforés par des obstacles indéformables de forme sphérique.

La méthode FBM conserve un maillage cartésien global sur lequel des solveurs numériques rapides peuvent être implémentés. Cependant le traitement des conditions immergées de Dirichlet ou de Neumann se fait de manière différente. Pour des conditions de Dirichlet, un maillage auxiliaire adapté à la géométrie du domaine immergé est nécessaire. Pour des conditions de Neumann, la résolution du problème fictif fait appel à un maillage composite (provenant du raffinement local du maillage) pour approcher la frontière immergée au mieux à l'aide d'un maillage cartésien. Ces deux types de problèmes sont résolus avec des algorithmes itératifs, ce qui peut être coûteux en temps de calcul.

I.2 Résumé détaillé de la thèse

Le but de cette thèse est d'introduire des méthodes de domaine fictif avec un bon rapport entre la précision de la solution obtenue et le temps de calcul. Ces méthodes doivent pouvoir permettre d'imposer toutes les conditions aux limites générales (Dirichlet, Robin ou Neumann) sur la frontière immergée. Nous avons mis en place et étudié deux méthodes de domaine fictif basées respectivement sur une approche de type interface diffuse et sur une approche de type interface fine. L'idée génératrice de ces deux approches est de traiter les conditions aux limites immergées en n'utilisant que le maillage cartésien du domaine fictif. La frontière approchée est alors définie à partir de ce maillage non modifié localement. De plus, le même schéma numérique générique est implémenté sur tous les noeuds du maillage et aucune inconnue supplémentaire n'est introduite près de la frontière immergée. Ces approches de domaine fictif permettent d'approcher le domaine physique originel à $\mathcal{O}(h)$ près, où h est le pas du maillage. La convergence de ces méthodes en fonction du pas du maillage est ainsi du premier ordre en norme L^2 . Chacune de ces approches est ensuite combinée à des algorithmes de raffinement local multi-niveaux de maillage afin d'améliorer la précision de la solution au voisinage de la frontière immergée.

Ces deux méthodes ont été étudiées et validées sur des problèmes elliptiques de type convection-diffusion. Les systèmes linéaires obtenus sont résolus par des solveurs structurés provenant de méthodes de gradient sur des espaces de Krylov (voir Annexe B).

I.2.1 Chapitre II

Dans ce chapitre, nous détaillons l'approche interface diffuse. La frontière immergée approchée est l'union de l'ensemble des mailles traversées par la frontière immergée réelle (cf. figure I.10)

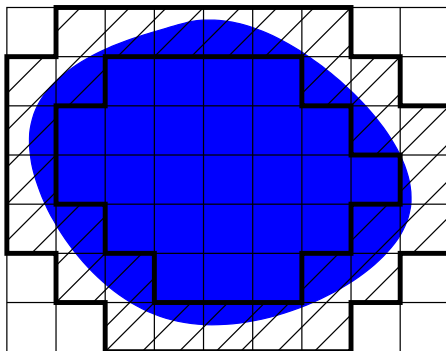


FIG. I.10 – Détection de la frontière diffuse.

Cette discrétisation de la frontière immergée est similaire à l'approche introduite par Peskin dans la méthode IBM (voir section I.1.3.a) à la différence qu'aucun maillage surfacique n'est utilisé et que la fonction delta de Dirac discrète est approchée de façon grossière par une fonction créneau uniquement sur les mailles traversées par la frontière immergée réelle :

$$\delta_h(x) = \begin{cases} 1 & \text{si } x \text{ appartient à une maille traversée par la frontière immergée réelle,} \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases}$$

Les conditions aux limites sont imposées à l'aide des coefficients et du terme source de l'EDP originale étendue sur le domaine fictif. Les conditions de Dirichlet sont imposées par pénalisation (L^2 ou H^1) sur l'interface diffuse ou sur le domaine fictif approché extérieur. Les conditions de Robin

(ou Neumann) sont obtenues en modélisant le saut du flux normal à travers l'interface immergée à l'aide d'une suite régularisante sur l'interface diffuse. Un paramètre correctif est alors introduit dans chaque maille de l'interface diffuse pour tenir compte du rapport local entre la mesure de la frontière immergée intersectée dans la maille et la mesure de la maille.

Cette méthode de domaine fictif avec interface diffuse est alors combinée avec un algorithme de raffinement local multi-niveaux de maillage autour de la frontière immergée. A chaque niveau, le domaine de raffinement est composé de l'ensemble des mailles de l'interface diffuse ainsi que des mailles voisines. Ce choix permet de corriger tous les noeuds situés dans l'interface diffuse. Un ensemble de sous-grilles emboîtées est ainsi généré et la communication entre les différents niveaux se fait à l'aide d'un algorithme multi-grille L.D.C. [Hac84] (*Local Defect Correction*).

Une méthode d'éléments finis est implémentée à l'aide d'éléments rectangulaires de Lagrange \mathcal{Q}_1 (voir Annexe A). Des tests académiques sont effectués pour valider l'approche de domaine fictif avec interface diffuse sur des problèmes de convection-diffusion en dimension deux. Le domaine physique est un quart de disque immergé dans un domaine fictif carré. La solution analytique de ces problèmes est connue, permettant ainsi le calcul de l'erreur entre la solution approchée et la solution analytique sur le domaine physique réel. Pour une condition immergée de Dirichlet, la convergence de la norme L^2 de l'erreur de modélisation en fonction du paramètre η de pénalisation est en $\mathcal{O}(\eta^{3/4})$ pour la pénalisation H^1 et en $\mathcal{O}(\eta^{1/3})$ pour la pénalisation L^2 . Les figures suivantes (voir figure I.11) représentent la norme L^2 de l'erreur de discrétisation en fonction du pas h du maillage grossier pour le modèle à interface diffuse sans raffinement de maillage et avec 2 niveaux de raffinement local de maillage (*i.e.* 3 niveaux au total en comptant le niveau grossier). Les résultats numériques confirment la convergence d'ordre un de la méthode avec interface diffuse en fonction du pas du maillage, quelque soit le type de conditions aux limites immergées. La combinaison de l'approche interface diffuse avec l'algorithme de raffinement de maillage L.D.C. permet d'améliorer l'erreur obtenue sur la solution. On peut remarquer que cette méthode est alors en $\mathcal{O}(h_f)$, où h_f est le pas de discrétisation de la grille locale la plus fine, jusqu'à un nombre de niveaux de raffinement maximal en dessus duquel aucune amélioration de la solution globale n'est perceptible. L'erreur de discrétisation de la zone non raffinée du maillage est alors prédominante.

Ces travaux ont donné lieu à une publication intitulée "**A fictitious domain approach with spread interface for elliptic problems with general boundary conditions**" dans *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, parution en Janvier 2007.

I.2.2 Chapitre III

Ce chapitre est consacré à la mise en place de la méthode de domaine fictif avec interface fine. L'EDP originelle définie sur le domaine physique réel est étendue sur le domaine fictif et des conditions de transmissions algébriques liant les sauts de flux et de solution sur la frontière immergée Σ sont introduites. Pour $\alpha, \beta \geq 0$ mesurables et bornés sur Σ , g et q donnés dans $L^2(\Sigma)$, les conditions de transmissions s'écrivent

$$\llbracket (\mathbf{a}\nabla u) \cdot \mathbf{n} \rrbracket_{\Sigma} = \alpha \bar{u}|_{\Sigma} - q \quad (\text{I.2})$$

$$\overline{(\mathbf{a}\nabla u) \cdot \mathbf{n}}|_{\Sigma} = \beta [u]_{\Sigma} - g \quad (\text{I.3})$$

où le signe $\llbracket \cdot \rrbracket_{\Sigma}$ représente le saut des traces à travers Σ orienté par \mathbf{n} (normale unitaire sur Σ dirigée vers le domaine fictif extérieur) et le signe $\overline{\cdot}|_{\Sigma}$ désigne la moyenne arithmétique des traces sur Σ .

Les conditions de saut (I.2-I.3) sont plus générales que celles introduites dans la méthode IIM (voir section I.1.2.c) pour laquelle les sauts de solution et de flux sont supposés connus. Ces conditions de transmissions ont été initialement introduites pour des modèles de fracture dans [Ang03] afin

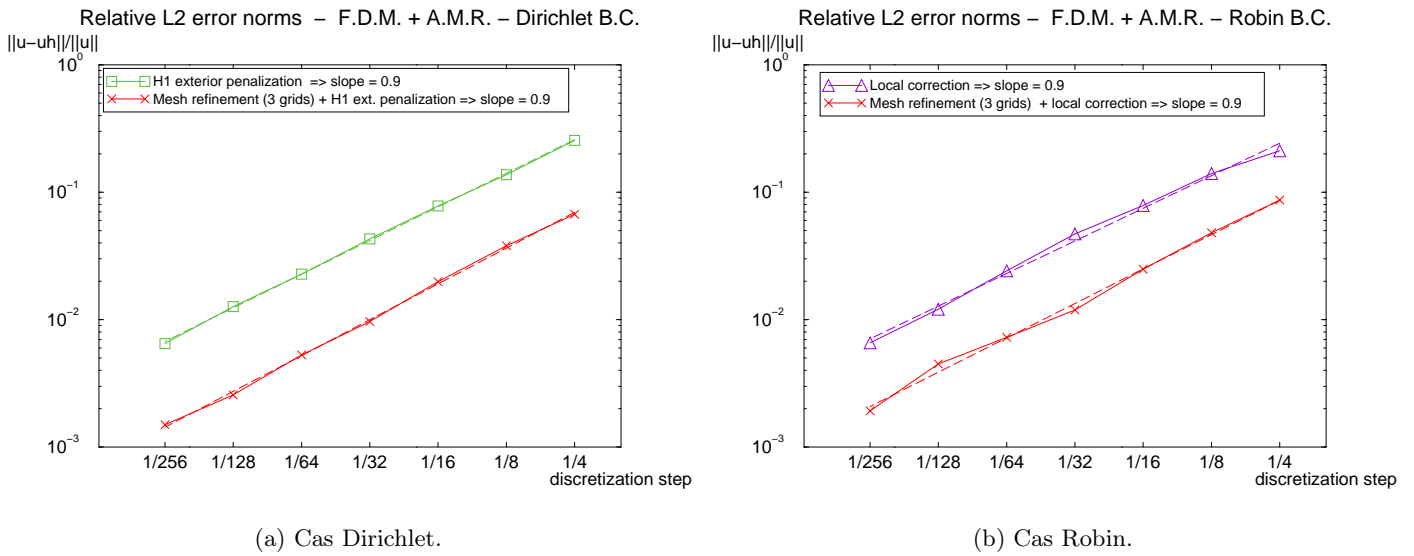


FIG. I.11 – Erreur de discrétisation avec et sans raffinement local de maillage - Méthode avec interface diffuse.

d'étendre le modèle de fracture avec uniquement sauts de solution proposé dans [Ang99b].

Une frontière immergée approchée est ensuite définie à partir du maillage cartésien du domaine fictif. Cette frontière approchée Σ_h est l'union de faces de mailles (cf. par exemple la figure I.4). L'interface fine Σ_h n'est pas définie de manière unique, cependant le domaine physique approché s'appuyant sur cette frontière doit modéliser à $\mathcal{O}(h)$ près le domaine physique réel, avec h le pas du maillage cartésien. Deux interfaces fines approchées Σ_h sont proposées dans ce chapitre : une interface dite "extérieure", telle que le domaine physique réel soit strictement inclus dans le domaine physique approché et une interface dite "coupée", telle que les faces des mailles sur lesquelles l'interface fine s'appuie, coupent la frontière immergée réelle. Les conditions de transmissions, Eq. (I.2-I.3), sont alors appliquées sur Σ_h . Les conditions aux limites immergées générales sont imposées sur Σ_h grâce à ces conditions de transmission et/ou à des termes volumiques dans l'équation résolue sur le domaine fictif extérieur (pénalisation par exemple). Parmi les différents choix possibles des coefficients surfaciques de transfert sur Σ_h , un choix particulier ($\beta = \alpha/4$) permet d'obtenir une solution sur le domaine physique approché indépendante de la solution sur le domaine fictif extérieur. Comme dans l'approche avec interface diffuse, une correction géométrique locale est introduite dans le cas d'une condition aux limites immergée de Robin (ou Neumann non homogène) pour tenir compte du rapport des mesures de surface entre l'interface immergée réelle et l'interface approchée.

Un schéma aux volumes finis avec les noeuds de discrétisation au centre des mailles est dérivé pour résoudre le système d'EDP et les conditions de transmissions supplémentaires. Afin de conserver le même schéma numérique générique sur tout le maillage, des conditions de transmissions sont appliquées sur toutes les faces des volumes de contrôle. Sur les faces qui ne sont pas situées sur Σ_h , les coefficients de transfert sont obtenus par continuité des flux et de la solution. Des inconnues auxiliaires sont introduites sur les faces des volumes de contrôle afin de définir les flux numériques.

Les conditions de transmission permettent alors d'exprimer ces inconnues auxiliaires en fonction des inconnues principales aux centres des mailles. Ce schéma aux volumes finis ne requiert ainsi que le stencil standard de $(2d + 1)$ points : ce schéma est aussi peu coûteux que le schéma classique sans sauts.

Un algorithme de raffinement local multi-niveaux de maillage a aussi été développé dans le cadre de l'approche avec interface fine. A chaque niveau de raffinement, un ensemble de patches de forme simple (rectangulaire en 2D) est généré (cf. figure I.12). Ces patches sont des sous-grilles emboîtées centrées autour d'un volume de contrôle du niveau grossier immédiatement au dessus, situé autour de l'interface fine approchée. Cette approche présente l'intérêt de pouvoir facilement implémenter de façon récursive la méthode de domaine fictif avec interface fine et sauts immergés sur chaque patch.

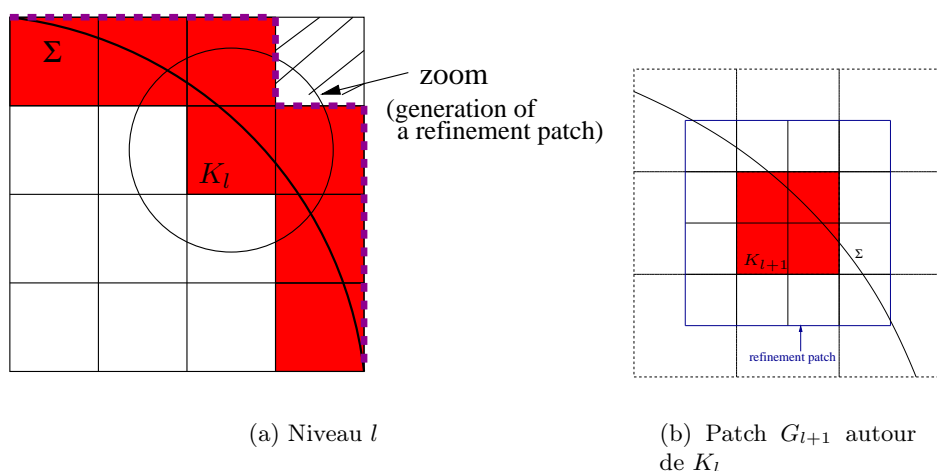


FIG. I.12 – Génération des patches locaux de raffinement

Un processus multi-grille basé sur un solveur de type F.I.C. [ACK92] (*Flux Interface Correction*) permet de corriger la solution de chaque niveau par un résidu en flux calculé à partir du niveau fin immédiatement au dessus. Ce solveur implémenté pour la méthode de domaine fictif avec interface fine doit tenir compte de la détection de la frontière immergée approchée à chaque niveau de raffinement et des conditions de sauts définies sur celle-ci. A chaque niveau l de raffinement, l'opérateur de restriction ne tient compte que des flux sur les faces du maillage du niveau $l + 1$ intérieures au domaine physique approché de ce niveau, qui sont incluses dans des faces du maillage du niveau l intérieures au domaine physique approché du niveau l . Ainsi, un résidu en flux est établi uniquement entre les flux portés par les faces intérieures des domaines physiques approchés sur chacun des deux niveaux consécutifs.

Des simulations numériques permettent de valider le modèle avec sauts immergés et l'algorithme multi-niveaux de correction en flux. Les mêmes problèmes bidimensionnels de convection-diffusion que dans l'approche avec interface diffuse sont testés sur un quart de disque immergé dans un carré. Une étude de la convergence de l'erreur de modélisation en fonction du paramètre de pénalisation η montre que la norme L^2 de l'erreur de modélisation varie en $\mathcal{O}(\eta^{1/2})$ pour une pénalisation surfacique et en $\mathcal{O}(\eta^{3/4})$ pour une pénalisation volumique H^1 . La figure I.13 représente la norme L^2 de l'erreur de discrétisation en fonction du pas h du maillage grossier pour le modèle à interface fine "extérieure" et sauts immergés sans raffinement de maillage ou combiné avec 1 à 3 niveaux de

raffinement de maillage à l'aide de patches locaux. On peut constater que la méthode de domaine fictif avec interface fine et sauts immergés est du premier ordre en norme L^2 . De plus la combinaison de cette approche avec un algorithme de raffinement de maillage à l'aide de patches locaux améliore la précision de la solution. La méthode est alors en $\mathcal{O}(h_f)$, où h_f est le pas de discrétisation de la grille locale la plus fine, jusqu'à ce que l'erreur due à la partie non raffinée du maillage soit atteinte. Des résultats similaires sont obtenus pour l'approche avec une interface fine "coupée", cependant la précision de la solution est meilleure car cette interface "coupée" approche plus précisément l'interface immergée réelle. Une étude de convergence de l'erreur de discrétisation en fonction du temps CPU permet d'apprécier le gain de temps apporté par la combinaison de l'approche domaine fictif avec un processus de raffinement de maillage à l'aide de patches locaux.

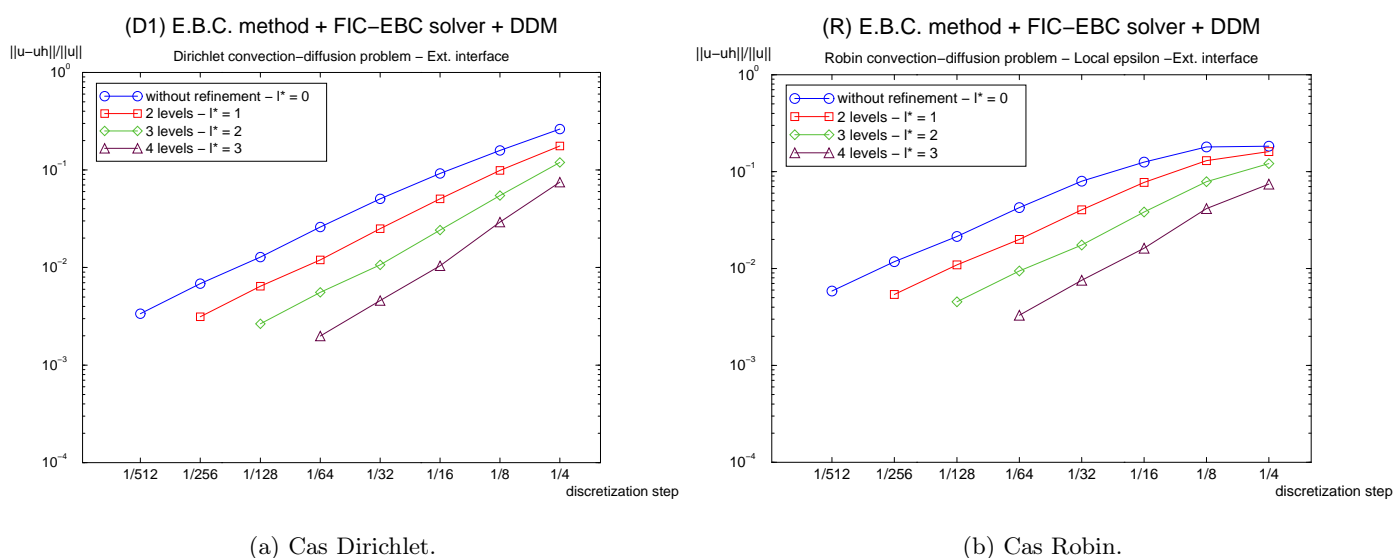


FIG. I.13 – Erreur de discrétisation avec et sans raffinement local de maillage - Méthode avec interface fine et sauts immergés - Interface approchée "extérieure".

Cette méthode de domaine fictif avec sauts immergés sur une interface fine approchée et raffinement multi-niveaux de maillage à l'aide de patches locaux fait l'objet d'une publication "**A general fictitious domain method with immersed jumps and multilevel nested structured meshes**" soumise à *Journal of Computational Physics*.

I.2.3 Chapitre IV

Une analyse théorique de la convergence de l'erreur d'une méthode d'éléments finis \mathcal{Q}_1 pour des maillages non adaptés à la géométrie du domaine d'étude est effectuée dans ce chapitre. On s'intéresse à la résolution de problèmes elliptiques en 2D sur un domaine originel Ω convexe de frontière Γ Lipschitz-continue avec des conditions aux limites de Dirichlet homogène ou de Robin (ou Neumann) :

$$\begin{cases} -\operatorname{div}(\mathbf{a}\nabla u) = f & \text{dans } \Omega, \\ u|_{\Gamma} = 0 \quad \text{ou} \quad -(\mathbf{a}\nabla u) \cdot \mathbf{n} = \alpha u + g & \text{sur } \Gamma = \partial\Omega, \end{cases} \quad (\text{I.4})$$

où $\mathbf{a} = (a_{ij})_{1 \leq i, j \leq d}$, $a_{ij} \in W^{1, \infty}(\Omega)$, vérifie les hypothèses d'ellipticité, $f \in L^2(\Omega)$, $0 \leq \alpha \in W^{1, \infty}(\Gamma)$ et $g \in H^{1/2}(\Gamma)$.

Un maillage \mathcal{T}_h à l'aide d'éléments finis \mathcal{Q}_1 rectangulaires uniformes (cf. Annexe A) est utilisé pour discrétiser le domaine Ω (cf. figure I.14). Ce maillage définit un domaine approché Ω_h tel que $|\text{mes}(\Omega_h) - \text{mes}(\Omega)| = \mathcal{O}(h)$ ou plus précisément $\text{mes}((\Omega \cup \Omega_h) \setminus (\Omega \cap \Omega_h)) = \mathcal{O}(h)$, où h est le pas de discrétisation du maillage.

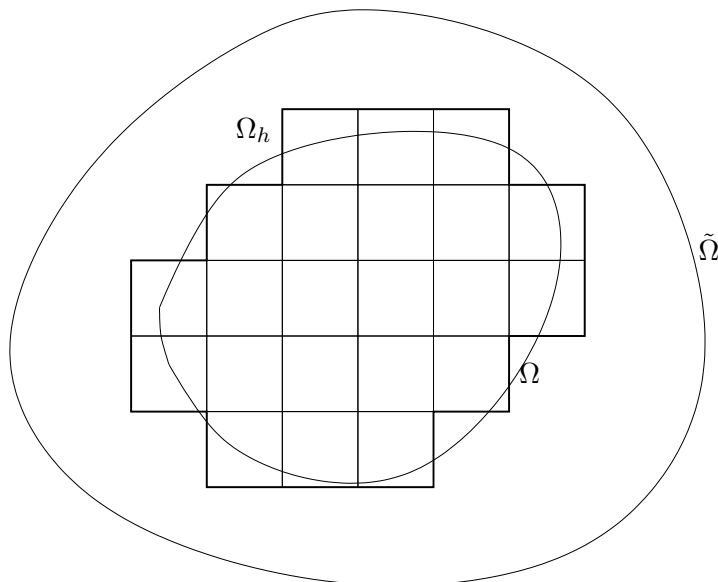


FIG. I.14 – Maillage non adapté de Ω par des éléments rectangulaires uniformes.

Cette étude peut être considérée comme un sous-problème de l'analyse de convergence d'une méthode de domaine fictif de type interface fine où les conditions aux limites immergées sont appliquées sur une frontière approchée définie par le maillage (voir chapitre III). Dans ce cas, l'analyse en maillage non adapté revient à supposer que les conditions aux limites sont imposées parfaitement sur la frontière immergée approchée ou que l'erreur liée à la méthode d'imposition des conditions aux limites est négligeable par rapport à l'erreur d'approximation de la frontière immergée. On démontre que l'ordre de convergence de la méthode varie suivant $\mathcal{O}(h^{1/2})$ en norme H^1 pour les deux types de conditions aux limites. De plus, dans le cas d'une condition de Dirichlet homogène, l'estimation en norme L^2 de l'erreur est également effectuée, et on obtient une convergence en $\mathcal{O}(h)$.

Nous formulons ci-dessous les théorèmes principaux démontrés pour chaque type de conditions aux limites. Dans le cas d'un problème de **Dirichlet homogène** défini sur Ω , des conditions aux limites de Dirichlet homogènes sont également appliquées sur la frontière Γ_h du domaine approché Ω_h . L'étude de la convergence sur des maillages non adaptés à la frontière et donc non-conformes (au sens où l'espace d'approximation n'est pas inclus dans l'espace où on cherche la solution du problème originel) a été divisée en deux parties. Nous nous sommes tout d'abord intéressés au cas de maillages dits "semi-conformes" au sens où $\Omega_h \subset \Omega$ et certains noeuds de Γ_h sont situés sur Γ . Dans ce cas l'estimation de l'erreur de convergence en $\mathcal{O}(h^{1/2})$ se démontre par des outils similaires à ceux utilisés pour des maillages adaptés (voir Raviart [RT92] par exemple). De même le passage à l'estimation en norme L^2 se fait par les arguments de dualité "traditionnels" (inégalité d'Aubin-Nitsche [Aub67, Nit68]). Le cas d'un maillage non-conforme se présente comme une généralisation du cas semi-conforme pour l'estimation de l'erreur en norme H^1 . Cependant la démonstration de

l'estimation de l'erreur en norme L^2 est moins triviale que dans le cas semi-conforme. Soient (\mathcal{P}) la formulation variationnelle associée au problème de Dirichlet homogène (I.4) et (\mathcal{P}_h) le problème de Dirichlet homogène associé sur Ω_h . Le théorème suivant est alors démontré.

Théorème I.1 (Estimation de l'erreur en maillage \mathcal{Q}_1 non-conforme - Cas Dirichlet).

Soient Ω et $\tilde{\Omega}$ deux ouverts réguliers convexes bornés tels que $\Omega \subset \tilde{\Omega}$. Soient u la solution du problème (\mathcal{P}) et u_h la solution du problème (\mathcal{P}_h) . On suppose que la solution u est dans $H^2(\Omega) \cap H_0^1(\Omega)$. Il existe alors une extension $\tilde{u} \in H^2(\tilde{\Omega})$ de u telle que $\|\tilde{u}\|_{H^2(\tilde{\Omega})} \leq C(\Omega) \|u\|_{H^2(\Omega)}$. Soit \hat{f} une extension L^2 de f dans $\tilde{\Omega}$ et $\tilde{\mathbf{a}} \in W^{1,\infty}(\tilde{\Omega})$ une extension de \mathbf{a} qui vérifie les hypothèses d'ellipticité. Introduisons

$$\hat{f} = -\operatorname{div}(\tilde{\mathbf{a}}\nabla\tilde{u}) \in L^2(\tilde{\Omega}).$$

Pour toute famille régulière $(\mathcal{T}_h)_h$ de maillages \mathcal{Q}_1 non-conformes de Ω telle que

$$\Omega_h \subset \tilde{\Omega} \quad \text{et} \quad \operatorname{mes}((\Omega \cup \Omega_h) \setminus (\Omega \cap \Omega_h)) = \mathcal{O}(h),$$

il existe des constantes C telles que

$$\|\tilde{u} - u_h\|_{H^1(\Omega_h)} \leq Ch^{1/2} (\|u\|_{H^2(\Omega)} + h^{1/2} \|\hat{f} - \tilde{f}\|_{L^2(\Omega_h)}),$$

et si le problème dual défini sur l'enveloppe convexe de $\Omega \cup \Omega_h$ est régulier alors,

$$\|\tilde{u} - u_h\|_{L^2(\Omega_h)} \leq Ch (\|u\|_{H^2(\Omega)} + h^{1/2} \|\hat{f} - \tilde{f}\|_{L^2(\Omega_h)}).$$

Pour un problème de **Robin** (ou de **Neumann** non homogène) sur Ω , les conditions aux limites appliquées sur la frontière approchée Γ_h sont des conditions aux limites de Robin analogues à celles sur Γ (cf. Eq. (I.4)). Les coefficients α et g n'étant pas définis sur Γ_h , un relèvement de ces coefficients est effectué sur Ω puis étendu sur $\tilde{\Omega}$ par $0 \leq \tilde{\alpha} \in W^{1,\infty}(\tilde{\Omega})$ et $\tilde{g} \in H^1(\tilde{\Omega})$, où $\Omega \subset \tilde{\Omega}$ et $\Omega_h \subset \tilde{\Omega}$. Sur Γ_h , les coefficients de la condition aux limites de Robin sont les traces de $\tilde{\alpha}$ et \tilde{g} divisées par un facteur correctif de surface. Ce paramètre correctif est calculé localement dans chaque maille de \mathcal{T}_h traversée par Γ (cf. chapitre III). Cette correction locale est nécessaire pour obtenir une convergence de l'erreur en $\mathcal{O}(h^{1/2})$ en norme H^1 . L'étude de convergence a été directement faite sur un maillage non-conforme, car dans ce cas, l'étude d'un maillage semi-conforme n'apportait pas de simplicité. Soient (\mathcal{P}) la formulation variationnelle associée au problème de Robin (I.4) et (\mathcal{P}_h) le problème de Robin associé sur Ω_h avec les conditions aux limites corrigées. Le résultat suivant est obtenu.

Théorème I.2 (Estimation de l'erreur en maillage \mathcal{Q}_1 non-conforme - Cas Robin).

Soient Ω et $\tilde{\Omega}$ deux ouverts réguliers convexes bornés tels que $\Omega \subset \tilde{\Omega}$. Soient u la solution du problème de Robin (\mathcal{P}) et u_h la solution du problème de Robin associé (\mathcal{P}_h) . On suppose que u appartient à $H^2(\Omega)$. Il existe donc une extension $\tilde{u} \in H^2(\tilde{\Omega})$ de u telle que $\|\tilde{u}\|_{H^2(\tilde{\Omega})} \leq C(\Omega) \|u\|_{H^2(\Omega)}$. Pour toute famille $(\mathcal{T}_h)_h$ de maillages \mathcal{Q}_1 non-conformes de Ω telle que

$$\Omega_h \subset \tilde{\Omega} \quad \text{et} \quad \operatorname{mes}((\Omega \cup \Omega_h) \setminus (\Omega \cap \Omega_h)) = \mathcal{O}(h),$$

il existe une constante C telle que

$$\|\tilde{u} - u_h\|_{H^1(\Omega_h)} \leq Ch^{1/2} (\|u\|_{H^2(\Omega)} + \|f\|_{L^2(\Omega)} + \|\tilde{\alpha}\|_{W^{1,\infty}(\Omega)} \|u\|_{H^1(\Omega)} + \|\tilde{g}\|_{H^1(\Omega)})$$

Des résultats numériques permettent de confirmer les ordres de convergence théoriques.

Cette analyse de convergence pour une méthode d'éléments finis Q_1 sur des maillages non adaptés à la frontière est soumise à *IMA Journal of Numerical Analysis* dans un article intitulé "**Convergence analysis of the Q_1 -finite element method for elliptic problems with non boundary-fitted meshes**".

I.2.4 Chapitre V

L'objectif de ce chapitre est de valider la méthode de domaine fictif avec interface diffuse sur un cas industriel 3D. Un écoulement diphasique (eau-vapeur) est simulé sur une maquette d'un échangeur de chaleur d'une centrale nucléaire à eau pressurisée. Cet échangeur, appelé générateur de vapeur (GV), est un des éléments essentiels d'une centrale électronucléaire. C'est dans ce composant qu'est produite la vapeur alimentant la turbine générant l'électricité.

Cette maquette a été utilisée pour qualifier le logiciel Génépi [GO96, GBG⁺89] développé au CEA simulant les écoulements diphasiques dans les GV. Ce logiciel étant basé sur une méthode de résolution numérique par éléments finis, la méthode de domaine fictif avec interface diffuse a pu rapidement être implémentée. Cependant, étant donné que ce logiciel a été développé pour traiter des maillages adaptés à la géométrie du domaine, il ne tire pas profit de la structure cartésienne du maillage. Dans ce cas, il n'était pas intéressant (en temps de calcul) d'implémenter également l'algorithme de raffinement de maillage.

L'équation résolue est une équation de convection-diffusion portant sur l'enthalpie du mélange diphasique avec conditions aux limites mixtes sur une frontière immergée (deux conditions de Dirichlet non homogènes et une conditions de Neumann homogène). Ce problème n'admettant pas de solution analytique connue, la solution prise comme solution de référence est celle obtenue sur un maillage adapté avec un grand nombre de mailles (143 360 mailles). Nous pouvons ainsi comparer la solution obtenue avec l'approche par domaine fictif à celle de référence à travers différentes quantités physiques (puissance échangée, isovaleurs et profils d'enthalpie). Les résultats des simulations sont très satisfaisants (cf. figure I.15 et figure I.16 par exemple).

Ce cas test a permis de valider l'approche domaine fictif sur un cas 3D industriel complexe. La pertinence, l'efficacité et la facilité de mise en œuvre des méthodes de domaine fictif présentées dans cette thèse permettent de présager de nouvelles applications possibles de ces méthodes, notamment dans le cas industriel pour mieux comprendre et maîtriser certains phénomènes tels que les interactions fluide/structure autour des obstacles (tubes d'un générateur de vapeur par exemple), les surfaces ou milieux libres...

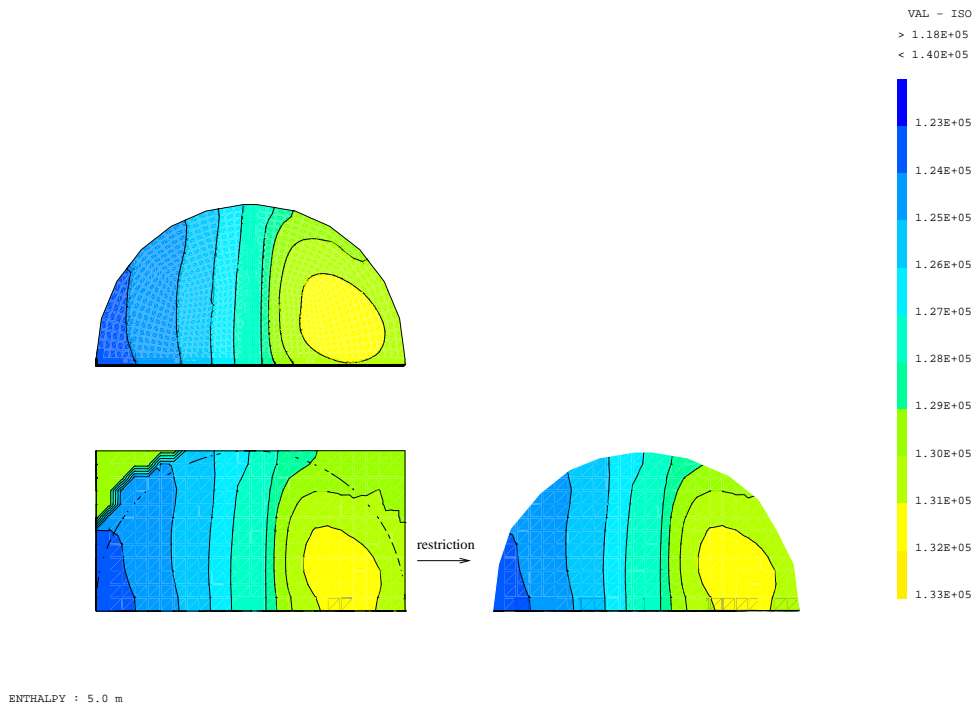


FIG. I.15 – Isovaleurs de l'enthalpie sur une section située à une hauteur de 5 m (mi-hauteur) : maillage de référence adapté (en haut) et maillage cartésien à 57 600 cellules (en bas).

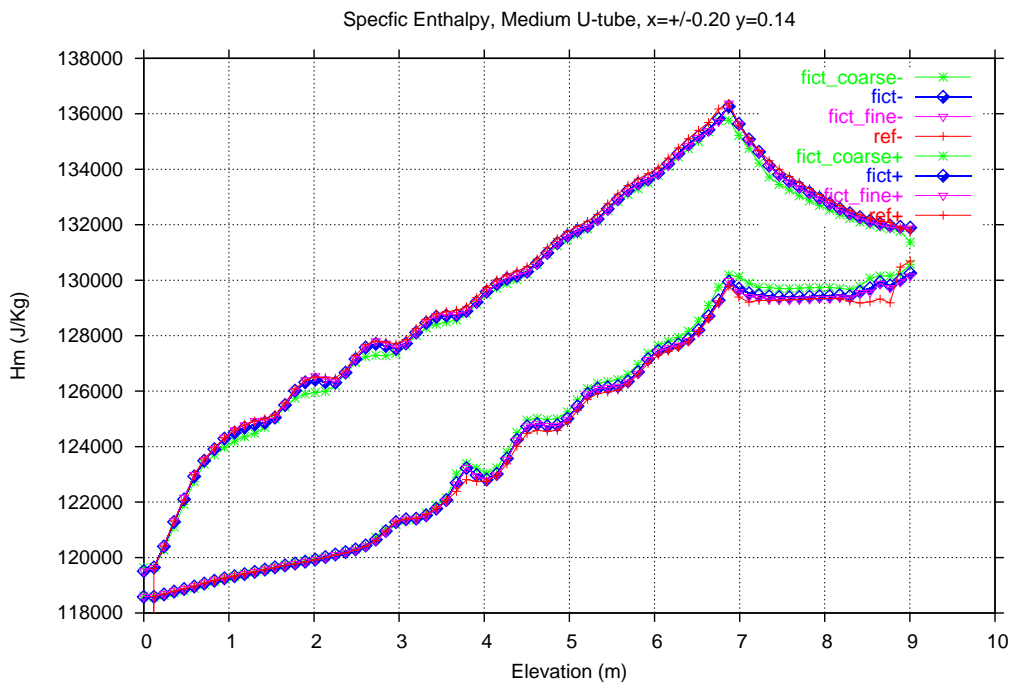


FIG. I.16 – Profils de l'enthalpie spécifique à la position d'un cintre moyen (c3) : maillages cartésiens à 7 200 (fict_coarse), 57 600 (fict) et 460 800 (fict_fine) cellules et cas de référence (ref). La notation '+' ou '-' est relative au signe de la coordonnée x .

Chapitre II

Une méthode de domaine fictif avec interface diffuse

“A fictitious domain approach with spread interface for elliptic problems with general boundary conditions”,

by Isabelle Ramière, Philippe Angot and Michel Belliard,

published in Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 2007 [RAB07].

Contents

II.1 Introduction	29
II.2 Spread interface approach for diffusion problems	30
II.2.1 Presentation of the original problem ($\tilde{\mathcal{P}}$)	30
II.2.2 Fictitious problem (\mathcal{P})	31
II.2.3 Methodology and different variants	32
II.2.3.a Embedded Dirichlet B.C.	33
II.2.3.b Embedded Robin B.C.	33
II.3 Spread interface approach for convection-diffusion problems	37
II.3.1 Presentation of the study	37
II.3.2 Treatment of the original B.C.	38
II.3.2.a Embedded Dirichlet B.C.	38
II.3.2.b Embedded Robin or Neumann B.C.	38
II.4 Spread interface approach and local adaptive mesh refinement	39
II.4.1 Multi-grid method	39
II.4.2 Local Defect Correction (L.D.C.) method	40
II.5 Numerical examples	41
II.5.1 Test problems	42
II.5.2 Numerical methods	43
II.5.2.a Approximation spaces and numerical solver	43
II.5.2.b Notations	43
II.5.2.c Local adaptive mesh refinement	44
II.5.3 Results	45
II.5.3.a Diffusion problems	45
II.5.3.b Convection-diffusion problems	51
II.6 Conclusion	55

Abstract

The aim of this article is to solve second-order elliptic problems in an original physical domain using a *fictitious domain method with a spread interface approach*. The main idea of the fictitious domain approach consists in immersing the original domain of study into a geometrically bigger and simpler one called fictitious domain. As the spatial discretization is being performed in the fictitious domain, this method allows the use of *structured meshes*. The discretization is not boundary-fitted to the original physical domain. This paper describes several ways to impose Dirichlet, Robin or Neumann boundary conditions on a spread immersed interface, without locally modifying the numerical scheme and without using Lagrange multipliers.

The numerical applications focus on diffusion and convection problems in the unit disk, with Dirichlet or Robin boundary conditions. For such problems, analytical solutions can be determined for a correctly chosen source term. The numerical resolution is performed using a \mathcal{Q}_1 Finite Element scheme. The spread interface approach is then combined with a local adaptive mesh refinement algorithm in order to increase the precision in the vicinity of the immersed boundary. The L^2 norm of the errors is computed in order to evaluate the capability of the method.

Immersed boundaries are found in many industrial applications like two-phase flow simulations, fluid/structure interaction, etc. This article represents a first step towards the simulation of these kinds of applications.

II.1 Introduction

Let $\tilde{\Omega}$ be an open bounded domain in \mathbb{R}^d ($d = 2, 3$) with a boundary $\partial\tilde{\Omega}$ that is sufficiently regular. The resolution of a given problem ($\tilde{\mathcal{P}}$) in $\tilde{\Omega}$ with different kinds of boundary conditions (B.C.) is considered. When the shape of $\partial\tilde{\Omega}$ is geometrically complex, classical methods involving structured or unstructured boundary-fitted meshes induce a loss of efficiency and rapidity of numerical solvers in comparison with Cartesian meshes. Moreover, in the case of moving boundaries, the cost of mesh generation and re-meshing can be significant.

In the fictitious domain approach [Sau63, Mar82], the *original domain* $\tilde{\Omega}$ is embedded in a geometrically bigger and simply-shaped other one Ω , called *fictitious domain* (cf. Figure II.1(a)).

The spatial discretization is now performed in Ω , independently of the shape of the original domain $\tilde{\Omega}$. The original domain and the computational one are uncoupled. Numerical methods involving structured and Cartesian meshes can be used. The advantages of these methods are well known: natural tensor formulation, easy implementation for fast solvers (based for instance on finite volume methods with Cartesian grids) and multi-level methods [ACK93], good convergence properties, etc. Consequently, the resolution of the new problem in Ω will be fast and simple.

The main issue lies in both the choice of the problem (\mathcal{P}) solved in the fictitious domain Ω and in the numerical scheme used for the resolution. These two choices have to be linked in order to handle the original boundary conditions on $\partial\tilde{\Omega}$. The B.C. on the original boundary $\partial\tilde{\Omega}$ must still be enforced so that the solution u of the extended problem (\mathcal{P}) matches the solution \tilde{u} of the original problem ($\tilde{\mathcal{P}}$) in the original domain $\tilde{\Omega}$.

The fictitious domain method was introduced in the sixties [Sau63] and for a few years now, fictitious domain methods have been hugely developed and have arisen in different fields: computational fluid dynamics [KAPC00], medical simulation [CM00], etc. Numerically, there are two main approaches available to deal with the embedded boundary conditions on the immersed boundary:

- “Thin” interface approaches: the original boundary is approximated without being enlarged in the normal direction. The original boundary and the approximate one lie in the same \mathbb{R}^{d-1}

space. For example, the following methods can be found in this group: truncated domains methods [MCJ01, YMUS99], immersed interface methods (I.I.M.) [LL94, WB00], penalty methods [Sau63, Mar82, GPWZ96, ABF99, Ang99b, KAPC00], fictitious domain methods with Lagrange multipliers [DDG⁺92, GPP94, GK98], an adapted Galerkin method proposed in [Lat04], and recent work on a fictitious model with flux and solutions jumps for general embedded boundary conditions [Ang05, ALR05].

- “Spread” interface approaches: the support of the approximate interface is larger than the original one. The approximate interface has one dimension more than the original one. For example, the spread interface can be a ring containing the immersed interface. This kind of approach can be found in [Mar82, Ruk67], in fluid/structure applications with the immersed boundary method (I.B.M.) [Pes72, Pes02], and more recently with the fat boundary method [Mau01, Ism04].

Numerous papers have been dedicated to embedded Dirichlet or Neumann B.C., e.g. [Sau63, Mar82, LL94, GPWZ96, GK98, MCJ01, Tom97a] and the references herein. Only a few studies have been devoted to embedded Robin/Fourier B.C. [Kop74, Ruk67, Mar82, Ang99b, Ang05, ALR05].

The fictitious domain approach introduced here deals with Dirichlet, Robin and Neumann B.C. on an immersed interface **without having to change the numerical scheme near the immersed interface or use Lagrange multipliers**. Since the fictitious problem (\mathcal{P}) is not a saddle-point problem, the inf-sup condition does not need verifying (e.g. [GK98, Tom97a]). Moreover, only one discretization grid is used. The fictitious domain is meshed with a structured regular uniform grid. The fictitious domain method presented in this article easily simulates free-boundary problems with possible boundary deformations without increasing the computational cost. A boundary non-conforming mesh is used, which conserves the first-order accuracy. The precision of the solution is improved by a local mesh refinement in the vicinity of the immersed interface.

A “**spread**” interface approach (see section II.2.2) has been chosen here compared to our other works [Ang05, ALR05] which deal with an approximate “thin” interface. In comparison with the original problem ($\tilde{\mathcal{P}}$), the terms of the fictitious problem (\mathcal{P}) solved all over the fictitious domain Ω are designed to handle the original B.C. of ($\tilde{\mathcal{P}}$). The restriction of the problem (\mathcal{P}) over the original domain $\tilde{\Omega}$ is chosen to be similar to ($\tilde{\mathcal{P}}$). Appropriate data in the external domain Ω_e and B.C. on $\partial\Omega$ have to be determined.

In the following sections, we will study the resolution of an original elliptic problem ($\tilde{\mathcal{P}}$), which can be either a diffusion or a convection-diffusion problem. The associated problem (\mathcal{P}) solved in the fictitious domain is introduced. Several ways to impose usual B.C. on a spread approximate immersed interface are then discussed. This fictitious domain method is then combined with a multi-grid local mesh refinement to increase the precision of the solution. The last section is dedicated to numerical resolutions. A F.E. scheme is implemented and several results are provided to illustrate the accuracy of the method.

II.2 The fictitious domain method with spread interface for diffusion problems

II.2.1 Presentation of the original problem ($\tilde{\mathcal{P}}$)

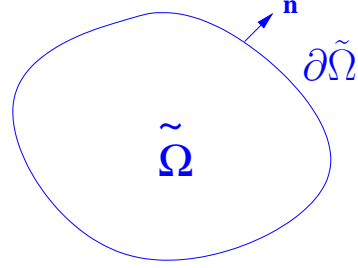
For sake of simplicity we choose to focus on 2D problems, even though the formulations can be extended to cover 3D problems without any difficulty. The resolution of a **diffusion-reaction**

problem $(\tilde{\mathcal{P}})$ in the original domain $\tilde{\Omega}$ is investigated.

Let us consider the following model problem:

For $\tilde{\mathbf{a}} \in (L^\infty(\tilde{\Omega}))^{d \times d}$, $\tilde{b} \in (L^\infty(\tilde{\Omega}))$ and $\tilde{f} \in L^2(\tilde{\Omega})$, find a function \tilde{u} defined on $\tilde{\Omega}$ such that:

$$(\tilde{\mathcal{P}}) \quad \begin{cases} -\operatorname{div}(\tilde{\mathbf{a}} \cdot \nabla \tilde{u}) + \tilde{b} \tilde{u} = \tilde{f} & \text{in } \tilde{\Omega} \\ \text{B.C.} & \text{on } \partial \tilde{\Omega} \end{cases}$$



where B.C. represents several types of boundary conditions:

- A Dirichlet condition: $\tilde{u} = u_D$ with $u_D \in H^{1/2}(\partial \tilde{\Omega})$,
- A Robin (or Fourier) condition: $-(\tilde{\mathbf{a}} \cdot \nabla \tilde{u}) \cdot \mathbf{n} = \alpha_R \tilde{u} + g_R$, with $\alpha_R \in L^\infty(\partial \tilde{\Omega})$; $\alpha_R \geq 0$, and $g_R \in L^2(\partial \tilde{\Omega})$ (with \mathbf{n} the outward unit normal vector on $\partial \tilde{\Omega}$)
Remark: a Neumann condition, $-(\tilde{\mathbf{a}} \cdot \nabla \tilde{u}) \cdot \mathbf{n} = g$, is considered as a particular Robin condition where $\alpha_R \equiv 0$ and $g_R \equiv g$.

Moreover, the tensor of diffusion $\tilde{\mathbf{a}} \equiv (\tilde{a}_{ij})_{1 \leq i, j \leq d}$ and the reaction coefficient \tilde{b} verify the classical ellipticity assumptions:

$$\exists \tilde{a}_0 > 0, \forall \boldsymbol{\xi} \in \mathbb{R}^d, \tilde{\mathbf{a}}(x) \cdot \boldsymbol{\xi} \cdot \boldsymbol{\xi} \geq \tilde{a}_0 |\boldsymbol{\xi}|^2 \text{ a.e. in } \tilde{\Omega} \quad (A1)$$

where $|\cdot|$ is the Euclidean norm in \mathbb{R}^d

$$\exists \tilde{b}_0 \geq 0, \tilde{b}(x) \geq \tilde{b}_0 \text{ a.e. in } \tilde{\Omega} \quad (A2)$$

In this case, classical variational techniques (e.g. [DL88, RT92]) prove that the solution \tilde{u} of the original problem $(\tilde{\mathcal{P}})$ exists and is the unique solution \tilde{u} in the space $H^1(\tilde{\Omega})$ satisfying the weak formulation of $(\tilde{\mathcal{P}})$.

II.2.2 Fictitious problem (\mathcal{P})

The original domain $\tilde{\Omega}$ is embedded inside a fictitious domain Ω such that $\Omega = \tilde{\Omega} \cup \Sigma \cup \Omega_e$, where Ω_e is the external fictitious domain and Σ the common interface between $\tilde{\Omega}$ and Ω_e (see Figure II.1(a) and II.4(b)). This original interface Σ is called the *immersed interface*. The fictitious domain Ω is chosen to be geometrically simple (rectangular for example). If $\partial \tilde{\Omega} \cap \partial \Omega \neq \emptyset$ (see Figure II.4(b)), the boundary of $\tilde{\Omega}$ is defined by $\partial \tilde{\Omega} = \tilde{\Gamma} \cup \Sigma$, and the boundary of Ω by $\partial \Omega = \tilde{\Gamma} \cup \Gamma_e$. Otherwise (see Figure II.1(a)), $\tilde{\Gamma} \equiv \emptyset$, so $\partial \tilde{\Omega} \equiv \Sigma$ and $\partial \Omega \equiv \Gamma_e$.

The computational domain Ω is uniformly meshed with a family $\mathcal{T}_h = \{K\}$ of disjointed rectangular cells K such that $\tilde{\Omega} = \bigcup_{K \in \mathcal{T}_h} \bar{K}$. A **“spread” interface approach** [Pes02, RBA05] is chosen to approximate the immersed interface Σ . The approximate interface $\omega_{h,\Sigma}$ is the open bounded domain defined as $\omega_{h,\Sigma} = \bar{\omega}_{h,\Sigma} \setminus \partial \bar{\omega}_{h,\Sigma}$, where $\bar{\omega}_{h,\Sigma} = \bigcup_{K \in \mathcal{T}_h} \{\bar{K}, K \cap \Sigma \neq \emptyset\}$. (cf. Figure II.1(b)).

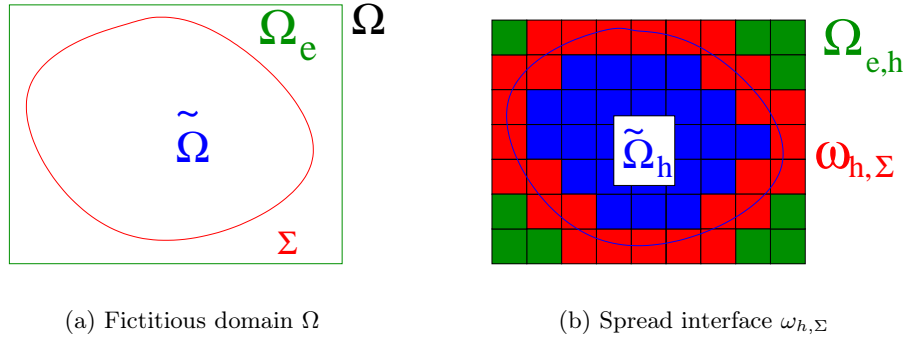


Figure II.1: Example of an original domain $\tilde{\Omega}$ immersed in the fictitious rectangular domain Ω . Discretization of the fictitious domain $\Omega : \Omega = \tilde{\Omega}_h \cup \omega_{h,\Sigma} \cup \Omega_{e,h}$

The problem (\mathcal{P}) solved in the fictitious domain Ω has the following generic form:

$0 < \eta$ being a real parameter specified later, find u_η^h (depending on the mesh \mathcal{T}_h) a real-valued function in Ω such that

$$(\mathcal{P}) \quad \begin{cases} -\operatorname{div}(\mathbf{a} \cdot \nabla u_\eta^h) + b u_\eta^h = f & \text{in } \Omega \\ \text{original B.C. of } (\tilde{\mathcal{P}}) & \text{on } \tilde{\Gamma} \\ \text{suitable B.C. for } u_\eta^h & \text{on } \Gamma_e \end{cases}$$

where $\mathbf{a} \in (L^\infty(\Omega))^{d^2}$, $b \in L^\infty(\Omega)$, $f \in L^2(\Omega)$ such that:

$$\mathbf{a}|_{\tilde{\Omega}_h} = \tilde{\mathbf{a}}|_{\tilde{\Omega}_h}, \quad b|_{\tilde{\Omega}_h} = \tilde{b}|_{\tilde{\Omega}_h}, \quad f|_{\tilde{\Omega}_h} = \tilde{f}|_{\tilde{\Omega}_h},$$

and \mathbf{a} and b respectively satisfy the assumptions (A1) and (A2) in Ω .

Remark: As well as u_η^h , the coefficients \mathbf{a} , b and f depend on h and η . However for sake of clarity, we omit these indexes in the notations.

Once again, for B.C. correctly chosen on Γ_e (such that the problem (\mathcal{P}) is well-posed), variational techniques [DL88, RT92] make it possible to conclude that the solution u_η^h of the problem (\mathcal{P}) exists, is unique and belongs to $H^1(\Omega)$.

The extensions \mathbf{a} , b and f of the original coefficients enable us to take account of the immersed boundary [KAPC00, Ang99b, Ang89]. For each kind of boundary conditions lying on the immersed boundary Σ , different possibilities to enforce these conditions exist using a spread approximation of the immersed interface Σ and are introduced in the next sections. No variant modifies the numerical scheme or introduces local unknowns. It is expected that: $u_\eta^h|_{\tilde{\Omega}_h} \simeq \tilde{u}|_{\tilde{\Omega}_h}$.

II.2.3 Methodology and different variants

For sake of clarity, it is assumed that u_D , α_R and g_R are constant. The non-constant case can be treated just as easily. The non-constant data are then replaced by their extensions in $\omega_{h,\Sigma} \cup \Omega_{e,h}$ such that the traces on Σ of the extensions are equal to the original data on Σ .

II.2.3.a Embedded Dirichlet B.C.

The Dirichlet embedded B.C. are treated by **volume penalization** (see e.g. [Ang99a]).

Spread interface penalization

The first possibility to have a Dirichlet condition on Σ is to penalize the Dirichlet value in the approximate interface $\omega_{h,\Sigma}$.

Let $0 < \eta \ll 1$ be a real penalty parameter which is likely to tend to zero. The **L² penalty** [Ang99a] consists in penalizing the reaction coefficient b and the source term f in the spread interface:

$$b = \frac{1}{\eta}, \quad f = \frac{1}{\eta}u_D \quad \text{in } \omega_{h,\Sigma}$$

Then, the penalty parameter enforces $u_\eta^h \simeq u_D$ in the approximate immersed boundary $\omega_{h,\Sigma}$. By defining the spread interface, it implies $u_\eta^h \simeq u_D$ on the original boundary Σ .

The **H¹ penalty** [Ang99a] is a particular case of L^2 penalty where the diffusion coefficient \mathbf{a} is also penalized in $\omega_{h,\Sigma}$ ($\mathbf{a} = \frac{1}{\eta}\mathbf{Id}$). In this case, the value of u and the gradient ∇u are penalized.

With a penalization of the spread interface $\omega_{h,\Sigma}$, the equation solved in $\Omega_{e,h}$ has no influence on the solution obtained in the original domain. So in $\Omega_{e,h}$, the equation coefficients are arbitrary extensions of the original coefficients of $\tilde{\mathcal{P}}$ (as long as the whole problem (\mathcal{P}) in Ω is well-posed).

Concerning the B.C. on Γ_e , the Dirichlet B.C. $u_\eta^h = u_D$ must be imposed only on $\Gamma_e \cap \partial\omega_{h,\Sigma}$. The rest of the B.C. on Γ_e can be arbitrary chosen.

Remark: If $\Gamma_e \cap \partial\omega_{h,\Sigma} \neq \emptyset$, the generalized Poincaré inequality [BF06] holds in $\omega_{h,\Sigma}$. The H^1 penalty required penalizing the diffusion coefficient \mathbf{a} only. The reaction coefficient b and the source term f don't need to be penalized any further.

Exterior penalization

The second approach consists in penalizing u_η^h at u_D only in the external domain $\Omega_{e,h}$ (the approximate interface $\omega_{h,\Sigma}$ is not penalized). All the external nodes are penalized at u_D so the solution tends to u_D near the original immersed boundary Σ . In this case, the coefficients of the original problem ($\tilde{\mathcal{P}}$) are extended in $\tilde{\Omega}_h \cup \omega_{h,\Sigma}$.

As in the previous case, the **L² penalty** is obtained by setting:

$$b = \frac{1}{\eta}, \quad f = \frac{1}{\eta}u_D \quad \text{in } \Omega_{e,h}$$

Seeing that in this case the B.C. $u|_{\Gamma_e} = u_D$ holds on Γ_e , the Poincaré inequality in $\Omega_{e,h}$ makes it possible to obtain the **H¹ penalty** by penalizing $\mathbf{a}|_{\Omega_{e,h}} = \frac{1}{\eta}\mathbf{Id}$ only. This approach is similar to the one introduced in [Sau63, Mar82].

These two variants are summarized in Table II.1.

II.2.3.b Embedded Robin B.C.

Theoretical aspect

The Robin condition is treated in a different manner than the Dirichlet one. Let us consider an extended diffusion problem (\mathcal{P}_e) of ($\tilde{\mathcal{P}}$) in Ω_e with a unique solution $u_e \in H^1(\Omega_e)$ such that $u_e|_\Sigma = \tilde{u}|_\Sigma$.

Let \mathbf{a} and b be L^∞ -extension of $\tilde{\mathbf{a}}$ and \tilde{b} respectively in Ω and f a L^2 -extension of \tilde{f} in Ω such that:

$$\star \mathbf{a} = \begin{cases} \tilde{\mathbf{a}} & \text{in } \tilde{\Omega} \\ \mathbf{a}_e & \text{in } \Omega_e \end{cases} \quad \star b = \begin{cases} \tilde{b} & \text{in } \tilde{\Omega} \\ b_e & \text{in } \Omega_e \end{cases} \quad \star f = \begin{cases} \tilde{f} & \text{in } \tilde{\Omega} \\ f_e & \text{in } \Omega_e \end{cases}$$

We then define $u \in H^1(\Omega)$ such that :

$$u|_{\tilde{\Omega}} := \tilde{u} \text{ and } u|_{\Omega_e} := u_e.$$

By considering the transmission problem between $\tilde{\Omega}$ and Ω_e , using the weak formulations of the subproblems defined in $\tilde{\Omega}$ and Ω_e , the following can be expressed:

$\forall v \in H^1(\Omega)$

$$\begin{aligned} \int_{\tilde{\Omega}} \mathbf{a} \cdot \nabla u \cdot \nabla v \, dx + \int_{\tilde{\Omega}} b v \, dx - \int_{\Sigma} (\mathbf{a} \cdot \nabla u)^- \cdot \mathbf{n} v \, ds - \int_{\tilde{\Gamma}} (\mathbf{a} \cdot \nabla u) \cdot \mathbf{n} v \, ds &= \int_{\tilde{\Omega}} f v \, dx & \text{in } \tilde{\Omega} \\ \int_{\Omega_e} \mathbf{a} \cdot \nabla u \cdot \nabla v \, dx + \int_{\Omega_e} b v \, dx + \int_{\Sigma} (\mathbf{a} \cdot \nabla u)^+ \cdot \mathbf{n} v \, ds - \int_{\Gamma_e} (\mathbf{a} \cdot \nabla u) \cdot \mathbf{n} v \, ds &= \int_{\Omega_e} f v \, dx & \text{in } \Omega_e \end{aligned}$$

where \mathbf{n} denotes the outward normal unit vector either on $\tilde{\Gamma}$, on Γ_e , or on Σ . In the latter case, \mathbf{n} is oriented from $\tilde{\Omega}$ to Ω_e . Thus, $(\mathbf{a} \cdot \nabla u)^- \cdot \mathbf{n}|_{\Sigma}$ and $(\mathbf{a} \cdot \nabla u)^+ \cdot \mathbf{n}|_{\Sigma}$ are the traces of $(\mathbf{a} \cdot \nabla u) \cdot \mathbf{n}|_{\tilde{\Omega}}$ and $(\mathbf{a} \cdot \nabla u) \cdot \mathbf{n}|_{\Omega_e}$ on each side of Σ respectively.

Therefore, the addition of the two formulations in $\tilde{\Omega}$ and Ω_e leads to:

$$\int_{\Omega} \mathbf{a} \cdot \nabla u \cdot \nabla v \, dx + \int_{\Omega} b u v \, dx + \int_{\Sigma} [(\mathbf{a} \cdot \nabla u) \cdot \mathbf{n}]_{\Sigma} v \, ds - \int_{\partial\Omega} (\mathbf{a} \cdot \nabla u) \cdot \mathbf{n} v \, ds = \int_{\Omega} f v \, dx \quad (\text{II.1})$$

where $[(\mathbf{a} \cdot \nabla u) \cdot \mathbf{n}]_{\Sigma} = (\mathbf{a} \cdot \nabla u)^+ \cdot \mathbf{n}|_{\Sigma} - (\mathbf{a} \cdot \nabla u)^- \cdot \mathbf{n}|_{\Sigma}$

Then:

$$\int_{\Omega} \mathbf{a} \cdot \nabla u \cdot \nabla v \, dx + \int_{\Omega} b u v \, dx - \int_{\partial\Omega} (\mathbf{a} \cdot \nabla u) \cdot \mathbf{n} v \, ds = \int_{\Omega} f v \, dx - \langle [(\mathbf{a} \cdot \nabla u) \cdot \mathbf{n}]_{\Sigma} \delta_{\Sigma}, v \rangle$$

where δ_{Σ} refers to the Dirac delta measure supported on Σ .

In the distribution sense, the following equation is obtained in Ω :

$$-div(\mathbf{a} \cdot \nabla u) + b u = f - [(\mathbf{a} \cdot \nabla u) \cdot \mathbf{n}]_{\Sigma} \delta_{\Sigma} \quad (\text{II.2})$$

The jump of flux across Σ can be interpreted as a measure source term carried by Σ .

In our case, the following expression is required

$$-(\mathbf{a} \cdot \nabla u)^- \cdot \mathbf{n}|_{\Sigma} = \alpha_R u|_{\Sigma} + g_R$$

It is chosen to impose $-(\mathbf{a} \cdot \nabla u)^+ \cdot \mathbf{n}|_{\Sigma} \approx 0$ by setting $\mathbf{a}|_{\Omega_e} = \eta \mathbf{Id}$, so that

$$[(\mathbf{a} \cdot \nabla u) \cdot \mathbf{n}]_{\Sigma} = \alpha_R u|_{\Sigma} + g_R$$

In the end, the following is obtained:

$$-div(\mathbf{a} \cdot \nabla u_{\eta}) + b u_{\eta} = f - [\alpha_R u_{\eta} + g_R] \delta_{\Sigma} \quad (\text{II.3})$$

However, with a Cartesian mesh on Ω , the support of Σ is not exactly defined. A characteristic parameter ϵ_h is introduced in order to approximate the measure δ_{Σ} supported by Σ by mollifiers [Bre00] $\delta_{\omega_{h,\Sigma}}$ on the spread interface $\omega_{h,\Sigma}$. The term $\delta_{\omega_{h,\Sigma}}$ is a discrete Dirac function on the

spread interface. Here, this discrete delta function is roughly approximated by a crenel function in Ω ($\delta_{\omega_{h,\Sigma}} = 1$ in $\omega_{h,\Sigma}$ and 0 elsewhere) whereas a smoothed approximation using interaction equations is performed in the I.B.M., e.g. [Pes72, CM00, Pes02].

The principle is the following:

$$\int_{\Sigma} \{\alpha_R u_{\eta} + g_R\} ds = \int_{\omega_{h,\Sigma}} \frac{\alpha_R u_{\eta}^h + g_R}{\epsilon_h} dx \quad (\text{II.4})$$

The parameter ϵ_h can be estimated in several manners, some of which will be presented in the next paragraph.

The equation solved in Ω is:

$$-div(\mathbf{a} \cdot \nabla u_{\eta}^h) + b u_{\eta}^h = f - \left[\frac{\alpha_R}{\epsilon_h} u_{\eta}^h + \frac{g_R}{\epsilon_h} \right] \delta_{\omega_{h,\Sigma}} \quad (\text{II.5})$$

The coefficients of the original problem ($\tilde{\mathcal{P}}$) are extended in $\tilde{\Omega}_h \cup \omega_{h,\Sigma}$. The coefficient of the problem (\mathcal{P}) are obtained by identifying the equation (II.5) with the generic formulation of the problem (\mathcal{P}) (see Table II.1).

As in the Dirichlet case with a spread interface penalization, only the B.C. of the nodes lying on $\Gamma_e \cap \partial\omega_{h,\Sigma}$ induce the solution in the original domain. These B.C. must be homogeneous Neumann B.C. in order to have an external flux equal to zero.

Remark: *Numerical schemes allowing local jumps of the solution u make it possible to also simulate a Robin immersed B.C. (e.g. [Ang99b, ALR05, Ang05]).*

Numerical aspect

There are many ways to estimate the parameter ϵ_h . This paper presents three of them representing different kinds of approximations (see [RBA05, RAB05]). If h is the discretization step, Angot [Ang89] showed that ϵ_h is in $\mathcal{O}(h)$.

- A coarse *global approximation* of ϵ in Equation (II.4) holds:

$$\int_{\Sigma} ds = \int_{\omega_{h,\Sigma}} \frac{1}{\epsilon_h} dx \quad (\text{II.6})$$

- ★ In a first approach, it is assumed that ϵ_h is constant all over $\omega_{h,\Sigma}$.

$$\epsilon_h = \frac{meas(\omega_{h,\Sigma})}{meas(\Sigma)} \quad (\text{II.7})$$

- ★ In the second approach, the value of ϵ_h is given element by element, we will call it ϵ_K in each element K . In the equation (II.4), the integration in $\omega_{h,\Sigma}$ is weighted by a coefficient τ . This coefficient represents the presence rate of the original domain in each element K crossed by the boundary Σ ($K \subset \omega_{h,\Sigma}$). By construction, τ is constant on each K :

$$\tau_K = \frac{\text{volume of } \tilde{\Omega} \text{ included in } K}{\text{volume of the element } K}$$

By this way, the right hand side of (II.6) is only integrated in the original domain included in $\omega_{h,\Sigma}$. Introducing $\epsilon_h = \frac{\epsilon'_h}{\tau}$ with a constant ϵ'_h the following is obtained:

$$\begin{aligned} \int_{\Sigma} ds &= \int_{\omega_{h,\Sigma}} \frac{1}{\epsilon'_h} \tau dx \\ \int_{\Sigma} ds &= \sum_{\{K \subset \omega_{h,\Sigma}\}} \int_K \frac{1}{\epsilon'_h} \tau_K dx \end{aligned}$$

τ_K being constant on K :

$$\begin{aligned}\epsilon'_h &= \frac{\sum_{\{K \subset \omega_{h,\Sigma}\}} [\tau_K \cdot \text{meas}(K)]}{\text{meas}(\Sigma)} \\ \epsilon_K &= \frac{\sum_{\{K \subset \omega_{h,\Sigma}\}} [\tau_K \cdot \text{meas}(K)]}{\tau_K \cdot \text{meas}(\Sigma)}\end{aligned}\quad (\text{II.8})$$

- A local approximation of ϵ_h consists in calculating ϵ_h in each cell $K \subset \omega_{h,\Sigma}$:

$$\int_{\Sigma_K} ds = \int_K \frac{1}{\epsilon_K} dx \quad (\text{II.9})$$

with $\Sigma_K = \Sigma \cap K$

As Σ_K is not simply defined, the boundary Σ is piecewise linear approximated by a segment $\Sigma_{l,K}$ in each cell $K \subset \omega_{h,\Sigma}$ (see Figure II.2).

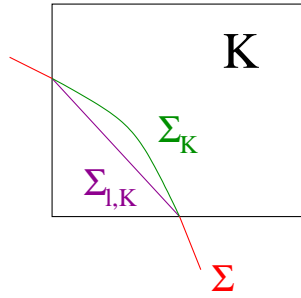


Figure II.2: Linear approximation of Σ in a rectangular cell $K \subset \omega_{h,\Sigma}$

The equation (II.9) is written using the linear approximation $\Sigma_l = \bigcup_{K \subset \omega_{h,\Sigma}} \Sigma_{l,K}$ of Σ :

$$\int_{\Sigma_{l,K}} ds \simeq \int_K \frac{1}{\epsilon_K} dx$$

Finally,

$$\epsilon_K = \frac{\text{meas}(K)}{\text{meas}(\Sigma_{l,K})} \quad (\text{II.10})$$

Here again, the value of ϵ_h depends on the element $K \subset \omega_{h,\Sigma}$ under consideration.

This approach induces a local piecewise linear reconstruction of the interface in each cell K of the mesh.

For each embedded B.C. variant, Table II.1 gives the parameters of interest using a spread interface approach.

	Parameters in $\omega_{h,\Sigma}$	Parameters in $\Omega_{e,h}$
Dirichlet B.C. <i>Spread interface penalization</i>	$\mathbf{a} = \begin{cases} \tilde{\mathbf{a}} \text{ (} L^2 \text{ penalty)} \\ \frac{1}{\eta} \mathbf{Id} \text{ (} H^1 \text{ penalty)} \end{cases},$ $b = \frac{1}{\eta}, f = \frac{1}{\eta} u_D$	$\mathbf{a} = \mathbf{Id},$ $b = 0, f = 0$
Dirichlet B.C. <i>Exterior penalization</i>	$\mathbf{a} = \tilde{\mathbf{a}},$ $b = \tilde{b}, f = \tilde{f}$	$\mathbf{a} = \begin{cases} \mathbf{Id} \text{ (} L^2 \text{ penalty)} \\ \frac{1}{\eta} \mathbf{Id} \text{ (} H^1 \text{ penalty)} \end{cases},$ $b = \frac{1}{\eta}, f = \frac{1}{\eta} u_D$
Robin B.C. <i>with different approximations of ϵ_h</i>	$\mathbf{a} = \tilde{\mathbf{a}},$ $b = \tilde{b} + \frac{\alpha_R}{\epsilon_h}, f = \tilde{f} - \frac{g_R}{\epsilon_h}$	$\mathbf{a} = \eta \mathbf{Id},$ $b = 0, f = 0$

 Table II.1: Parameters in $\omega_{h,\Sigma}$ and in $\Omega_{e,h}$ for diffusion problems

II.3 The fictitious domain method with spread interface for convection-diffusion problems

II.3.1 Presentation of the study

Let us consider the following convection-diffusion-reaction problem:

For $\tilde{\mathbf{a}} \in (L^\infty(\tilde{\Omega}))^{d \times d}$, $\tilde{\mathbf{v}} \in (L^\infty(\tilde{\Omega}))^d$, $\tilde{b} \in L^\infty(\tilde{\Omega})$ and $\tilde{f} \in L^2(\tilde{\Omega})$, find $\tilde{u} \in H^1(\tilde{\Omega})$ such that:

$$(\tilde{\mathcal{P}}) \quad \begin{cases} -\operatorname{div}(\tilde{\mathbf{a}} \cdot \nabla \tilde{u}) + \operatorname{div}(\tilde{\mathbf{v}} \tilde{u}) + \tilde{b} \tilde{u} = \tilde{f} & \text{in } \tilde{\Omega} \\ \text{B.C.} & \text{on } \partial \tilde{\Omega} \end{cases}$$

where B.C. represents Dirichlet, Robin or Neumann boundary conditions (see section II.2). The diffusion tensor $\tilde{\mathbf{a}} \equiv (\tilde{a}_{ij})_{1 \leq i, j \leq d}$ and the reaction coefficient \tilde{b} verify the classical ellipticity assumptions (A1) and (A2).

This problem needs to be solved using the fictitious domain method with spread interface introduced in the last section for diffusion problems. With an original convection-diffusion problem $(\tilde{\mathcal{P}})$ in $\tilde{\Omega}$, the problem (\mathcal{P}) solved in the fictitious domain Ω has the following generic form:

With $0 < \eta \ll 1$, find $u_\eta^h \in H^1(\Omega)$ such that

$$(\mathcal{P}) \quad \begin{cases} -\operatorname{div}(\mathbf{a} \cdot \nabla u_\eta^h) + \operatorname{div}(\mathbf{v} u_\eta^h) + b u_\eta^h = f & \text{in } \Omega \\ \text{original B.C. of } (\tilde{\mathcal{P}}) & \text{on } \tilde{\Gamma} \\ \text{suitable B.C. for } u_\eta^h & \text{on } \Gamma_e \end{cases}$$

where $\mathbf{a} \in (L^\infty(\Omega))^{d^2}$, $\mathbf{v} \in (L^\infty(\Omega))^d$, $b \in L^\infty(\Omega)$, and $f \in L^2(\Omega)$ such that:

$$\mathbf{a}|_{\tilde{\Omega}_h} = \tilde{\mathbf{a}}|_{\tilde{\Omega}_h}, \quad \mathbf{v}|_{\tilde{\Omega}_h} = \tilde{\mathbf{v}}|_{\tilde{\Omega}_h}, \quad b|_{\tilde{\Omega}_h} = \tilde{b}|_{\tilde{\Omega}_h}, \quad f|_{\tilde{\Omega}_h} = \tilde{f}|_{\tilde{\Omega}_h},$$

and \mathbf{a} and b satisfy classical ellipticity assumptions in Ω .

Remark: As in the diffusion case, the indexes h and η of the coefficients \mathbf{a} , \mathbf{v} , b and f have been

omitted to simplify the notations.

With the spread interface approach, the embedded B.C. will be imposed using a unique Cartesian mesh and without locally modifying the numerical scheme.

II.3.2 Treatment of the original B.C.

II.3.2.a Embedded Dirichlet B.C.

The Dirichlet B.C. are treated by **volume penalization** as is the case for diffusion problems (see section II.2.3.a). We suggest comparing the **penalization of the spread interface** with the **penalization of the exterior domain**.

II.3.2.b Embedded Robin or Neumann B.C.

As developed in section II.2.3.b, the **transmission problem** between $\tilde{\Omega}$ and Ω_e with continuity of the solution on Σ is taken into consideration.

In the distribution sense, the following equation is obtained:

$$-div(\mathbf{a} \cdot \nabla u) + div(\mathbf{v} u) + bu = f - \llbracket (\mathbf{a} \cdot \nabla u) \cdot \mathbf{n} \rrbracket_{\Sigma} \delta_{\Sigma} + \llbracket (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) \rrbracket_{\Sigma} u \delta_{\Sigma} \quad (\text{II.11})$$

where $\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{n} \text{ denotes the outward normal unit vector on } \Sigma \text{ (oriented from } \tilde{\Omega} \text{ to } \Omega_e) \\ \llbracket (\mathbf{a} \cdot \nabla u) \cdot \mathbf{n} \rrbracket_{\Sigma} = (\mathbf{a} \cdot \nabla u) \cdot \mathbf{n}|_{\Sigma}^+ - (\mathbf{a} \cdot \nabla u) \cdot \mathbf{n}|_{\Sigma}^- = (\mathbf{a}_e \cdot \nabla u) \cdot \mathbf{n}|_{\Sigma} - (\tilde{\mathbf{a}} \cdot \nabla u) \cdot \mathbf{n}|_{\Sigma} \\ \llbracket (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) \rrbracket_{\Sigma} = \mathbf{v}_e \cdot \mathbf{n}|_{\Sigma} - \tilde{\mathbf{v}} \cdot \mathbf{n}|_{\Sigma} \\ \delta_{\Sigma} \text{ means the Dirac delta measure supported by } \Sigma \end{array} \right.$

Here again, the jump of fluxes (diffusion and convection) across Σ appear as source terms carried by Σ .

The following Robin flux is required

$$-(\mathbf{a} \cdot \nabla u) \cdot \mathbf{n}|_{\Sigma}^- = -(\tilde{\mathbf{a}} \cdot \nabla u) \cdot \mathbf{n}|_{\Sigma} = \alpha_R u|_{\Sigma} + g_R$$

We impose $-(\mathbf{a} \cdot \nabla u) \cdot \mathbf{n}|_{\Sigma}^+ \approx 0$ by $\mathbf{a}_e = \eta \mathbf{Id}$ on Ω_e , so that

$$\llbracket (\mathbf{a} \cdot \nabla u) \cdot \mathbf{n} \rrbracket_{\Sigma} = \alpha_R u|_{\Sigma} + g_R$$

Moreover, $\mathbf{v}|_{\Omega_e} = \mathbf{v}_e = \mathbf{0}$ is imposed in order to free up the solution in the exterior domain Ω_e . If $\mathbf{v}_e \neq \mathbf{0}$, as $u|_{\Sigma}^- = u|_{\Sigma}^+$, the resolution of the exterior problem influences the embedded Robin condition.

On Ω , then we have:

$$-div(\mathbf{a} \cdot \nabla u_{\eta}) + div(\mathbf{v} u_{\eta}) + b u_{\eta} = f - [\alpha_R u_{\eta} + g_R + (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n})^- u_{\eta}] \delta_{\Sigma} \quad (\text{II.12})$$

A characteristic parameter (see section II.2.3.b and [Bre00]) is introduced in order to approximate the Dirac function on Σ by a discrete Dirac delta function in $\omega_{h,\Sigma}$. The principle is the following:

$$\int_{\Sigma} \{\alpha_R u_{\eta} + g_R + (\tilde{\mathbf{v}} \cdot \mathbf{n})^- u_{\eta}\} ds = \int_{\omega_{h,\Sigma}} \frac{\alpha_R u_{\eta}^h + g_R + (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) u_{\eta}^h}{\epsilon_h} dx \quad (\text{II.13})$$

where \mathbf{v} is an extension of the velocity field $\tilde{\mathbf{v}}$ in $\tilde{\Omega}_h \cup \omega_{h,\Sigma}$ and \mathbf{n} denotes either the outward unit vector on Σ or its extension in $\omega_{h,\Sigma}$.

Next, the coefficients of the fictitious problem (\mathcal{P}) are easily set by extending the coefficients of the original problem ($\tilde{\mathcal{P}}$) in $\tilde{\Omega}_h \cup \omega_{h,\Sigma}$ and using the formulations (II.12) and (II.13) (see Table II.2).

Only the B.C. on $\Gamma_e \cap \partial\omega_{h,\Sigma}$ has an effect on the solution obtained in the original domain. These B.C. must be homogeneous Neumann B.C. to vanish the external diffusion flux. The B.C. on the rest of Γ_e can be arbitrarily chosen as long as the whole problem (\mathcal{P}) in Ω is well-posed.

Approximations of the parameter ϵ_h with Cartesian uniform meshes are obtained in the same manner as that in section II.2.3.b.

For each embedded B.C. variant, Table II.2 summarizes the parameters of interest for the resolution of a convection-diffusion problem.

	Parameters in $\omega_{h,\Sigma}$	Parameters in $\Omega_{e,h}$
Dirichlet B.C. <i>Spread interface penalization</i>	$\mathbf{a} = \begin{cases} \tilde{\mathbf{a}} \text{ (} L^2 \text{ penalty)} \\ \frac{1}{\eta} \mathbf{Id} \text{ (} H^1 \text{ penalty)} \\ b = \frac{1}{\eta}, f = \frac{1}{\eta} u_D \end{cases}, \mathbf{v} = \tilde{\mathbf{v}},$	$\mathbf{a} = \mathbf{Id}, \mathbf{v} = \mathbf{0},$ $b = 0, f = 0$
Dirichlet B.C. <i>Exterior penalization</i>	$\mathbf{a} = \tilde{\mathbf{a}}, \mathbf{v} = \tilde{\mathbf{v}},$ $b = \tilde{b}, f = \tilde{f}$	$\mathbf{a} = \begin{cases} \mathbf{Id} \text{ (} L^2 \text{ penalty)} \\ \frac{1}{\eta} \mathbf{Id} \text{ (} H^1 \text{ penalty)} \\ b = \frac{1}{\eta}, f = \frac{1}{\eta} u_D \end{cases}, \mathbf{v} = \mathbf{0},$
Robin B.C.	$\mathbf{a} = \tilde{\mathbf{a}}, \mathbf{v} = \tilde{\mathbf{v}},$ $b = \tilde{b} + \frac{\alpha R}{\epsilon_h} + \frac{\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}}{\epsilon_h}, f = \tilde{f} - \frac{gR}{\epsilon}$	$\mathbf{a} = \eta \mathbf{Id}, \mathbf{v} = \mathbf{0},$ $b = 0, f = 0$

Table II.2: Parameters in $\omega_{h,\Sigma}$ and in $\Omega_{e,h}$ for convection-diffusion problems

II.4 Spread interface approach and local adaptive mesh refinement

Using a spread interface approach, Adaptive Mesh Refinement (AMR) techniques are necessary to improve the accuracy of the solution near the immersed interface and by the way on the whole original domain. Most of these techniques are derived from multi-grid methods [Hac85].

II.4.1 Multi-grid method

In order to simply present the multi-grid method, two nested grids only are taken into consideration: a “coarse” grid G_l with a discretization step h_l and a “fine” grid G_{l+1} such that $h_{l+1} < h_l$. Generally speaking, a two-grid scheme can be divided into two steps:

- *A descent or prolongation step* from a coarse grid G_l to a fine grid G_{l+1} . At this stage, an estimation of the solution on the coarse grid has already been calculated. This step consists in establishing boundary conditions on the boundary Γ_{l+1} of the fine grid by interpolation and in solving the discrete problem associated with the grid G_{l+1} .

- An ascent or restriction step from a fine grid G_{l+1} to a coarse grid G_l . The solution on the coarse grid G_l is corrected according to the solution obtained on G_{l+1} at the descent step. This correction can be either a simple local restriction on the solution or a local restriction on the defect. In the second case, an error equation is then solved on all the coarse grid G_l .

The multi-grid method is a generalization of the two-grid scheme. If the solution obtained on a grid G_{l+1} isn't precise enough, a two-grid scheme is performed again from G_{l+1} . A local fine grid G_{l+2} such that $h_{l+2} < h_{l+1}$ is introduced. This procedure is repeated until the finest grid is reached. A recursive process is then generated.

For example, an iteration can be represented by a V-cycle: see Figure II.3.

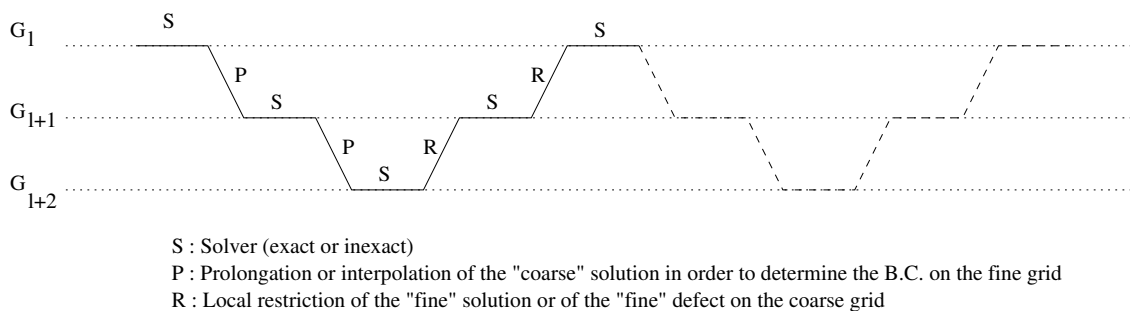


Figure II.3: Representation of two V-cycles on three grids

The solver used on each grid is independent of the multi-grid method which has been chosen.

II.4.2 Local Defect Correction (L.D.C.) method

This method was introduced by Hackbusch [Hac84]. This method is a multi-grid method with a defect restriction in the restriction step. The defect restriction is computed only on the coarse "interior" nodes. These nodes can be defined as the coarse nodes strictly included in the fine grid. In other words, this covers all the coarse nodes included in the fine grid except those lying on the fine grid boundary. The set of the coarse inner nodes associated with the grid G_l is called \mathcal{A}_l .

Let us consider the resolution of the following problem:

$$(\mathcal{P}) \begin{cases} Lu = f(x) & \text{in } \Omega \\ u|_{\Gamma} & \text{on } \Gamma = \partial\Omega \end{cases}$$

At each iteration k of a multi-grid algorithm, the following discrete problem on the grid G_l is solved:

$$(\mathcal{P}_l^k) \begin{cases} L_l^k u_l^k = f_l^k & \text{in } \Omega_l \\ \text{appropriate B.C.} & \text{on } \Gamma_l \end{cases}$$

It is assumed that:

- ★ $L_l^k = L|_{\Omega_l}$,
- ★ $f_l^{k=0} = f|_{\Omega_l}$,
- ★ $\Omega_0 = \Omega$.

The B.C. on Γ_l can be divided into two parts:

- ★ If $\Gamma_l \cap \Gamma \neq \emptyset$, the B.C. on $\Gamma_l \cap \Gamma$ are computed by restricting on Γ_l the B.C. lying on Γ ,
- ★ Otherwise the B.C. on Γ_l are Dirichlet conditions obtained by interpolating the solution u_{l-1}^k .

For two grids G_l and G_{l+1} , the L.D.C. algorithm writes:

Initialization: Computation of u_l^0 , solution of the initial problem (\mathcal{P}_l^0) on the grid G_l .

Iterations: Computation of u_l^k .

for k=1 to nbcycles **do**

$$u_l^k = u_l^{k-1}.$$

Resolution on the fine grid G_{l+1} :

- Compute B.C. on $\Gamma_{l+1} \setminus (\Gamma_{l+1} \cap \Gamma)$ by interpolation of u_l^k :

$$u_{l+1}^k = P_{l+1}^l u_l^k \text{ on } \Gamma_{l+1} \setminus (\Gamma_{l+1} \cap \Gamma)$$

where P_{l+1}^l is a interpolation operator also called coarse-to-fine operator.

- Computation of u_{l+1}^k by solving (\mathcal{P}_{l+1}^k).

Correction on the coarse grid G_l :

- Restriction of the “fine” solution on A_l :

$$\tilde{u}_l^k(x) = (R_l^{l+1} u_{l+1}^k)(x) \quad \forall x \in A_l$$

where R_l^{l+1} is a restriction operator also called fine-to-coarse operator.

- Computation of the local defect $r_l^k(\tilde{u})(x) = (f_l^0 - L_l \tilde{u}_l^k)(x) \quad \forall x \in A_l$.
- Computation of the corrected solution u_l^k : resolution of the initial problem (\mathcal{P}_l^k) with $f_l^k = f_l^0 - \chi_{A_l} r_l^k(\tilde{u})$ (where χ is the characteristic function).

endfor

Remark: The “initial” L.D.C algorithm [Hac85, ACK93] introduces a subset \mathcal{A}^0 of \mathcal{A} in order to evaluate the restricted defect according to nodes of \mathcal{A} only. In this case, the refinement zones must be large enough to contain sufficient inner nodes. In our problem, this improvement is not necessary. The local defect restriction on \mathcal{A} is accurate enough.

II.5 Numerical examples

All the simulations have been computed thanks to the finite element industrial code PYGENE [GO96, GBG⁺89] of the Neptune project [BBB⁺05]. The Neptune project, co-developed by CEA and EDF, is dedicated to the simulation of two-phase flows in Nuclear Power Plants.

II.5.1 Test problems

The resolution of a **diffusion problem** and a **convection-diffusion problem in the unit disk** $\tilde{\Omega}$ is investigated. For symmetry reasons, this problem can only be solved on a quarter of this disk (see Figure II.4(a)). The generic formulation of the problem $(\tilde{\mathcal{P}})$ under study writes:

$$(\tilde{\mathcal{P}}) \quad \begin{cases} -\operatorname{div}(\tilde{\mathbf{a}} \cdot \nabla \tilde{u}) + \operatorname{div}(\tilde{\mathbf{v}} \tilde{u}) = \tilde{f} & \text{in } \tilde{\Omega} \\ (\tilde{\mathbf{a}} \cdot \nabla \tilde{u}) \cdot \mathbf{n} = 0 & \text{on } \tilde{\Gamma} \\ \tilde{u} = u_D \text{ or } -(\tilde{\mathbf{a}} \cdot \nabla \tilde{u}) \cdot \mathbf{n} = \alpha_R \tilde{u} + g_R & \text{on } \Sigma \end{cases}$$

Remark: The formulation of $(\tilde{\mathcal{P}})$ corresponds to a convection-diffusion problem. However, setting $\tilde{\mathbf{v}} = \mathbf{0}$, we obtain the generic formulation of a diffusion problem.

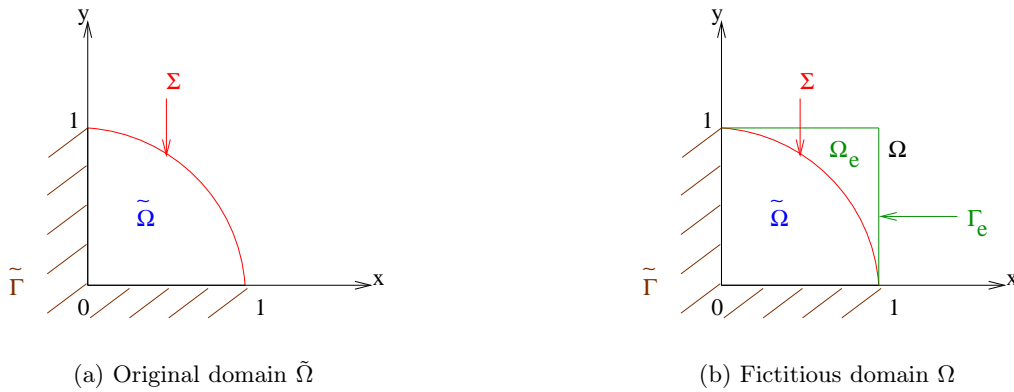


Figure II.4: Immersion of the unit disk in the unit square

The fictitious domain is **the unit square** $\Omega =]0, 1[\times]0, 1[$ (see Figure II.4(b)). The domain Ω is meshed uniformly with square cells K with a grid step varying from $h = \frac{1}{4}$ to $h = \frac{1}{256}$. This defines the *spread interface* $\omega_{h,\Sigma}$ (see Figure II.5). The problems (\mathcal{P}) solved in Ω are the ones defined in sections II.2 and section II.3 with symmetry conditions on $\tilde{\Gamma}$.

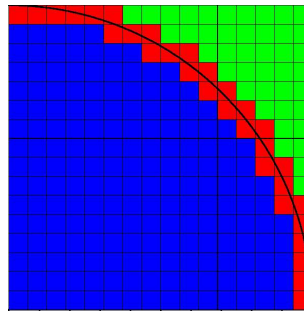


Figure II.5: Discretization of Ω and definition of the spread interface $\omega_{h,\Sigma}$.

II.5.2 Numerical methods

II.5.2.a Approximation spaces and numerical solver

The numerical resolution is performed using the \mathcal{Q}_1 **finite element method** (e.g. [Cia78, RT92]). In this case, the usual simplicial Lagrange finite element space associated to the mesh \mathcal{T}_h of Ω can be written as:

$$V_h = \{v_h \in C^0(\bar{\Omega}); v_h|_K \in \mathcal{Q}_1, \forall K \in \mathcal{T}_h\} \subset H^1(\Omega),$$

where $\left\{ \begin{array}{l} K \text{ is an element of } \mathcal{T}_h, \\ \mathcal{Q}_k \text{ stands for the space of polynomials of degree for each variable less than or equal to } k, \\ \textit{Example: } \mathcal{Q}_1 = \textit{span}\{1, x, y, xy\} \textit{ in } \mathbb{R}^2 \\ \text{The } \mathcal{Q}_1 \text{ discretization nodes are located on the vertices of the elements } K. \end{array} \right.$

Within a \mathcal{Q}_1 finite element numerical approach, we set :

$$\begin{cases} \mathbf{a}_h, b_h, f_h & \in \mathcal{Q}_0(\Omega_h) \\ u_h, \mathbf{v}_h & \in \mathcal{Q}_1(\Omega_h) \end{cases}$$

where the subscript h denotes the F.E. approximation of the original variable, and $u_h = u_{\eta,h}^h$.

It is well known that the standard Galerkin numerical method, when applied to convection-diffusion problems, is unstable in a convection-dominated regime. Then, a streamline-upwind Petrov Galerkin (SUPG) stabilization term (see [Hug78, BH82]) is introduced. This term leads to a convergence of the \mathcal{Q}_1 finite element method in $\mathcal{O}(h^{3/2})$ which is in agreement with the expected accuracy of our method.

For diffusion problems, when the matrix \mathbf{a} is symmetric, the matrix of the linear system becomes symmetric positive definite. A conjugate gradient iterative algorithm [HS52] is used to solve the linear system. A diagonal preconditioner is used in order to improve the ill-conditioning due to the penalization coefficients. However, a more efficient preconditioner would be the inverse of the mass matrix.

For convection-diffusion problems, a conjugate gradient squared algorithm [Son89] is used to solve the linear system. In this case, a ILLU (incomplete line LU factorization) preconditioner is implemented .

II.5.2.b Notations

In order to evaluate the accuracy of the different variants presented in the previous sections, several error calculations are performed. As the analytic solution in the original domain of the test problems can be determined for coefficients of $(\tilde{\mathcal{P}})$ correctly chosen, the error e_h is defined as the difference in $\tilde{\Omega}_h$ between the analytic solution \tilde{u} and the computational one u_h :

$$e_h = \tilde{u} - u_h$$

A *discrete* L^2 -norm is computed on the approximate original domain $\tilde{\Omega}_h$:

$$\forall \varphi_h \in \mathcal{Q}_1, \quad \|\varphi_h\|_{L^2(\tilde{\Omega}_h)}^2 = \left(\sum_{K \in \mathcal{T}_h, K \subset \tilde{\Omega}_h} \|\varphi_h\|_{L^2(K)}^2 \right)$$

where $\|\varphi_h\|_{L^2(K)}^2$ is performed using a numerical integration exact on $\mathcal{Q}_1(K)$:

$$\int_K \varphi_h^2 dx = \sum_{i=1}^4 \frac{\text{meas}(K)}{4} \varphi_h^2(x_i) + R(\varphi_h^2)$$

(the subscript i denotes the vertex of the element K)

with $R(\varphi) \equiv 0$ if $\varphi \in \mathcal{Q}_1$.

Here $R(\varphi_h^2) \neq 0$ because $\varphi_h \in \mathcal{Q}_1 \Rightarrow \varphi_h^2 \in \mathcal{Q}_2$. However the approximate coefficients of the fictitious problem (\mathcal{P}) are \mathcal{Q}_0 . In the numerical resolution, the integrals on $\tilde{\Omega}_h$ are then roughly approximated. Thus, a \mathcal{Q}_1 numerical integration is sufficient to compute the discrete L^2 error norm. Hence, the solution u_h does not need to be reconstructed in the \mathcal{Q}_1 base.

Finally,

$$\|\varphi_h\|_{L^2(\tilde{\Omega}_h)}^2 \simeq \sum_{K \in \mathcal{T}_h, K \subset \tilde{\Omega}_h} \sum_{i=1}^4 \frac{\text{meas}(K)}{4} \varphi_h^2(x_i)$$

The discrete L^2 norm of the error e_h in the approximate original domain $\tilde{\Omega}_h$ will be called *absolute discrete L^2 error norm* :

$$\|e_h\|_{L^2(\tilde{\Omega}_h)} = \|\tilde{u} - u_h\|_{L^2(\tilde{\Omega}_h)}$$

while the *relative discrete L^2 error norm* will be the ratio of the absolute discrete L^2 error norm to the discrete L^2 norm of the analytic solution \tilde{u} :

$$\frac{\|e_h\|_{L^2(\tilde{\Omega}_h)}}{\|\tilde{u}\|_{L^2(\tilde{\Omega}_h)}} = \frac{\|\tilde{u} - u_h\|_{L^2(\tilde{\Omega}_h)}}{\|\tilde{u}\|_{L^2(\tilde{\Omega}_h)}}$$

The error can be divided into three parts: a modelling error, an interface discretization error and a numerical scheme error. If u_η denotes the solution of the continuous fictitious problem (depending on η due either to the penalization in the Dirichlet case or the vanishing of the external flux in the Robin case), we have:

$$\|\tilde{u} - u_h\| \leq \underbrace{\|\tilde{u} - u_\eta\|}_{\text{modelling error}} + \underbrace{\|u_\eta - u_\eta^h\|}_{\text{interface discretization error}} + \underbrace{\|u_\eta^h - u_h\|}_{\text{numerical scheme error}}$$

discretization error

In order to study the behavior of the modelling error, the discretization error has to be negligible compared to the modelling one. The discretization step has to be very small. To study the discretization error, a small penalization parameter η is chosen.

II.5.2.c Local adaptive mesh refinement

After selecting the best approach (in term of error value), a local adaptive mesh refinement is performed. As the immersed interface Σ is coarsely approximated by the spread interface $\omega_{h,\Sigma}$, the refinement area is chosen around the spread interface in order to improve the accuracy of the solution. A three-grid LDC algorithm (two refinement levels) is applied on each initial mesh. At each level, the local refinement zone is composed by all the elements of the spread interface $\omega_{h,\Sigma}$ and their neighbors. This choice makes it possible to correct the values of all the nodes located in the spread interface (see the LDC algorithm Section II.4). If G_l is the initial coarse grid, the local

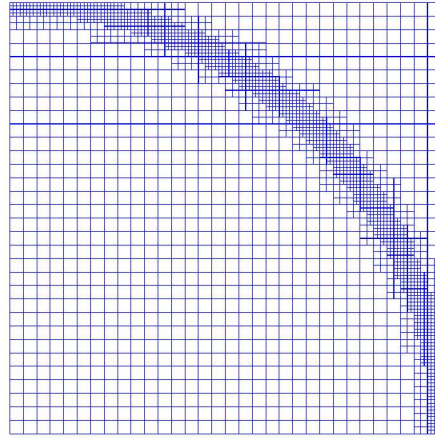


Figure II.6: Example of a three-grid composite mesh

nested sub-grids G_{l+p} are such that $h_{l+p} = \frac{h_l}{2^p}$ (see Figure II.6).

When the local adaptive mesh refinement is computed, it can be interesting to compute a *composite L^2 error norm* instead of the “coarse” discrete L^2 error norm on the original domain. On the initial coarse domain, this composite L^2 norm enables us to take into account the approximate solutions obtained on the local fine nodes.

The composite L^2 norm is calculated on the initial domain by the same way as the “coarse” discrete L^2 norm. The only difference between these two norms stands in the L^2 norm evaluation of the refined elements. For the evaluation of the composite L^2 norm, the L^2 error norm on the refined elements is estimated by the sum of the discrete L^2 error norms on each local fine element (of the fine grid generated from the current element) included in this coarse element. This algorithm is recursively applied to each element until the local finest level is reached.

On each nested grid, the iterative solvers have to deal with a relatively small number of degrees of freedom only. Thus, the implementation of this refinement method is relatively cheap.

II.5.3 Results

II.5.3.a Diffusion problems

Dirichlet case

The problem solved in the original domain $\tilde{\Omega}$ is:

$$(\tilde{\mathcal{P}}) \quad \begin{cases} -\Delta \tilde{u} = 4 & \text{in } \tilde{\Omega} \\ \frac{\partial \tilde{u}}{\partial n} = 0 & \text{on } \tilde{\Gamma} \\ \tilde{u} = 0 & \text{on } \Sigma \end{cases}$$

With the generic formulation of the diffusion problem $(\tilde{\mathcal{P}})$ (see section II.2.2)

$$\tilde{a} \equiv 1 (\tilde{\mathbf{a}} \equiv \mathbf{Id}), \tilde{f} \equiv 4 \text{ and } \tilde{u} = u_D = 0 \text{ on } \Sigma \text{ (Dirichlet B.C.)}$$

The analytic solution of this problem is:

$$\tilde{u} = 1 - r^2 \quad \text{in } \tilde{\Omega} \quad \text{where } r = \sqrt{x^2 + y^2}$$

This problem is computed on the fictitious square domain using the two approaches described in Section II.2.3.a.

First, the asymptotic behavior of the solution is investigated with respect to the penalization parameter η . Thus, the modelling error can be estimated. In order to have a discretization error as negligible as possible, a 256×256 mesh is used. The results obtained for the exterior penalization (second approach) are presented.

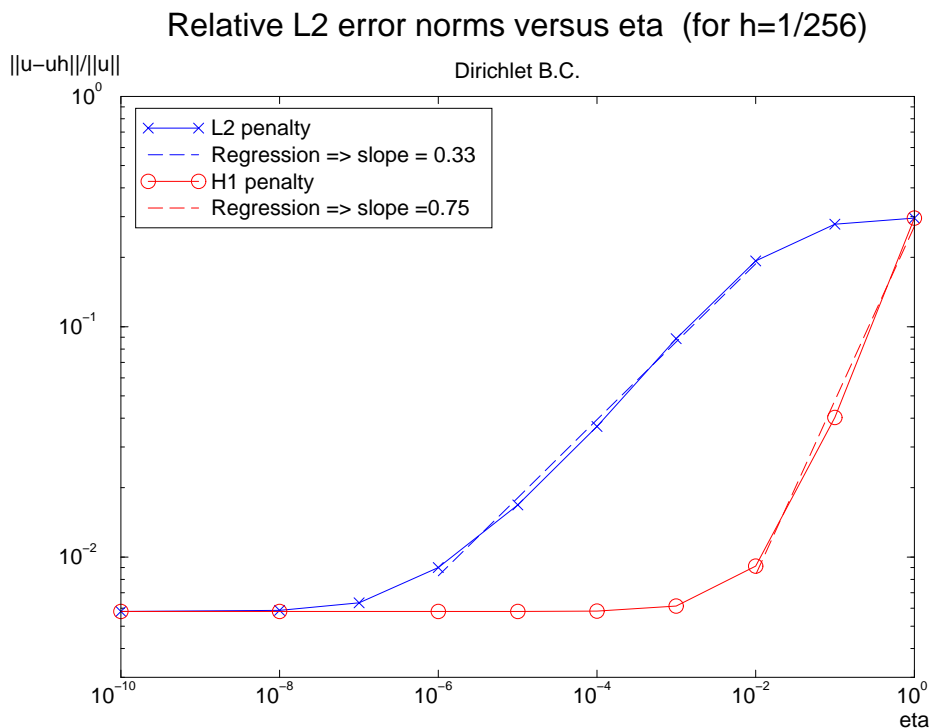


Figure II.7: Modelling error for a Dirichlet diffusion problem with an exterior penalization

In Figure II.7, it can be observed that the L^2 -norm of the modelling error varies with respect to the penalization parameter η like $\mathcal{O}(\eta^{\frac{1}{3}})$ for the L^2 penalty, and like $\mathcal{O}(\eta^{\frac{3}{4}})$ for the H^1 penalty. In [Ang99a], Angot theoretically estimates the H^1 -norm of the modelling error with respect to η . These estimations are in $\mathcal{O}(\eta^{\frac{1}{4}})$ for the L^2 penalty and in $\mathcal{O}(\eta)$ for the H^1 penalty. As the error estimates of the L^2 -norm should be smaller, the asymptotic behavior of the modelling error obtained with the H^1 penalty is in contradiction with the error estimates of [Ang99a] in our approach. This can be explained by the fact that since the H^1 penalty modelling error converges rapidly, only a few points are used to estimate the asymptotic behavior of the modelling error.

The stagnation observed in Figure II.7 corresponds to the discretization error. For small enough η , the modelling error becomes negligible compared to the discretization one, hence the error on the solution tends to the discretization error.

The following computations are performed with a H^1 -penalty method setting $\eta = 10^{-12}$ in order to obtain a negligible modelling error compared to the discretization error.

The approximate solutions obtained with the two Dirichlet approaches and the analytic one are represented in Figure II.8. It can be seen that the penalty coefficient makes it possible to correctly impose $u_h \simeq u_D = 0$ by penalizing either the spread interface (first approach) or the exterior domain (second approach). The exterior penalization seems to lead to a solution that is closer to the analytic solution than the solution obtained using the spread interface penalization. However,

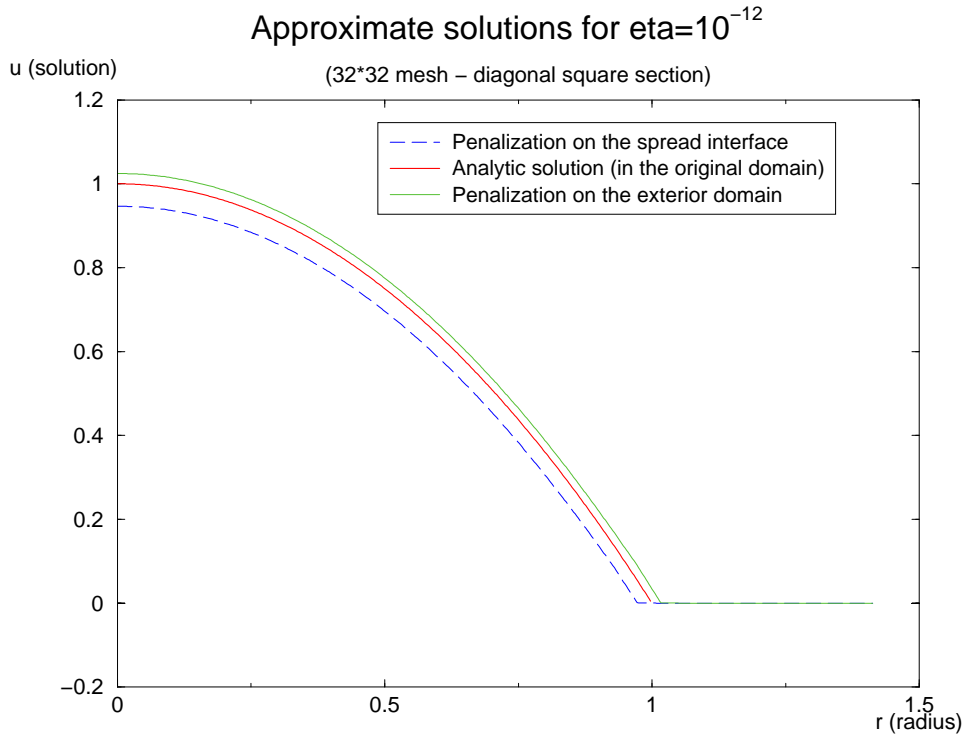


Figure II.8: Approximate solutions in the Dirichlet case for a diffusion problem

the accuracy of the different penalization methods seems to strictly depend on the geometry of the original domain $\tilde{\Omega}$. Performing the Finite Element Method, the reaction coefficient is computed by element ($b_h \in \mathcal{Q}_0$). All the nodes belonging to a penalized element are then penalized. The spread interface penalization induces the penalization at u_D of all the spread interface nodes. Hence, interior nodes of the original domain are penalized. The exterior penalization imposes $u_h \simeq u_D$ on the whole exterior domain and then on the exterior nodes of the spread interface. With an original geometry of quarter of a disk, interior penalized nodes are globally farther from the immersed interface Σ than the exterior nodes of the spread interface (see Figure II.5).

For each approach, the relative discrete L^2 error norms with respect to the discretization step h are reported in Figure II.9.

As $|\text{meas}(\tilde{\Omega}_h) - \text{meas}(\tilde{\Omega})| = \mathcal{O}(h)$, our fictitious domain approach is expected to be a first-order method. Figure II.9 confirms that the two Dirichlet approaches are first-order methods. The interface discretization error leads to a “global” discretization error in $\mathcal{O}(h)$ even if the numerical scheme error is in $\mathcal{O}(h^2)$ for the L^2 -norm (see [Cia78]).

As illustrated in Figure II.10, the main differences between the approximate solution and the analytic one are located around the spread interface. An adaptive mesh refinement is performed in this zone. At each level, a H^1 exterior penalization is performed. The three-grid LDC algorithm converges within three V-cycles (see Figure II.11). The relative discrete L^2 error norms on the fine levels have been computed extending by 0 the error in the part of the original domain $\tilde{\Omega}_h$ with an empty intersection with the refinement zone. Moreover, on each level, the absolute discrete L^2 error norm is divided by the same coarse absolute discrete L^2 norm of the analytic solution.

As shown in Figure II.12, with a local refinement around the immersed interface Σ , the error on the initial coarse grid is similar to the error obtained without refinement on a mesh with a

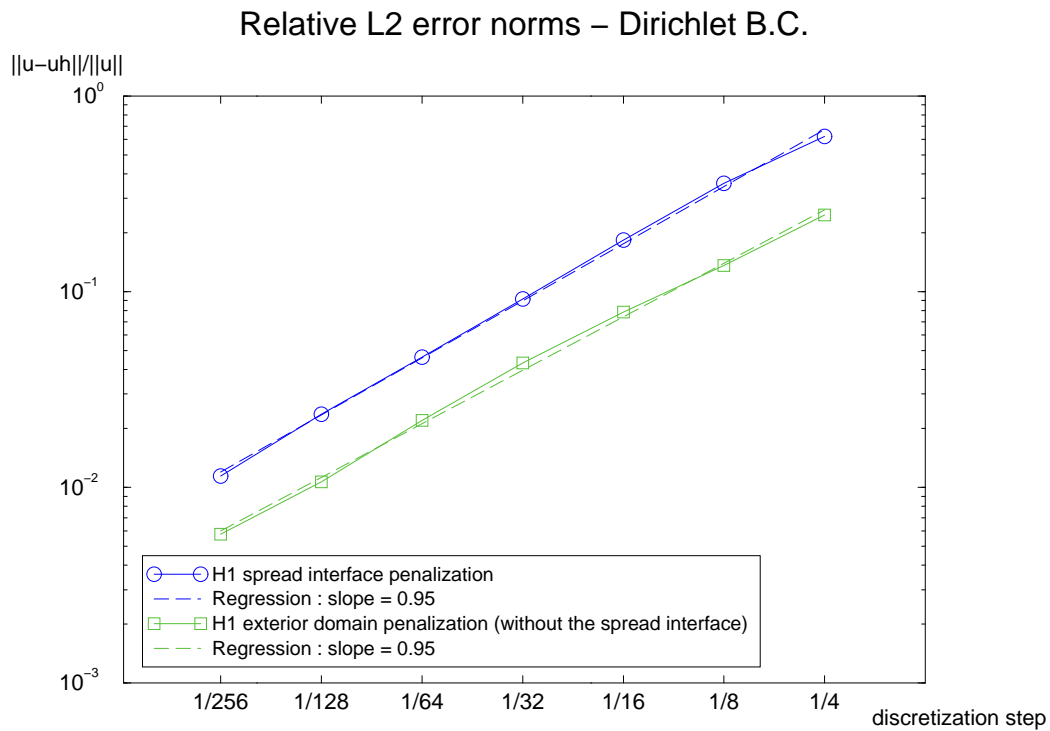


Figure II.9: Discretization errors for a Dirichlet diffusion problem

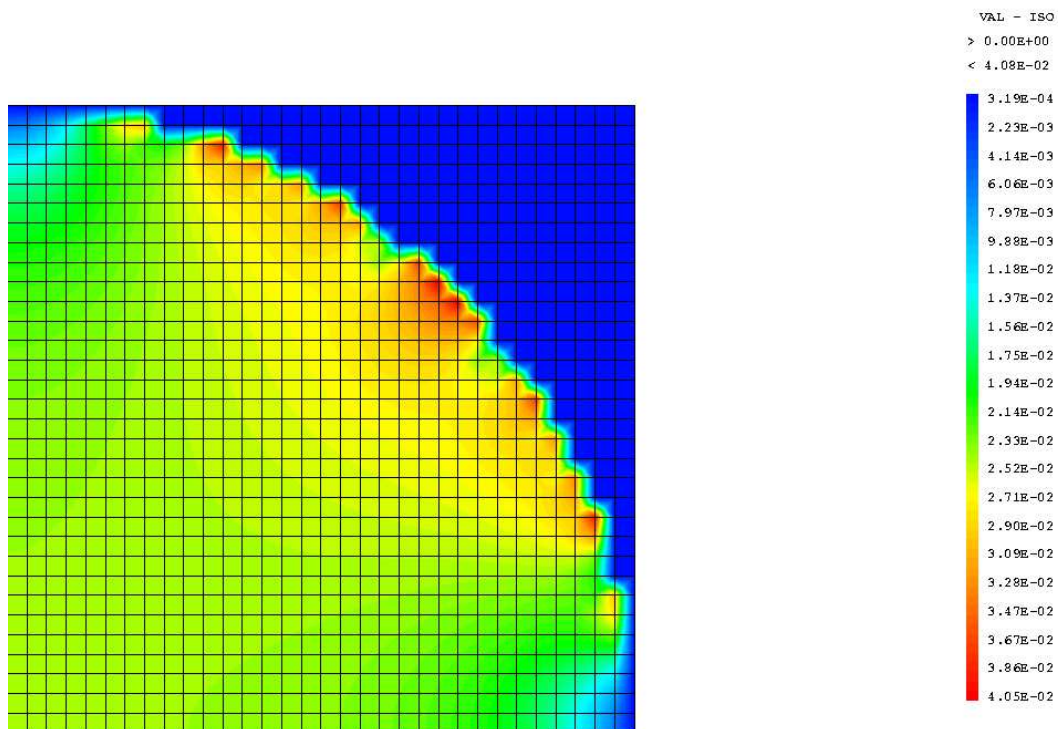


Figure II.10: Error distribution for the exterior penalization - Dirichlet diffusion problem - 32x32 mesh

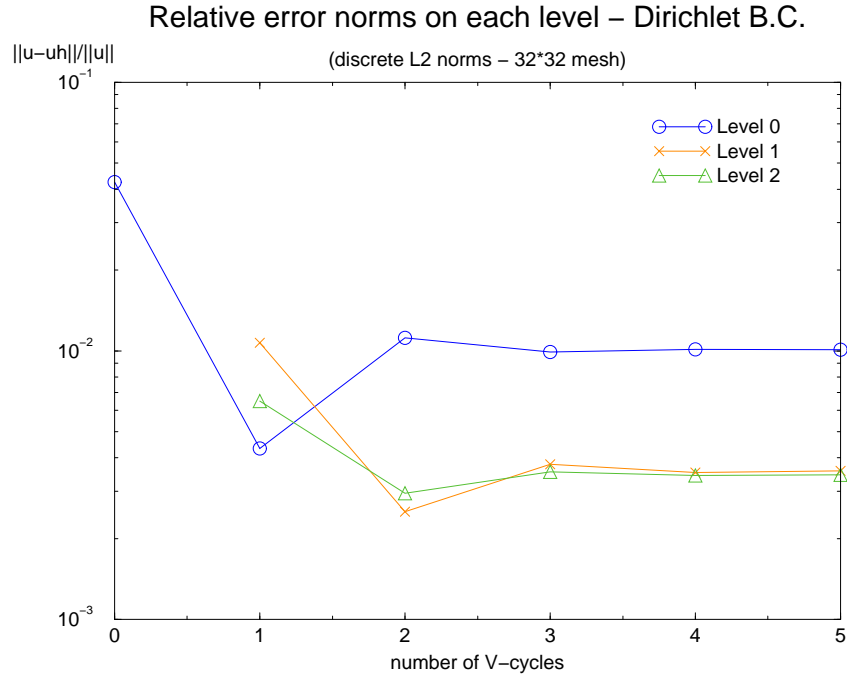


Figure II.11: Representation of the relative discrete L^2 error norms on each refinement level - Dirichlet diffusion problem

discretization step equal to the local finest grid's one. It confirms that the most important error is located near the immersed interface. Moreover, for fine mesh steps, the composite L^2 error norm and the relative L^2 error norm on the initial coarse domain are similar. Figure II.12 enables us to conclude that the results obtained with refinement vary like $\mathcal{O}(h_f)$ where h_f is the discretization step of the local finest refinement grid (last level of refinement). The combination of local adaptive mesh refinement with the spread interface fictitious domain method allows us to increase the precision of the solution even if the method remains first-order.

Robin case

The following problem is considered:

$$(\tilde{\mathcal{P}}) \quad \begin{cases} -\Delta \tilde{u} = 16r^2 & \text{in } \tilde{\Omega} \\ \frac{\partial \tilde{u}}{\partial \tilde{n}} = 0 & \text{on } \tilde{\Gamma} \\ -\frac{\partial \tilde{u}}{\partial n} = u + 3 & \text{on } \Sigma \end{cases}$$

Identifying with the generic formulation $(\tilde{\mathcal{P}})$, we get:

$$\tilde{u} \equiv 1 (\tilde{\mathbf{a}} \equiv \mathbf{Id}), \tilde{f} = 16r^2, \alpha_R = 1 \text{ and } g_R = 3 \text{ (Robin B.C.)}$$

The solution of this problem is:

$$\tilde{u} = 2 - r^4 \quad \text{in } \tilde{\Omega}$$

The behavior of the three approaches presented in Section II.2.3.b are investigated. We chose $\eta = 10^{-12}$ to make the external flux vanish. The modelling error is then negligible.

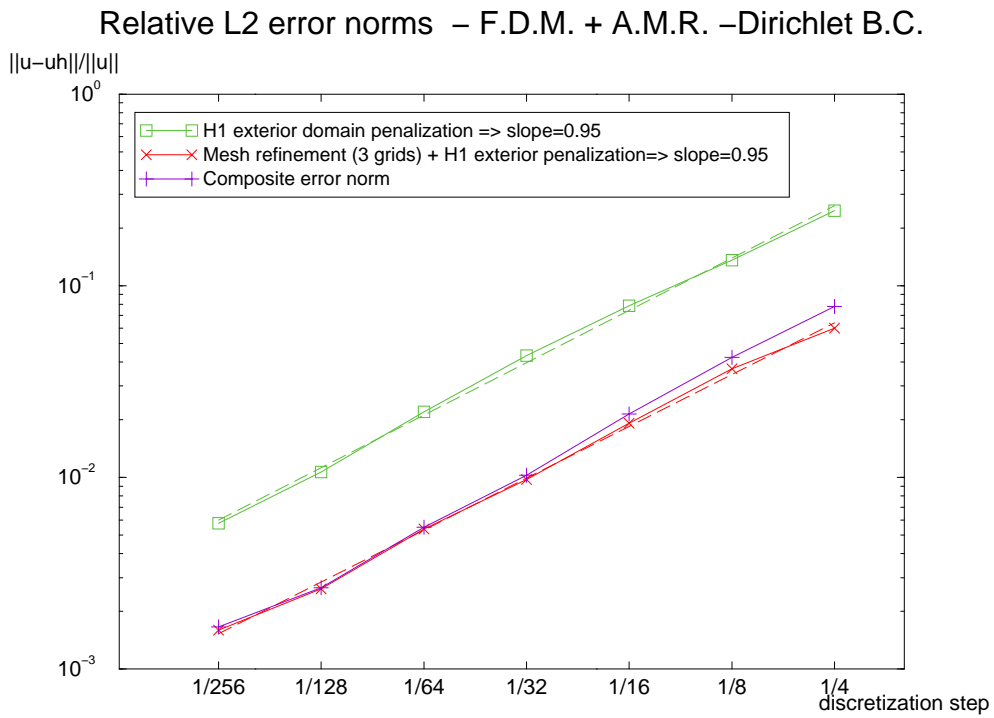


Figure II.12: Discretization errors with or without refinement - Exterior penalization - Dirichlet diffusion problem

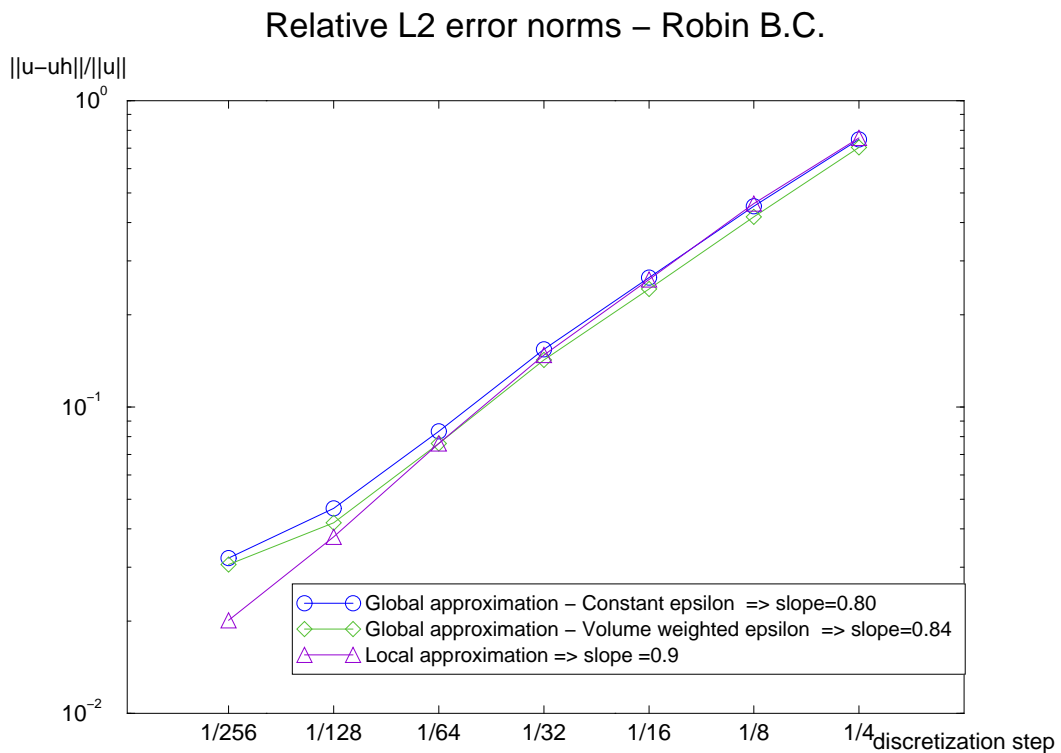


Figure II.13: Discretization errors for a Robin diffusion problem

In Figure II.13, all these approaches are approximately first-order methods up to a 128×128 mesh. For a 256×256 mesh, an error stagnation seems appear for the variants involving a global approximation of the characteristic parameter ϵ_h . The method using a piecewise linear approximation of the interface leads to slightly smaller errors.

Local adaptive mesh refinement is performed on the methods involving either global approximations of epsilon (constant case $\epsilon_h = \frac{meas(\omega_{h,\Sigma})}{meas(\Sigma)}$ and volume weighted case $\epsilon_K = \frac{\sum [\tau_K \cdot meas(K)]}{\tau_K \cdot meas(\Sigma)}$) or a local approximation of epsilon (linear approximation $\epsilon_K = \frac{meas(K)}{meas(\Sigma_{l,K})}$). As in the Dirichlet case, a three-grid LDC algorithm is computed, which converges by three V-cycles.

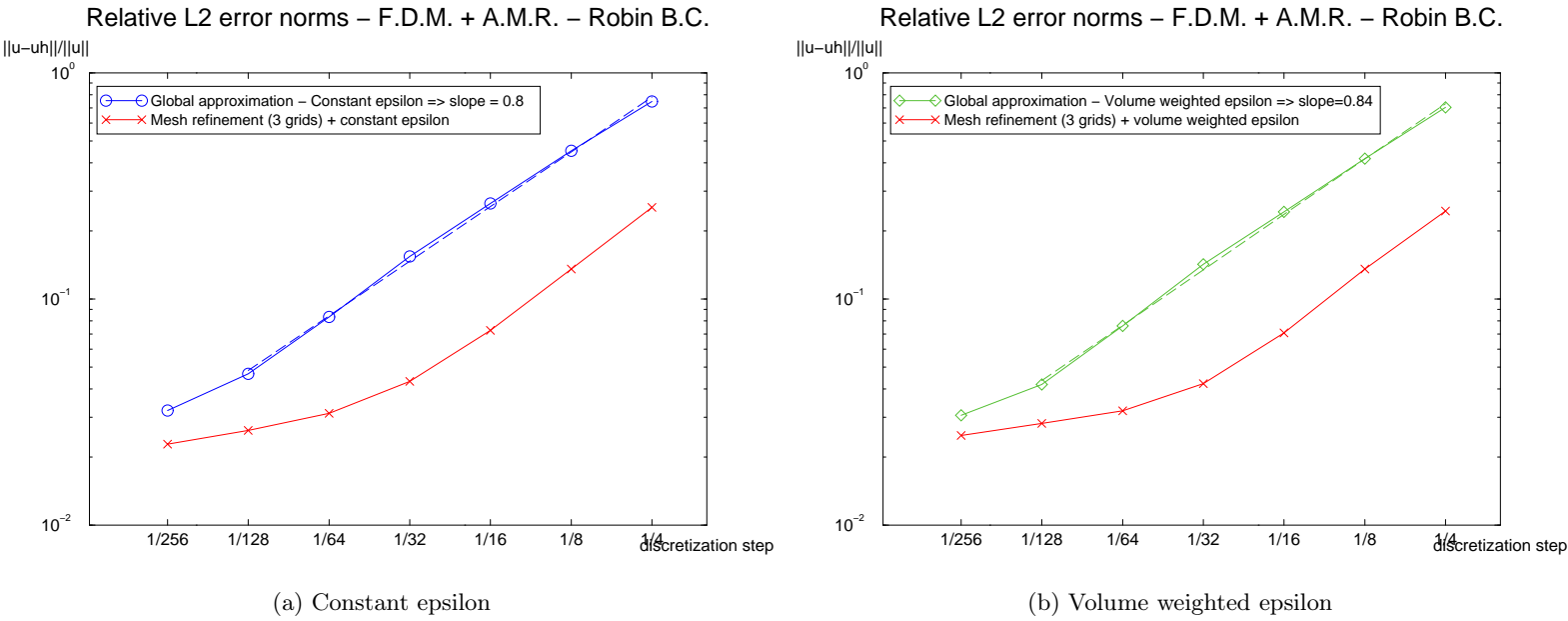


Figure II.14: Discretization errors with or without refinement - Global approximations of ϵ_h - Robin diffusion problem

The results obtained with the local mesh refinement (see Figures II.14 and II.15) confirm the first conclusions drawn from Figure II.13. The methods with global approximations of ϵ_h do not remain the first-order accuracy for fine meshes. Indeed, an error stagnation is observed in Figure II.14. Such stagnation is due to the global estimation of ϵ_h (equation (II.6)) since no stagnation appears with a local approximation of ϵ_h (see Figure II.15). A local correction enables us to have a discretization error in $\mathcal{O}(h_f)$ with h_f the discretization step of the local finest grid.

II.5.3.b Convection-diffusion problems

Dirichlet problem

The Dirichlet problem is considered as follows:

$$(\tilde{\mathcal{P}}) \quad \begin{cases} -\Delta \tilde{u} + \operatorname{div}(\tilde{\mathbf{v}} \tilde{u}) & = 4 & \text{in } \tilde{\Omega} \\ \frac{\partial \tilde{u}}{\partial n} & = 0 & \text{on } \tilde{\Gamma} \\ \tilde{u} = u_D & = 0 & \text{on } \Sigma \end{cases}$$

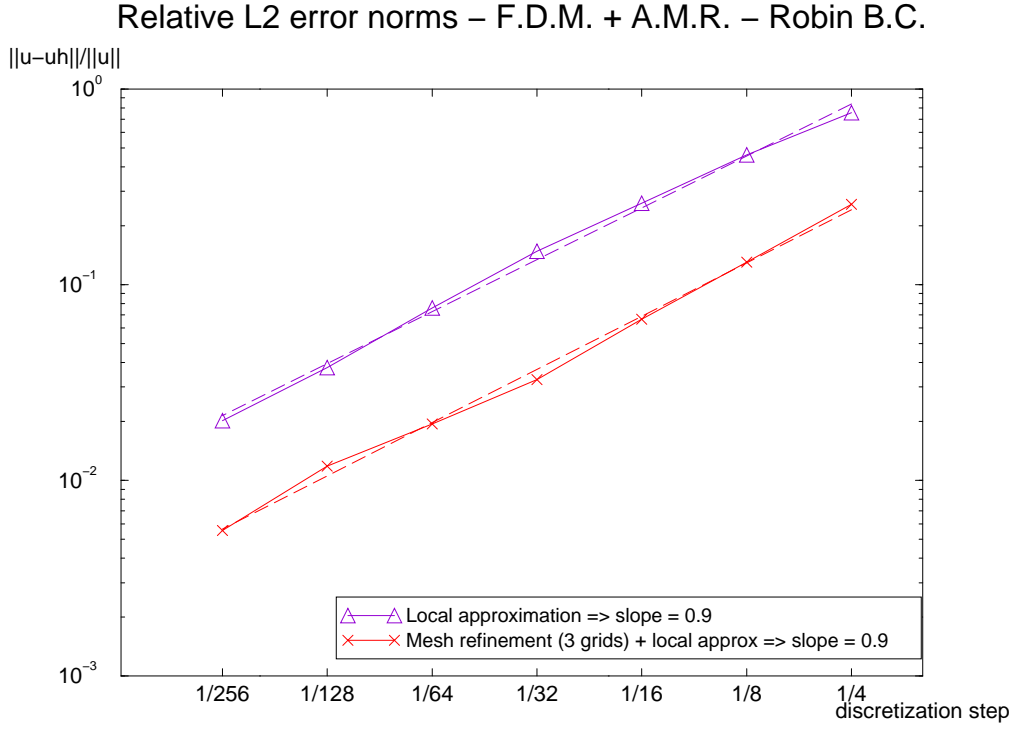


Figure II.15: Discretization errors with or without refinement - Local approximation of ϵ_h - Robin problem

with $\tilde{\mathbf{v}} = \frac{r}{2}\mathbf{e}_r$ where $r = \sqrt{x^2 + y^2}$ and \mathbf{e}_r is the radial unit vector. The analytic solution of this problem is:

$$\tilde{u} = 4 \left(1 - \exp\left(\frac{r^2 - 1}{4}\right) \right) \quad \text{in } \tilde{\Omega}.$$

The associated fictitious problem (\mathcal{P}) (see section II.3.1) with a spread interface approach is solved in Ω with the two Dirichlet embedded B.C. methods: the spread interface penalization and the exterior penalization (see Table II.2). The following results have been performed with $\eta = 10^{-12}$ to obtain a negligible modelling error compared to the discretization error.

Figure II.16 shows the convergence of the numerical errors (performed with the H^1 penalty) with respect to the mesh step h . As for a diffusion problem, since $|\text{meas}(\tilde{\Omega}_h) - \text{meas}(\tilde{\Omega})| = \mathcal{O}(h)$ all the Dirichlet embedded B.C. variants are of first-order accuracy for the L^2 -norm. An adaptive mesh refinement is performed around the immersed interface. On each local grid, a \mathcal{Q}_1 F.E. scheme with an H^1 exterior domain penalization method is computed. A three-grid LDC algorithm (two refinement levels) is applied on each original mesh. As for the diffusion case, this algorithm converges by three V-cycles.

As shown in Figure II.17, once again the spread interface method combined with a L.D.C. algorithm is a first-order method with respect to the discretization step of the local finest refinement grid.

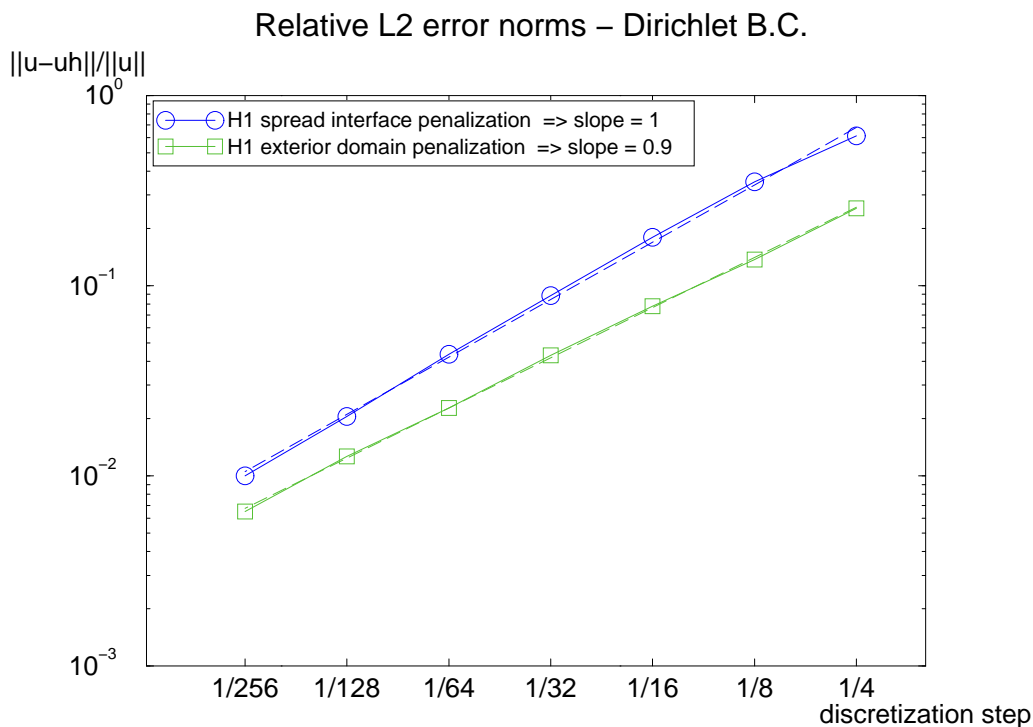


Figure II.16: Discretization errors for a Dirichlet convection-diffusion problem

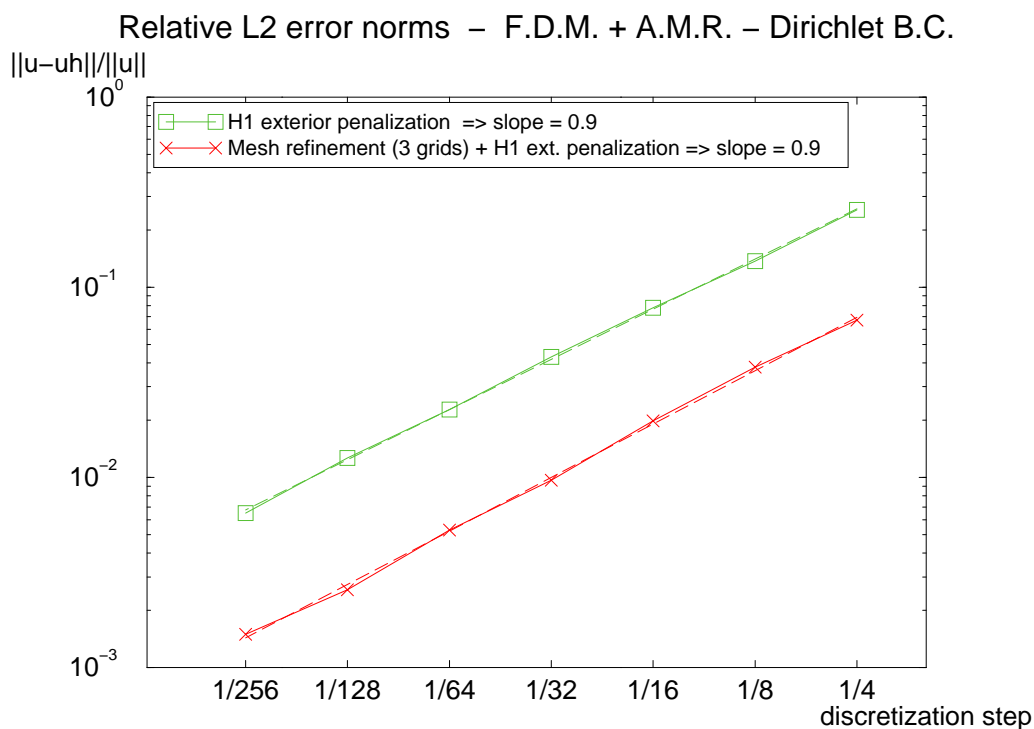


Figure II.17: Discretization errors with or without refinement - Exterior penalization - Dirichlet convection-diffusion problem

Robin problem

The following Robin problem is considered:

$$(\tilde{\mathcal{P}}) \quad \begin{cases} -\Delta \tilde{u} + \operatorname{div}(\tilde{\mathbf{v}} \tilde{u}) = 16r^2 & \text{in } \tilde{\Omega} \\ \frac{\partial \tilde{u}}{\partial n} = 0 & \text{on } \tilde{\Gamma} \\ -\frac{\partial \tilde{u}}{\partial n} = \tilde{u} + 3 & \text{on } \Sigma \quad (\alpha_R = 1, g_R = 3) \end{cases}$$

with $\tilde{\mathbf{v}} = 2r^3 \mathbf{e}_r$.

The analytic solution of this problem is:

$$\tilde{u} = 2 - \frac{5}{3} \exp\left(\frac{r^4 - 1}{2}\right) \quad \text{in } \tilde{\Omega}.$$

The fictitious problem (\mathcal{P}) is solved in Ω with an embedded Robin B.C. in the spread interface (see Table II.2). The results obtained with the three approximations of the characteristic parameter ϵ_h discussed in section II.2.3.b are reported in Figure II.18.

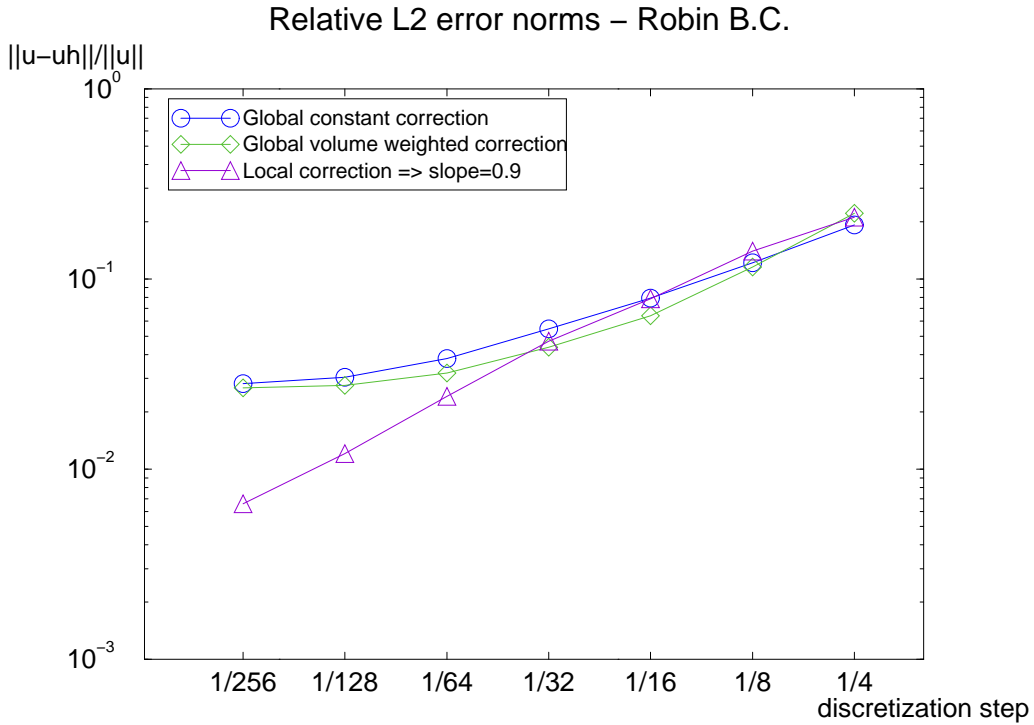


Figure II.18: Discretization errors for a Robin convection-diffusion problem

A global approximation of the characteristic parameter ϵ_h (see Eq. (II.7) and (II.8)) leads to an asymptotic stagnation of the error and then the first-order precision is lost. With a local correction (see Eq. (II.10)), the asymptotically first-order accuracy is then yielded for the L^2 -norm error. Compared to diffusion problems, the asymptotic stagnation of the variants involving a global ϵ_h appears earlier, from the 32×32 mesh. For Robin problems, a local correction is thus required to keep the first-order method.

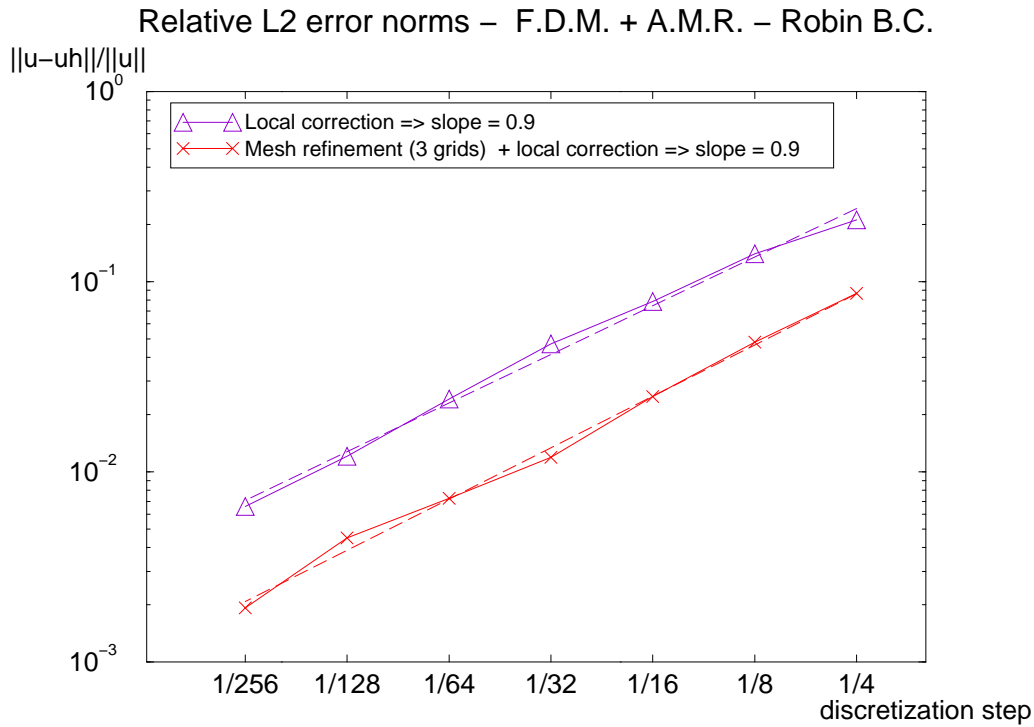


Figure II.19: Discretization errors with and without refinement - Local approximation of ϵ_h - Robin convection-diffusion problem

A local A.M.R. algorithm is performed on the method involving a local epsilon (Eq. (II.10)). As in the Dirichlet case, we compute a three-grid LDC algorithm, which converges by three V-cycles. Figure II.19 illustrates that the combination of the spread interface fictitious domain method with an A.M.R. method leads to a discretization error in $\mathcal{O}(h_f)$ with h_f the mesh step of the local finest grid.

II.6 Conclusion

The numerical results presented in the last section prove the efficiency of the fictitious domain method with a spread interface introduced in this article. This method enables us to handle all the usual B.C.. Moreover, the main advantage of this method is its low cost. The numerical resolution is computed on a single Cartesian mesh of the fictitious domain, without locally modifying the numerical scheme. No surface mesh (on the immersed interface) is required. Even if this is a first-order method, the combination with an adaptive multi-level local mesh refinement solver yields an error on the coarse grid similar to the error obtained without refinement on a mesh with the local finest grid discretization step. The over-cost of the A.M.R. resolution is relatively cheap. Our fictitious domain method combined with a local adaptive mesh refinement is then accurate and relatively cheap in CPU time.

Chapitre III

Une méthode de domaine fictif avec interface fine et sauts immergés

“A general fictitious domain method with immersed jumps and multilevel nested structured meshes”,

by Isabelle Ramière, Philippe Angot and Michel Belliard,
submitted to Journal of Computational Physics, 2006 [RAB06].

Contents

III.1 Introduction and motivation	59
III.2 Fictitious domain method with immersed jumps	61
III.2.1 Model with embedded jump transmission conditions on Σ	62
III.2.2 Treatment of the original E.B.C. on Σ	62
III.2.2.a Embedded Robin or Neumann boundary conditions	62
III.2.2.b Embedded Dirichlet boundary condition	63
III.3 Finite volume (FV) discretization	63
III.3.1 Notations	63
III.3.2 A numerical scheme for the immersed jumps model	64
III.3.3 Geometric correction for a Robin E.B.C.	66
III.4 Adaptive mesh refinement (AMR) solver	69
III.4.1 Multigrid method	69
III.4.2 FIC method	69
III.4.3 A FIC-like solver for the E.B.C. method	71
III.4.3.a Rectangular local patches	71
III.4.3.b A FIC-like solver	72
III.5 Numerical results	75
III.5.1 Solvers	75
III.5.2 Discrete norms	76
III.5.3 First test problem : a quarter disk domain	76
III.5.3.a Diffusion problems	77
III.5.3.b Convection-diffusion problems	91
III.5.4 Second test problem : a corner domain	99
III.5.5 Analysis and comments on the numerical results	100
III.6 Conclusion and perspectives	102

Abstract

This study addresses a new fictitious domain method for elliptic problems in order to handle general embedded boundary conditions (E.B.C.) : Robin, Neumann and Dirichlet conditions on an immersed interface. The main interest of this fictitious domain method is to use simple structured meshes, possibly uniform Cartesian nested grids, which do not generally fit the interface but define an approximate one. A cell-centered finite volume scheme with a non-conforming structured mesh is derived to solve the set of equations with additional algebraic transmission conditions linking both flux and solution jumps through the immersed approximate interface. Hence, a local correction is devised to take account of the relative surface ratios in each control volume for the Robin or Neumann boundary condition. Then, the numerical scheme conserves the first-order accuracy with respect to the mesh step. This opens the way to combine the E.B.C. method with a multilevel mesh refinement solver to increase the precision in the vicinity of the interface. Such a fictitious domain method is very efficient: the L^2 and L^∞ -norm errors vary like $\mathcal{O}(h_{l^*})$ where h_{l^*} is the grid step of the finest refinement level around the interface until the residual first-order discretization error of the non-refined zone is reached.

The numerical results reported here for convection-diffusion problems with Dirichlet or Robin boundary conditions confirm the expected accuracy as well as the performances of the present method.

III.1 Introduction and motivation

This paper is devoted to the numerical validation of a new fictitious domain method for general embedded boundary conditions (E.B.C.) associated with a multilevel local mesh refinement. To compute the solution \tilde{u} of a given problem $(\tilde{\mathcal{P}})$ in a domain $\tilde{\Omega}$, a fictitious domain methodology [Sau63, Mar82] generally consists in several steps.

- i) The domain $\tilde{\Omega}$ is *embedded* inside an *auxiliary fictitious domain* Ω , generally larger and simpler such that : $\Omega = \tilde{\Omega} \cup \Sigma \cup \Omega_e$, where Ω_e stands for an *external domain* and Σ the common *interface* between the two sub-domains. The domain Ω is chosen simply shaped, geometrically more simple than $\tilde{\Omega}$, see Fig. III.1.
- ii) A fictitious problem (\mathcal{P}) is designed and solved all over the fictitious domain Ω , with appropriate transmission conditions on Σ and data in Ω_e in order to handle the original boundary conditions of $(\tilde{\mathcal{P}})$ on the immersed interface Σ . The restriction of the problem (\mathcal{P}) over the domain $\tilde{\Omega}$ is then chosen of the same type of $(\tilde{\mathcal{P}})$.
- iii) The solution \tilde{u} of the original problem $(\tilde{\mathcal{P}})$ is finally found as : $\tilde{u} = u|_{\tilde{\Omega}}$, the restriction of the fictitious solution u of (\mathcal{P}) over $\tilde{\Omega}$, or at least $u|_{\tilde{\Omega}} \approx \tilde{u}$.

The objective is to use a simple structured mesh in Ω , e.g. a uniform Cartesian grid, independent of the shape of the immersed interface Σ . This significantly simplifies and reduces the cost of the mesh generation in comparison to the use of boundary conforming structured or even unstructured meshes, specially in 3-D or for a moving interface Σ . The efficient mesh generation for the latter situations remains actually an extremely challenging problem. Moreover, the solution process of the fictitious problem (\mathcal{P}) with such a regular structured grid on Ω can be carried out with a fast solver.

In this work, the fictitious domain method uses a recent fracture model proposed in [Ang03], which links both flux and solution jumps on an immersed interface Σ . The fictitious domain formulation for general E.B.C. is analyzed in [Ang05]. The addressed problems are general second-order elliptic

problems or associated parabolic ones in $\tilde{\Omega}$ with usual boundary conditions on Σ : Dirichlet, Neumann or Fourier-Robin. An interesting feature of our approach is to allow the treatment of mixed immersed boundary conditions on Σ , *i.e.* the immersed interface Σ may be the union of some parts, each of them supporting a different boundary condition. Moreover, the embedding configurations can be very general (see Fig. III.1). In particular, the original domain does not need to be totally immersed inside the fictitious domain.

In practical computations, the immersed interface Σ (which is not generally aligned with the grid lines) is roughly approximated by some Σ_h lying on sides of control volumes. For example, with a uniform Cartesian grid of mesh step h , Σ_h is a set of stair steps, see Fig. III.9. This defines an approximation $\tilde{\Omega}_h$ of the original domain $\tilde{\Omega}$ such that we may have : $|\text{meas}(\tilde{\Omega}_h) - \text{meas}(\tilde{\Omega})| = \mathcal{O}(h)$. This method is fast and has all the advantages of using a regular structured grid; however, the expected accuracy is only of first-order in the L^2 -norm.

An adaptive local mesh refinement in the vicinity of the immersed interface Σ is then required to increase the precision of the solution. A multigrid [Hac85] process enables the solutions of each level to be each others connected. A FIC-like solver [KACM96, CAL03] is implemented by using a sequence of local nested grids having finer and finer sizes, the solution at each level being corrected by a flux residual calculated with the next finer level. The expected accuracy now varies asymptotically like $\mathcal{O}(h_{l^*})$, where h_{l^*} is the mesh step of the local finest grids around Σ (last level of refinement), until the residual first-order discretization error of the non-refined zone is reached. Such a fictitious domain method combined with an adaptive multilevel local mesh refinement solver proves to work efficiently and it yields a significant improvement in the ratio of the obtained precision over the resulting cost or CPU (central processing unit) time, see also [KAPC00, CAL03] and the references therein.

A lot of papers have been now dedicated to embedded Dirichlet boundary conditions with several approaches, *e.g.* [GPP94, LL94, CJM97, Ang99b, Ang99a, KAPC00, MCJ01, HHvR03] and the references therein, among the methods which deal with a “sharp interface”. However, only few studies are devoted to other embedded boundary conditions like Neumann [GPWZ96, JR99, FK00, Mom05, SBCL06] or especially Robin (or Fourier) ones [Kop74, PP02, Ang99b, ALR05, RAB05]. Moreover, the present method does not require the use of Lagrange multipliers and hence the solution of a saddle-point problem involving the inf-sup condition to be satisfied by the discrete spaces [CJM97, GK98, MT99]. Compared to the Grid Embedded Method (*e.g.* [JC98, MCJ01, MCGV04, SBCL06]), the main advantage of our fictitious model is to conserve the same local stencil of discretization to evaluate the numerical fluxes, even near the immersed interface. As in the Immersed Interface Method (see [Li03] for an overview), appropriate coefficients are introduced in the scheme to take into account the immersed jumps. Moreover, the algebraic transmission conditions used in the present method for the immersed jumps are more general than for the IIM where the jumps are supposed to be given, and no additional unknown is introduced near the immersed interface. Let us mention that some fictitious domain methods use a “diffuse interface” approach to handle immersed boundary conditions, *e.g.* [Pes02, BIM04, RAB07] and the references therein. To the best of our knowledge, only [Ruk67, RAB07] focus on Robin boundary conditions. An interesting feature of the approach described in [RAB07] is to combine such a fictitious domain method with multilevel local mesh refinement, while the fictitious boundary method presented in [TWR03, WT06] deals with multigrid iterative filtering and special grid deformation techniques.

The structure of this paper is as follows. In Section III.2, we recall the fictitious domain model with immersed jumps for an elliptic problem and we detail how to impose each kind of general E.B.C. Section III.3 will be dedicated to the finite volume scheme devoted to compute this fictitious domain method. Then, in Section III.4, an adapted refinement algorithm based on a multilevel flux restric-

tion is introduced to increase the precision of the solution. Finally, in Section III.5 some numerical results focused either on diffusion or on convection-diffusion problems illustrate the performance of the method.

III.2 Fictitious domain method with immersed jumps

Our objective is to solve, with a fictitious domain method, the following problem originally defined in a bounded domain $\tilde{\Omega} \subset \mathbb{R}^d$ with either a Dirichlet, a Neumann or a Robin boundary condition (or mixed) on $\partial\tilde{\Omega} = \partial\tilde{\Omega}_D \cup \partial\tilde{\Omega}_R$:

For $\tilde{\mathbf{a}} \in L^\infty(\tilde{\Omega})^{d \times d}$, $\tilde{\mathbf{v}} \in L^\infty(\tilde{\Omega})^d$, $\tilde{b} \in L^\infty(\tilde{\Omega})$ and $\tilde{f} \in L^2(\tilde{\Omega})$, find $\tilde{u} \in H^1(\tilde{\Omega})$ such that

$$(\tilde{\mathcal{P}}) \left\{ \begin{array}{ll} \operatorname{div}(-\tilde{\mathbf{a}}\nabla\tilde{u} + \tilde{\mathbf{v}}\tilde{u}) + \tilde{b}\tilde{u} = \tilde{f} & \text{in } \tilde{\Omega}, \quad (\text{III.1}) \\ \tilde{u} = u_D & \text{on } \partial\tilde{\Omega}_D, \quad (\text{III.2}) \\ -(\tilde{\mathbf{a}}\nabla\tilde{u}) \cdot \mathbf{n} = \alpha_R \tilde{u} + g_R & \text{on } \partial\tilde{\Omega}_R, \quad (\text{III.3}) \end{array} \right.$$

where \mathbf{n} is the outward unit normal vector on $\partial\tilde{\Omega}_R$, $u_D \in H^{1/2}(\partial\tilde{\Omega}_D)$, $0 \leq \alpha_R \in L^\infty(\partial\tilde{\Omega}_R)$ and $g_R \in L^2(\partial\tilde{\Omega}_R)$.

The tensor of diffusion $\tilde{\mathbf{a}} \equiv (\tilde{a}_{ij})_{1 \leq i, j \leq d}$ and the reaction coefficient \tilde{b} verify the classical ellipticity assumptions:

$$\exists a_0 > 0, \forall \boldsymbol{\xi} \in \mathbb{R}^d, \tilde{\mathbf{a}}(x)\boldsymbol{\xi} \cdot \boldsymbol{\xi} \geq a_0 |\boldsymbol{\xi}|^2 \quad \text{a.e. in } \tilde{\Omega}, \quad (\text{A1})$$

where $|\cdot|$ is the Euclidean norm in \mathbb{R}^d ,

$$\exists b_0 \geq 0, \tilde{b}(x) \geq b_0 \quad \text{a.e. in } \tilde{\Omega}. \quad (\text{A2})$$

In a fictitious domain approach, the original domain $\tilde{\Omega}$ is embedded inside an open bounded polygonal domain $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ such that $\Omega = \tilde{\Omega} \cup \Sigma \cup \Omega_e$, where Ω_e is the external fictitious domain and Σ the common interface between $\tilde{\Omega}$ and Ω_e (see Figure III.1 and III.8). This interface $\Sigma \subset \mathbb{R}^{d-1}$ is called *immersed interface*. The fictitious domain Ω is chosen to be geometrically simple (rectangular for example in 2-D). The boundary of $\tilde{\Omega}$ is defined by $\partial\tilde{\Omega} = \tilde{\Gamma} \cup \Sigma$, and the boundary of Ω by $\partial\Omega = \tilde{\Gamma} \cup \Gamma_e$ (see Fig. III.1).

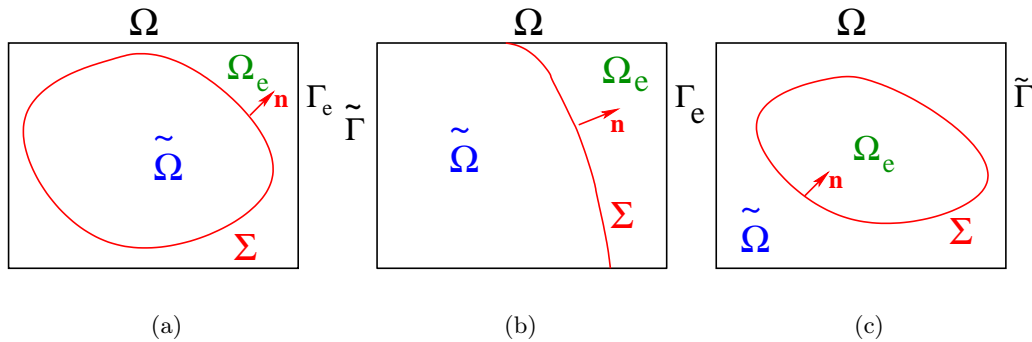


Figure III.1: Embedding the original domain $\tilde{\Omega}$ inside a fictitious rectangular domain Ω .

Let us first notice that writing the Robin boundary condition (III.3) on Σ in a fictitious domain method with $\Omega \supset \tilde{\Omega}$ is not directly possible unless accepting flux or solution jumps on Σ or both. This problem is thus “extended” in the following manner to the whole fictitious domain Ω by using the formulation for general embedded boundary conditions introduced in [Ang05].

III.2.1 Model with embedded jump transmission conditions on Σ

Let \mathbf{n} be either the outward unit normal vector on Γ_e , or the unit normal vector on Σ oriented from $\tilde{\Omega}$ to Ω_e . For a function ψ in $H^1(\tilde{\Omega} \cup \Omega_e)$, let ψ_{Σ}^- and ψ_{Σ}^+ be the traces of $\psi|_{\tilde{\Omega}}$ and $\psi|_{\Omega_e}$ on each side of Σ respectively, $\bar{\psi}|_{\Sigma} = (\psi_{\Sigma}^+ + \psi_{\Sigma}^-)/2$ the arithmetic mean of traces of ψ , and $[[\psi]]_{\Sigma} = (\psi_{\Sigma}^+ - \psi_{\Sigma}^-)$ the jump of traces of ψ on Σ oriented by \mathbf{n} .

For the data $f \in L^2(\Omega)$, g and q given in $L^2(\Sigma)$, we consider the second-order elliptic problem for the real-valued function u defined in Ω and including *immersed transmission conditions* on Σ which assume jumps of both the normal diffusive flux $\varphi(u) \cdot \mathbf{n} \equiv -(\mathbf{a}\nabla u) \cdot \mathbf{n}$ and the traces of the solution u through the interface Σ :

$$(\mathcal{P}) \left\{ \begin{array}{ll} \operatorname{div}(-\mathbf{a}\nabla u + \mathbf{v}u) + bu = f & \text{in } \Omega, & \text{(III.4)} \\ \text{original B.C.} & \text{on } \tilde{\Gamma}, & \text{(III.5)} \\ \text{suitable B.C.} & \text{on } \Gamma_e, & \text{(III.6)} \\ [[(\mathbf{a}\nabla u) \cdot \mathbf{n}]_{\Sigma} = \alpha \bar{u}|_{\Sigma} - q & \text{on } \Sigma, & \text{(III.7)} \\ \overline{(\mathbf{a}\nabla u) \cdot \mathbf{n}}|_{\Sigma} = \beta [[u]]_{\Sigma} - g & \text{on } \Sigma, & \text{(III.8)} \end{array} \right.$$

where the uniformly positive definite tensor of diffusion $\mathbf{a} \equiv (a_{ij})_{1 \leq i, j \leq d}$, the reaction coefficient $b \geq 0$, and the *transfer coefficients* $\alpha, \beta \geq 0$ on Σ are measurable and bounded functions verifying classical ellipticity assumptions. Moreover, we choose

$$\mathbf{a}|_{\tilde{\Omega}} = \tilde{\mathbf{a}}, \quad \mathbf{v}|_{\tilde{\Omega}} = \tilde{\mathbf{v}}, \quad b|_{\tilde{\Omega}} = \tilde{b}, \quad f|_{\tilde{\Omega}} = \tilde{f}$$

in order to recover the original problem (III.1-III.3) in $\tilde{\Omega}$. The B.C. (III.6) on Γ_e is chosen to ensure the solvability of the above fictitious domain model. This problem is proved to be well-posed in [Ang03, Ang05] and the solution u belongs to $H^1(\tilde{\Omega} \cup \Omega_e)$. When $\alpha = g = q = 0$ and $\beta \rightarrow \infty$, the perfect transmission problem is recovered with $u \in H^1(\Omega)$, see Theorem 3.2 in [Ang99b].

The data $\mathbf{a}, \mathbf{v}, b, f$ in Ω_e and α, β, g, q on Σ will be defined further in order to get $u|_{\tilde{\Omega}} = \tilde{u}$ or at least $u_{\eta}|_{\tilde{\Omega}} \approx \tilde{u}$ when the model is penalized with a penalty parameter $\eta \rightarrow 0$.

III.2.2 Treatment of the original E.B.C. on Σ

III.2.2.a Embedded Robin or Neumann boundary conditions

Let $\varphi_{\Sigma}^- \equiv -(\mathbf{a}\nabla u)^- \cdot \mathbf{n}|_{\Sigma}$ and $\varphi_{\Sigma}^+ \equiv -(\mathbf{a}\nabla u)^+ \cdot \mathbf{n}|_{\Sigma}$ be the traces of the diffusive normal flux on each side of Σ respectively. The algebraic transmission conditions (III.7-III.8) write

$$\varphi_{\Sigma}^- - \varphi_{\Sigma}^+ = \frac{\alpha}{2} (u_{\Sigma}^+ + u_{\Sigma}^-) - q, \quad \text{(III.9)}$$

$$-\frac{1}{2}(\varphi_{\Sigma}^+ + \varphi_{\Sigma}^-) = \beta (u_{\Sigma}^+ - u_{\Sigma}^-) - g. \quad \text{(III.10)}$$

The four unknown quantities $\varphi_{\Sigma}^-, \varphi_{\Sigma}^+, u_{\Sigma}^-$ and u_{Σ}^+ on Σ are then linked with the algebraic transmission conditions (III.9-III.10). Hence, by eliminating one of the two exterior quantities, either φ_{Σ}^+ or u_{Σ}^+ , φ_{Σ}^- can be written in the two following equivalent ways, respectively :

$$\varphi_{\Sigma}^- = \left(\beta + \frac{\alpha}{4} \right) u_{\Sigma}^- - \left(\beta - \frac{\alpha}{4} \right) u_{\Sigma}^+ + g - \frac{q}{2}, \quad \text{on } \Sigma, \quad \text{(III.11)}$$

$$\varphi_{\Sigma}^- = \frac{1}{\left(\beta + \frac{\alpha}{4} \right)} \left[\alpha \beta u_{\Sigma}^- + \left(\beta - \frac{\alpha}{4} \right) \varphi_{\Sigma}^+ + \frac{\alpha}{2} g - \beta q \right], \quad \text{on } \Sigma. \quad \text{(III.12)}$$

Note that Eq. (III.12) is *a priori* defined if α and β are different from 0.

The particular choice $\beta = \alpha/4$ requires *no exterior control* since both Eqs. (III.11) and (III.12) yield the same Robin boundary condition below, independently of u_Σ^+ or φ_Σ^+ :

$$\varphi_\Sigma^- \equiv -(\mathbf{a}\nabla u)^- \cdot \mathbf{n}|_\Sigma = \frac{\alpha}{2}u_\Sigma^- + g - \frac{q}{2}, \quad \text{on } \Sigma. \quad (\text{III.13})$$

When the Robin boundary condition in (III.3) is desired for the original problem (III.1-III.3) in $\tilde{\Omega}$, the following immersed boundary condition on Σ must be satisfied by the solution of the fictitious domain problem in Ω :

$$\varphi_\Sigma^- \equiv -(\mathbf{a}\nabla u)^- \cdot \mathbf{n}|_\Sigma = \alpha_R u_\Sigma^- + g_R \quad \text{on } \Sigma. \quad (\text{III.14})$$

This gives the sufficient conditions for the data such that Eq. (III.13) satisfies (III.14), see (R) in the Table III.1.

The Neumann boundary condition is obtained as the particular Robin case where $\alpha_R = 0$.

This Robin or Neumann E.B.C. method is proved to be consistent, *i.e.* $u|_{\tilde{\Omega}} = \tilde{u}$, in [Ang05]. Other variants are proposed there which require either u_Σ^+ or φ_Σ^+ to be “controlled” by L^2 or H^1 volume penalty methods [Ang99b, Ang99a, ABF99] performed with the parameters \mathbf{a} , b and f in Ω_e .

III.2.2.b Embedded Dirichlet boundary condition

Let $0 < \eta \ll 1$ be a real penalty parameter (called *penalty coefficient*) which is likely to tend to zero. When the Dirichlet condition $u_\Sigma^- = u_D$ is to be handled, the Robin condition in Eq. (III.3) or (III.14) can be penalized by a *surface penalty* on Σ with $\alpha_R = \frac{1}{\eta}$ ($\alpha_R \xrightarrow{\eta \rightarrow 0} +\infty$) and $g_R = -\frac{1}{\eta}u_D$. The previous Robin E.B.C. method can be then penalized as in (D1) in the Table III.1. Hence the fictitious domain model with no solution jump $[[u_\eta]]_\Sigma \simeq 0$ can be used for example with the parameters : $\alpha = \beta = \frac{1}{\eta}$, $q = \frac{1}{\eta}u_D$ and $g = 0$.

Another type of method consists in using a L^2 or H^1 volume penalty in the exterior domain Ω_e such that $\lim_{\eta \rightarrow 0} u_{\eta\Sigma}^+ = u_D$ for the model with $\beta = \frac{1}{\eta} \rightarrow \infty$, $g = 0$ and thus $[[u_\eta]]_\Sigma \xrightarrow{\eta \rightarrow 0} 0$, as proposed in [Ang99b]. In that case, we consider an extension $u_e \in H^1(\Omega_e)$ of u_D over Ω_e such that the trace $\gamma_0(u_e) \equiv u_e|_\Sigma = u_D$, see (D2) in the Table III.1.

The convergence of these methods is proved in [Ang05] and for usual weak regularity assumptions the following error estimate : $||u_\eta|_{\tilde{\Omega}} - \tilde{u}||_{H^1(\tilde{\Omega})} = \mathcal{O}(\sqrt{\eta})$ is at least reached. Better estimates are possible with stronger regularity.

Since the immersed boundary conditions are treated within the same unified formulation with appropriate data (see Table III.1), it is straightforward to deal with mixed embedded boundary conditions on the immersed interface Σ . An example is given in Section III.5.4.

III.3 Finite volume (FV) discretization

III.3.1 Notations

The polygonal domain Ω is meshed with a family $\mathcal{T}_h = \{K\}$ of disjointed finite volumes $K \subset \Omega$ (called “*control volumes*”) which are open convex polygons such that $\overline{\Omega} = \bigcup_{K \in \mathcal{T}_h} \overline{K}$ with usual

E.B.C. method	Parameters in Ω_e	Parameters on Σ
Robin (R) <i>No exterior control</i>	$\mathbf{a} _{\Omega_e} = 1, \mathbf{v} _{\Omega_e} = \mathbf{0},$ $b _{\Omega_e} = f _{\Omega_e} = 0$	$\alpha = 4\beta = 2\alpha_R,$ $g - \frac{q}{2} = g_R$
Dirichlet (D1) <i>Surface penalty</i>	$\mathbf{a} _{\Omega_e} = 1, \mathbf{v} _{\Omega_e} = \mathbf{0},$ $b _{\Omega_e} = f _{\Omega_e} = 0$	$\alpha = 4\beta = \frac{2}{\eta},$ $\frac{q}{2} - g = \frac{1}{\eta}u_D$
Dirichlet (D2) <i>Volume penalty</i>	$\mathbf{a} _{\Omega_e} = \begin{cases} \mathbf{Id} & L^2 \text{ penalty} \\ \frac{1}{\eta}\mathbf{Id} & H^1 \text{ penalty} \end{cases}, \mathbf{v} _{\Omega_e} = \mathbf{0},$ $b _{\Omega_e} = \frac{1}{\eta}, f _{\Omega_e} = \frac{1}{\eta}u_e$	$\beta = \frac{1}{\eta},$ $\alpha = q = g = 0$

Table III.1: Parameters in Ω_e and on Σ for the E.B.C. method with immersed jumps.

assumptions, e.g. [EGH00]. The mesh size is defined by $h = \sup\{\text{diam}(K), K \in \mathcal{T}_h\}$.

Let \mathcal{E} be the family of sides (also called edges in 2-D) of the control volumes. For any $(K, L) \in \mathcal{T}_h^2$ with $K \neq L$, either the $(d-1)$ -dimensional Lebesgue measure of $\overline{K} \cap \overline{L}$ is 0 or $\overline{K} \cap \overline{L} = \overline{\sigma}$ for some $\sigma \in \mathcal{E}$, which will then be denoted by $\sigma \equiv K|L$. The set of neighbors of K is denoted by $\mathcal{N}(K)$, that is $\mathcal{N}(K) = \{L \in \mathcal{T}_h; \exists \sigma \in \mathcal{E}, \overline{\sigma} = \overline{K} \cap \overline{L}\}$. For each $K \in \mathcal{T}_h$, let \mathcal{E}_K be the subset of \mathcal{E} such that $\partial K = \overline{K} \setminus K = \bigcup_{\sigma \in \mathcal{E}_K} \overline{\sigma}$. Furthermore, $\mathcal{E} = \bigcup_{K \in \mathcal{T}_h} \mathcal{E}_K$. The set of interior (resp. boundary) sides is denoting by \mathcal{E}_{int} (resp. \mathcal{E}_{ext}), that is $\mathcal{E}_{int} = \{\sigma \in \mathcal{E}; \sigma \not\subset \partial\Omega\}$ (resp. $\mathcal{E}_{ext} = \{\sigma \in \mathcal{E}; \sigma \subset \partial\Omega\}$). One of the most interest of the E.B.C. method is to use a simple non-conforming and structured mesh. Therefore, the sides of the mesh \mathcal{T}_h do not generally match the immersed interface Σ (e.g. with a uniform Cartesian mesh like in Section III.5). An approximate interface Σ_h is thus defined by the mesh (see Section III.5). This interface separates the approximate original domain $\tilde{\Omega}_h$ from the approximate external domain $\Omega_{e,h}$. Let $\mathcal{E}_\Sigma = \{\sigma \in \mathcal{E}; \sigma \subset \Sigma_h\}$ be the set of sides lying on Σ_h . For each $K \in \mathcal{T}_h$, a “cell-centered” discretization point $x_K \in K$ is chosen such that for each $\sigma \in \mathcal{E}_K; \sigma = K|L$, the segment $[x_K, x_L]$ is orthogonal to σ at the point $x_\sigma \in \sigma$. For each $K \in \mathcal{T}_h$, let $d_{K,\sigma} = |x_K - x_\sigma| > 0$ be the distance from x_K to σ and $\mathbf{n}_{K,\sigma}$ be the unit outward normal vector on σ . For $\sigma = K|L$, we then denote by d_σ the Euclidean distance between x_K and x_L , hence we have $d_\sigma = d_{K,\sigma} + d_{L,\sigma}$.

For each $K \in \mathcal{T}_h$ or $\sigma \in \mathcal{E}$, $m(K) = \int_K dx$ and $m(\sigma) = \int_\sigma ds$ denote the measure of K or σ . For a given quantity ψ , the discrete values ψ_K and ψ_σ are defined by the mean values of ψ over K or σ , respectively:

$$\psi_K = \frac{1}{m(K)} \int_K \psi(x) dx, \quad \text{and} \quad \psi_\sigma = \frac{1}{m(\sigma)} \int_\sigma \psi(s) ds.$$

III.3.2 A numerical scheme for the immersed jumps model

For sake of simplicity, the numerical scheme is now written for an isotropic diffusion tensor $\mathbf{a} = a(x)\mathbf{Id}$. For each $K \in \mathcal{T}_h$ the main discrete unknown denoted by u_K is an approximation of the value $u(x_K)$ of the exact solution u at the nodal point x_K of the mesh. Two auxiliary unknowns $(u_{K,\sigma}, u_{L,\sigma})$ are introduced on $\sigma = K|L \in \mathcal{E}_{int}$ which are approximations of respectively $u(x_\sigma)|_K$ and $u(x_\sigma)|_L$.

The cell-centered FV numerical scheme uses the scheme proposed in [Ang03] for diffusion-reaction problems. The numerical convective flux is obtained with a monotone upwind scheme. This scheme

is of first order which is in agreement with the expected accuracy of our method. This FV scheme allows jumps of diffusive and convective fluxes as well as jumps of the solution on each side $\sigma \in \mathcal{E}_{int}$ and it reads in the following synthetic form:

$$\sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} m(\sigma) (F_{K,\sigma} + v_{K,\sigma} u_{K,\sigma}^{Up}) + m(K) b_K u_K = m(K) f_K, \quad \forall K \in \mathcal{T}_h \quad (\text{III.15})$$

where the numerical diffusive flux $F_{K,\sigma}$ reads for all $K \in \mathcal{T}_h$:

$$F_{K,\sigma} = \begin{cases} -a_K \frac{u_{K,\sigma} - u_K}{d_{K,\sigma}} & \text{if } \sigma = K|L \in \mathcal{E}_{int} \\ -a_K \frac{u_\sigma - u_K}{d_{K,\sigma}} & \text{if } \sigma \in \mathcal{E}_{ext} \text{ with a Dirichlet B.C. on } \sigma : u = g_D \\ \frac{a_K}{a_K + \kappa_\sigma d_{K,\sigma}} (\kappa_\sigma u_K + \phi_\sigma) & \text{if } \sigma \in \mathcal{E}_{ext} \text{ with a Robin B.C. on } \sigma : -(\mathbf{a} \cdot \nabla u) \cdot \mathbf{n} = \kappa u + \phi \end{cases} \quad (\text{III.16})$$

and the numerical convective flux $V_{K,\sigma} = v_{K,\sigma} u_{K,\sigma}^{Up}$ is obtained with an upstream scheme by:

$$v_{K,\sigma} = \frac{1}{m(\sigma)} \int_\sigma \mathbf{v}_{K,\sigma}^- \cdot \mathbf{n}_{K,\sigma} \, ds$$

and

$$u_{K,\sigma}^{Up} = \begin{cases} u_K & \text{if } v_{K,\sigma} \geq 0 \\ u_\sigma & \text{if } v_{K,\sigma} < 0 \text{ and } \sigma \in \mathcal{E}_{ext} \\ u_{K,\sigma} & \text{if } v_{K,\sigma} < 0 \text{ and } \sigma \in \mathcal{E}_\Sigma \cap \mathcal{E}_{int} \\ u_L & \text{if } v_{K,\sigma} < 0 \text{ and } \sigma \notin (\mathcal{E}_\Sigma \cup \mathcal{E}_{ext}) \end{cases}$$

The key point of this scheme is to use transmissions conditions on all $\sigma \in \mathcal{E}_{int}$ in order to have the same generic numerical scheme for all the mesh. Thus the discretization of Eqs. (III.7-III.8) for all $\sigma = K|L \in \mathcal{E}_{int}$ yields respectively:

$$F_{K,\sigma} + F_{L,\sigma} = \alpha_\sigma \frac{u_{K,\sigma} + u_{L,\sigma}}{2} - q_\sigma \quad (\text{III.17})$$

$$\frac{1}{2}(F_{L,\sigma} - F_{K,\sigma}) = \beta_\sigma (u_{L,\sigma} - u_{K,\sigma}) - \mathbf{n} \cdot \mathbf{n}_{K,\sigma} g_\sigma \quad (\text{III.18})$$

where \mathbf{n} now stands for the unit normal on Σ_h .

Hence, for all $\sigma = K|L \in \mathcal{E}_{int}$, Eqs. (III.16) and (III.17-III.18) enable the interface unknown $u_{K,\sigma}$ to be expressed with respect to the main discrete unknowns $(u_K)_{K \in \mathcal{T}_h}$:

$$u_{K,\sigma} = \frac{\hat{a}_\sigma d_{L,\sigma}}{a_L d_\sigma} \left(1 + \frac{\alpha_\sigma}{4\beta_\sigma} \right) u_K + \frac{\hat{a}_\sigma d_{K,\sigma}}{a_K d_\sigma} \left(1 - \frac{\alpha_\sigma}{4\beta_\sigma} \right) u_L + \frac{\hat{a}_\sigma}{d_\sigma \beta_\sigma} u_K + \frac{\hat{a}_\sigma d_{K,\sigma} q_\sigma}{a_K d_\sigma} \left(\frac{d_{L,\sigma}}{a_L} + \frac{1}{2\beta_\sigma} \right) - \mathbf{n} \cdot \mathbf{n}_{K,\sigma} \frac{\hat{a}_\sigma d_{K,\sigma} g_\sigma}{a_K d_\sigma \beta_\sigma} \left(1 + \frac{\alpha_\sigma d_{L,\sigma}}{2a_L} \right) \quad (\text{III.19})$$

where

$$\hat{a}_\sigma = \frac{a_\sigma}{1 + \frac{a_\sigma}{\beta_\sigma d_\sigma} + \alpha_\sigma \left(\frac{1}{4\beta_\sigma} + \lambda_\sigma \right)}, \quad a_\sigma = \frac{d_\sigma a_K a_L}{d_{L,\sigma} a_K + d_{K,\sigma} a_L},$$

$$\lambda_\sigma = \frac{d_{K,\sigma} d_{L,\sigma}}{d_{L,\sigma} a_K + d_{K,\sigma} a_L}.$$

Therefore, the interface unknowns $u_{K,\sigma}, u_{L,\sigma}$ can also be eliminated in the diffusive flux expression as reported in [Ang03] and we have:

$$\begin{aligned} F_{K,\sigma} = & - \hat{a}_\sigma \left(\frac{u_L - u_K}{d_\sigma} \right) + \frac{\alpha_\sigma \hat{a}_\sigma}{2\beta_\sigma d_\sigma} \left(\frac{u_K + u_L}{2} \right) + \frac{\alpha_\sigma \hat{a}_\sigma d_{L,\sigma}}{a_L d_\sigma} u_K \\ & - \frac{\hat{a}_\sigma q_\sigma}{d_\sigma} \left(\frac{d_{L,\sigma}}{a_L} + \frac{1}{2\beta_\sigma} \right) + \mathbf{n} \cdot \mathbf{n}_{K,\sigma} \frac{\hat{a}_\sigma g_\sigma}{d_\sigma \beta_\sigma} \left(1 + \frac{\alpha_\sigma d_{L,\sigma}}{2a_L} \right), \end{aligned} \quad (\text{III.20})$$

The cell-centered FV scheme (III.15) then requires the standard (2d+1)-points stencil only. This numerical scheme is as cheap as the standard scheme without any jump. The convergence properties of the present scheme are also presented in [Ang03].

On the sides $\sigma \in \mathcal{E}_{int}; \sigma \notin \mathcal{E}_\Sigma$, we set the discrete transfer coefficients of Eqs. (III.17-III.18) in order to respect the local conservativity and the solution continuity properties :

$$F_{K,\sigma} = -F_{L,\sigma}, \quad \text{and} \quad u_{K,\sigma} = u_{L,\sigma}, \quad \text{if } \sigma = K|L \in \mathcal{E}_{int} \setminus \mathcal{E}_\Sigma \quad (\text{III.21})$$

Hence,

$$\alpha_\sigma = q_\sigma = g_\sigma = 0 \quad \text{and} \quad \beta_\sigma = \frac{1}{\eta} \rightarrow \infty \quad \forall \sigma \in \mathcal{E}_{int} \setminus \mathcal{E}_\Sigma$$

Otherwise, $\forall \sigma \in \mathcal{E}_\Sigma \cap \mathcal{E}_{int}$, the discrete transfer coefficients are equal to the mean value on σ of the transfer coefficients of the fictitious problem (\mathcal{P}) lying on Σ_h (see Table III.1).

REMARK 1. $\forall \sigma \in \mathcal{E}_{int}; \sigma \notin \mathcal{E}_\Sigma$, the local conservativity of the convective flux is also ensured

$$V_{K,\sigma} = -V_{L,\sigma}$$

REMARK 2. *In the following numerical results, a Cartesian mesh is used. In this case, if the diffusion tensor is diagonal, the above FV scheme can be applied in each mesh direction. The non-trivial anisotropic case requires some important modifications of the FV scheme, which are beyond the scope of this paper.*

III.3.3 Geometric correction for a Robin E.B.C.

When the interface Σ is roughly approximated by the mesh into Σ_h , a surface correction is then required for a Robin (or a non homogeneous Neumann) embedded boundary condition. Let $\omega_{h,\Sigma} = \{\cup K, K \in \mathcal{T}_h, K \cap \Sigma \neq \emptyset\}$ be the union of the finite volumes crossed by Σ . Around each finite volume $K \subset \omega_{h,\Sigma}$, the local conservativity between the embedded flux integral and the approximate flux integral is ensured by

$$\int_{\Sigma \cap \hat{K}} \varphi_{\Sigma}^- ds = \int_{\Sigma_h \cap \hat{K}} \frac{1}{\epsilon_K} \varphi_{\Sigma_h}^- ds \quad (\text{III.22})$$

where $\varphi_{\Sigma_h}^- = \alpha_R u_{\Sigma_h}^- + g_R$, \hat{K} is a union of control volumes around K precised below and ϵ_K is the local correction parameter to determine.

For all $K \subset \omega_{h,\Sigma}$, we denote by $\hat{\mathcal{E}}_K = \{\sigma \in \mathcal{E}; \sigma \in \mathcal{E}_K \cap \mathcal{E}_\Sigma, \sigma \in \mathcal{E}_{ext} \text{ or } \sigma = K|L \text{ with either } L \subset \Omega_{e,h} \text{ or } L \not\subset \omega_{h,\Sigma}\}$ the set of sides lying on Σ_h associated to K . Otherwise, for $K \not\subset \omega_{h,\Sigma}$, $\hat{\mathcal{E}}_K = \emptyset$.

Hence, for all $\sigma \subset \Sigma_h$, $\sigma \in \hat{\mathcal{E}}_K$ the discrete value $\varphi_{\Sigma_h}^-$ of φ_{Σ}^- and thus the discrete data α_R and g_R on σ are divided by the characteristic parameter ϵ_K .

Let us now detail the calculation of ϵ_K . This correction takes account of the relative surfaces considered in each cell $K \subset \omega_{h,\Sigma}$. For sake of simplicity, a piecewise linear approximation Σ_l (see Fig. III.2) of Σ composed by a segment $\Sigma_{l,K}$ in each control volume $K \subset \omega_{h,\Sigma}$ is defined.

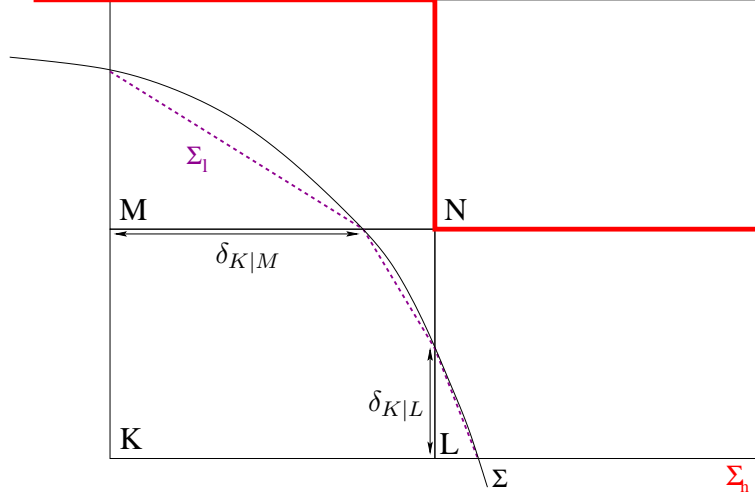


Figure III.2: Local parameters in a control volume $K \subset \omega_{h,\Sigma}$.

So, a natural way to evaluate the correction parameter ϵ_K in each $K \subset \omega_{h,\Sigma}$ would be

$$\epsilon_K = \frac{\sum_{\sigma \in \hat{\mathcal{E}}_K} m(\sigma)}{\text{meas}(\Sigma_{l,K})} \quad (\text{III.23})$$

$$\forall \sigma \subset \Sigma_h, \sigma \in \hat{\mathcal{E}}_K, \quad \epsilon_\sigma = \epsilon_K \quad (\text{III.24})$$

However, for some cells $K \subset \omega_{h,\Sigma}$, we may have $\hat{\mathcal{E}}_K = \emptyset$, for example $K \subset \omega_{h,\Sigma}$ without any $\sigma \in \mathcal{E}_\Sigma$ (see Fig. III.2) or $K \subset (\omega_{h,\Sigma} \cap \Omega_{e,h})$ with $\sigma = K|L \in \mathcal{E}_\Sigma$ where $L \subset \omega_{h,\Sigma}$. For such a cell, since $\epsilon_K = 0$, the approximate measure of the segment $\Sigma_{l,K}$ is never taken into account. Then,

$$\begin{aligned} \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_\Sigma} \int_\sigma \frac{1}{\epsilon_\sigma} &= \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_\Sigma} \frac{m(\sigma)}{\epsilon_\sigma} \\ &= \sum_{K \subset \omega_{h,\Sigma}; \hat{\mathcal{E}}_K \neq \emptyset} \frac{1}{\epsilon_K} \sum_{\sigma \in \hat{\mathcal{E}}_K} m(\sigma) \\ &= \sum_{K \subset \omega_{h,\Sigma}; \hat{\mathcal{E}}_K \neq \emptyset} \text{meas}(\Sigma_{l,K}) < \text{meas}(\Sigma_l) \approx \text{meas}(\Sigma), \end{aligned}$$

and the conservativity of the fluxes will not be ensured.

In order to take account of the entire measure of the immersed interface Σ , for the cells $K \subset \omega_{h,\Sigma}$ such that $\hat{\mathcal{E}}_K = \emptyset$, the measure of $\Sigma_{l,K}$ is added to the measure of $\Sigma_{l,K'}$ of one of the neighbor $K' \in \mathcal{N}(K)$ with $\hat{\mathcal{E}}_{K'} \neq \emptyset$. The choice of the neighbor K' (called in the sequel “chosen” neighbor) can be made by different ways, for example arbitrarily among all the neighbors $L \in \mathcal{N}(K)$ such that $\hat{\mathcal{E}}_L \neq \emptyset$. Another choice is detailed hereafter. Let us underline that for each $K \subset \omega_{h,\Sigma}$ such

that $\hat{\mathcal{E}}_K = \emptyset$, the “chosen” neighbor is defined uniquely in order to take account of the measure of $\Sigma_{l,K}$ only once.

For all $K \subset \omega_{h,\Sigma}$ such that $\hat{\mathcal{E}}_K \neq \emptyset$, let $\mathcal{C}(K) = \{L \in \mathcal{T}_h; L \in \mathcal{N}(K), L \subset \omega_{h,\Sigma}, \hat{\mathcal{E}}_L = \emptyset, K \text{ is the “chosen” neighbor of } L\}$ be the set of cells of which K is the “chosen” neighbor. Then, we define $\hat{\Sigma}_{l,K}$ such that:

$$\hat{\Sigma}_{l,K} = \Sigma_{l,K} + \sum_{L \in \mathcal{C}(K)} \Sigma_{l,L} \quad (\text{III.25})$$

and we have

$$\hat{K} = K \cup \left(\bigcup_{L \in \mathcal{C}(K)} L \right).$$

Thus, $\forall K \subset \omega_{h,\Sigma}$ such that $\hat{\mathcal{E}}_K \neq \emptyset$, the local correction parameter ϵ_K becomes

$$\epsilon_K = \frac{\sum_{\sigma \in \hat{\mathcal{E}}_K} m(\sigma)}{\text{meas}(\hat{\Sigma}_{l,K})} \quad (\text{III.26})$$

And

$$\forall \sigma \subset \Sigma_h, \sigma \in \hat{\mathcal{E}}_K, \quad \epsilon_\sigma = \epsilon_K \quad (\text{III.27})$$

In order to determine the “chosen” neighbor, we favour the neighbor cell having the most important intersection with the original domain $\tilde{\Omega}$. To do this, in each $K \subset \omega_{h,\Sigma}$ with $\hat{\mathcal{E}}_K = \emptyset$, and for each side $\sigma = K|L \in \mathcal{E}_K \cap \mathcal{E}_{int}$ straddling the original domain $\tilde{\Omega}$ and the exterior domain Ω_e , we denote by $\delta_{K|L}$ the proportion of σ lying in the original domain $\tilde{\Omega}$ (see Fig. III.2). Among the neighbors $L \in \mathcal{N}(K)$ such that $\hat{\mathcal{E}}_L \neq \emptyset$, the “chosen” neighbour K' is taken such that $\delta_{K|K'} = \max_L \delta_{K|L}$.

REMARK 1. The local surface ratio ϵ_K (see Eq.(III.26)) is defined within an $\mathcal{O}(h_K)$ error, where h_K is the diameter of the cell K . For example, an approximation of ϵ_K when Σ is a circle, as in the following numerical tests, can be found in [ALR05].

REMARK 2. A *global correction* can be also considered with a rough estimation of ϵ_K by a constant value ϵ_h over the whole interface Σ_h . In this case, it is the ratio between the surfaces of Σ_h and Σ :

$$\epsilon_h = \frac{\text{meas}(\Sigma_h)}{\text{meas}(\Sigma)} \quad (\text{III.28})$$

However, this global correction is not accurate enough to ensure the convergence of the fictitious domain algorithm with respect to the mesh step h in the general case (see the numerical results in Section III.5).

REMARK 3. Theoretical error estimates

In [AR06], a convergence study of the error is carried out for a Q_1 -finite element method with Cartesian non-boundary fitted meshes for both Dirichlet and Robin boundary conditions. This analysis can be considered as a subproblem of the convergence study of the previous fictitious domain methods. In this case, the immersed boundary conditions are supposed to be perfectly imposed on the approximate interface or at least the modelling error in order to impose the immersed boundary conditions is assumed to be negligible compared to the approximation error of the immersed interface.

For a regular mesh, if the exact solution \tilde{u} belongs to $H^2(\tilde{\Omega})$, the following estimates hold in the approximate domain $\tilde{\Omega}_h$:

$$\begin{aligned}\|\tilde{u} - u_h\|_{H^1(\tilde{\Omega}_h)} &= \mathcal{O}(h^{1/2}), \\ \|\tilde{u} - u_h\|_{L^2(\tilde{\Omega}_h)} &= \mathcal{O}(h).\end{aligned}$$

These estimates only depend on appropriate norms of the original data and the H^2 -norm of the exact solution \tilde{u} in the original domain $\tilde{\Omega}$.

For a cell-centered FV scheme as introduced in the previous section, it is natural to obtain similar error estimates. The numerical results reported in Section III.5 confirm the $\mathcal{O}(h)$ mesh convergence for the L^2 error norm. Moreover, these estimates in the approximate domain $\tilde{\Omega}_h$ seem not to depend on the regularity of the fictitious problem solution over Ω as is numerically the case in the Lagrange multipliers approach [GG95]. Indeed, the solution of the whole fictitious problem (\mathcal{P}) with immersed jumps does not generally belong to $H^1(\Omega)$ (when $[[u]]_\Sigma \neq 0$), but the convergence remains of first-order for the L^2 -norm.

III.4 Adaptive mesh refinement (AMR) solver

The E.B.C. method proposed in this paper uses a structured (most often Cartesian) uniform mesh. As explained in the previous section, this mesh defines an approximate interface Σ_h on which the E.B.C. are imposed. In order to improve the accuracy of the solution, the present fictitious domain method is combined with a local multilevel mesh refinement solver in the vicinity of the immersed interface Σ .

III.4.1 Multigrid method

A multigrid method [Hac85] is based on a recursive process that consists in generating local subgrids G_l , $0 \leq l$, having finer and finer discretization steps h_l until reaching a given level l^* . The differential problem under study is solved on each computational grid. The solutions between each level are connected through the following interactions:

- the boundary conditions on the fine grids G_l , $0 < l \leq l^*$, are interpolated from the solution to the next coarser grid G_{l-1} via a *prolongation operator* P_l^{l-1} ,
- in the problem solved on the coarse grids G_l , $0 \leq l < l^*$, some corrective terms evaluated from the solution to next finer grid G_{l+1} , are added to the right-hand side by a *restriction operator* R_l^{l+1} .

Iterations of a multigrid process can be represented for example by V-cycles (see Fig. III.3).

In our approach, each level of refinement l consists of a set of local patches G_l . Each patch G_l is a nested subgrid around a single control volume at the next coarser level $l-1$.

III.4.2 FIC method

The principle of the Flux Interface Correction (FIC) [ACK92, AL94, KACM96, CAL03] method is based on the respect of a flux weak continuity relation between two grids that are non-concordant. A conservative adjustment between the nested subgrids is then ensured.

In the sequel, we use the same notations than those introduced in Section III.3.1. Moreover the subscript l refers to the level of refinement under consideration. For $0 \leq l < l^*$, we denote by \mathcal{A}_l the union of control volumes at the level l that are included in the refinement area. The restriction

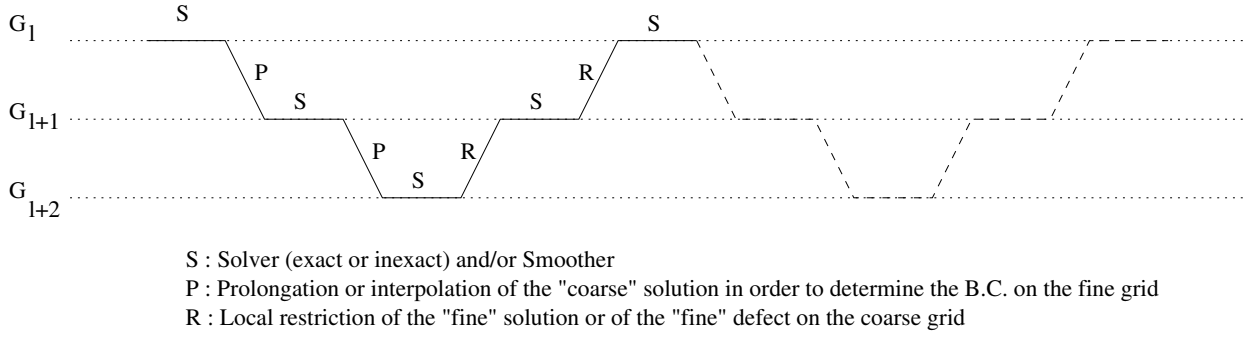


Figure III.3: Multigrid process

operator R_l^{l+1} is a flux restriction operator which takes part into the evaluation of a flux residual on each side of the control volume $K_l \subset \mathcal{A}_l$.

Let us consider the resolution of the following problem:

$$(\mathcal{P}) \begin{cases} Lu = f & \text{in } \Omega \\ B.C. & \text{on } \Gamma = \partial\Omega \end{cases}$$

At each iteration k of the FIC algorithm, the following discrete problem is solved on the subdomain Ω_l associated to the grid G_l :

$$(\mathcal{P}_l^k) \begin{cases} L_l^k u_l^k = f_l^k & \text{in } \Omega_l \\ B.C. & \text{on } \Gamma_l = \partial\Omega_l \end{cases}$$

Let us assume that the operator L can be divided into a conservative part (with a divergence term) involving the flux $\mathcal{F}(u)$ and a non-conservative part $\mathcal{G}(u)$:

$$Lu = \text{div}(\mathcal{F}(u)) + \mathcal{G}(u) = f$$

For each $K_l \subset \mathcal{A}_l$ on a coarse level l , $0 \leq l < l^*$, a local flux correction residual $r_l(\mathcal{F})$ is defined by

$$r_l(\mathcal{F})(K_l) = \frac{1}{\text{meas}(K_l)} \left\{ R_l^{l+1}(\mathcal{F}(u))(K_l) - \sum_{\sigma_l \subset \partial K_l} \int_{\sigma_l} \mathcal{F}_l(u) \cdot \mathbf{n}_{K_l, \sigma_l} \right\} \quad (\text{III.29})$$

where R_l^{l+1} is the flux restriction operator

$$R_l^{l+1}(\mathcal{F}(u))(K_l) = \sum_{\{\sigma_{l+1} \subset \partial K_l; K_{l+1} \subset K_l\}} \int_{\sigma_{l+1}} \mathcal{F}_{l+1}(u) \cdot \mathbf{n}_{K_{l+1}, \sigma_{l+1}} \quad (\text{III.30})$$

At each iteration k , a correction term is added to the right-hand side of the equation of the problem (\mathcal{P}_l^k) :

$$\begin{cases} f_l^0 & = f|_{\Omega_l} \\ f_l^k & = f_l^{k-1} + \sum_{K_l \subset \mathcal{A}_l} \chi_{K_l} r_l^k(\mathcal{F})(K_l) \end{cases} \quad (\text{III.31})$$

where $r_l^k(\mathcal{F})(K_l)$ is the flux residual (see Eq. (III.29)) evaluated at the iteration k for $u = u^k$ and χ is the characteristic function.

III.4.3 A FIC-like solver for the E.B.C. method

The FIC method is well adapted to a conservative discretization of the equations on multilevel nested meshes. As the FV scheme introduced in Section III.3 is locally conservative, a FIC solver can be used with the present E.B.C. method.

III.4.3.a Rectangular local patches

At each level l , a set of local nested subgrids G_l with the same grid step h_l are obtained from the following process:

- The original coarse grid G_0 corresponds to the mesh \mathcal{T}_h of the whole domain Ω . The mesh size $h = h_0$.
- At each level l , $0 \leq l \leq l^*$, the approximate interface Σ_{h_l} , the approximate original domain $\tilde{\Omega}_{h_l}$, the approximate external domain Ω_{e,h_l} as well as $\omega_{h_l,\Sigma}$ are detected (see Fig. III.4(a)).
- For $0 \leq l < l^*$, each control volume $K_l \subset \omega_{h_l,\Sigma}$ or such that $\mathcal{E}_{K_l} \cap (\mathcal{E}_\Sigma)_l \neq \emptyset$ generates a subgrid or patch at the level $l+1$ with the grid step $h_{l+1} < h_l$. The domain of this refinement patch is composed of the “parent” cell K_l enlarged of h_{l+1} on all sides (see Fig. III.4(b)). By this way, the interpolated B.C. on each subgrid G_{l+1} are not directly imposed on the sides of the parent cell. Naturally, if one of the sides of K_l lies on the boundary $\partial\Omega$, there is no enlargement in this direction. In the sequel, we will denote by G_l^{int} the set of control volumes $K_l \in G_l$ which are not in the enlargement zone of G_l . Then, let $\mathcal{A}_l = \{\cup K_l; K_l \in G_l^{int}, K_l \subset \omega_{h_l,\Sigma} \text{ or } \mathcal{E}_{K_l} \cap (\mathcal{E}_\Sigma)_l \neq \emptyset\}$ be the refinement area on each level l , $0 \leq l < l^*$. As a fact, a control volume lying in the enlargement zone of G_l does not generate a refinement patch nested in G_l , but may induce a refinement patch connected to a neighbor patch of G_l .

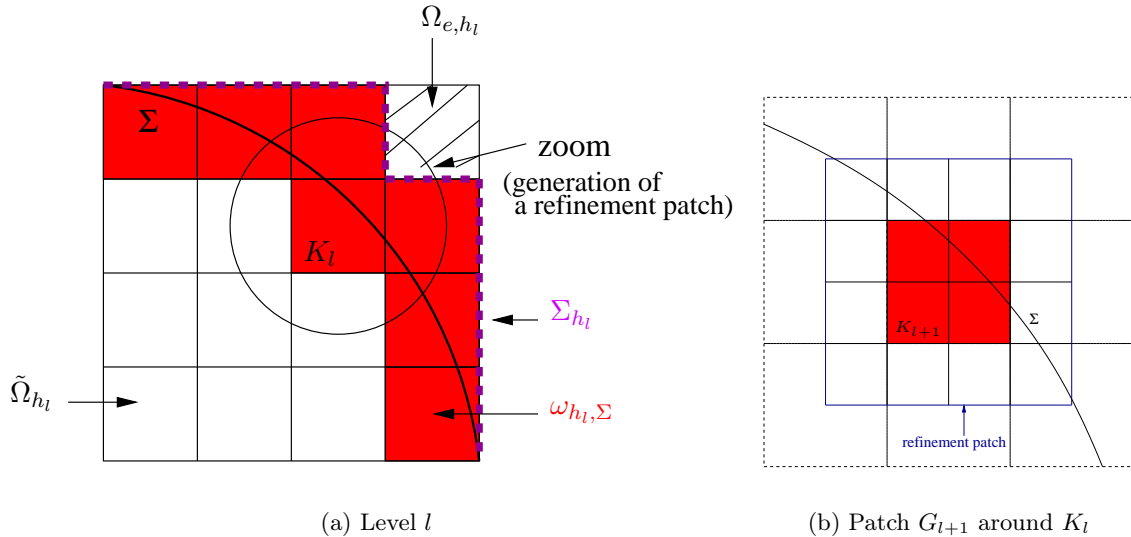


Figure III.4: Generation of the refinement patches

Since all the nested subgrids are simply shaped (rectangular in 2-D), the E.B.C. solver (see Section III.2) can be easily implemented on each patch in a recursive way.

III.4.3.b A FIC-like solver

For sake of clarity, we suppose now that $h_{l+1} = \frac{h_l}{2}$ in each direction. Hence, each patch G_l has 4^d cells at most, *i.e.* 16 cells in 2-D and 64 cells in 3-D.

The prolongation operator P_l^{l-1}

The boundary conditions on $\Gamma_l = \partial\Omega_l$ are divided into two subsets:

- On $\Gamma_l \cap \Gamma$, the B.C. of the original problem are imposed,
- On $\Gamma_l \setminus (\Gamma_l \cap \Gamma)$, Dirichlet B.C. are imposed by a prolongation operator P_l^{l-1} .

The E.B.C. method introduced here allows jumps of flux and solution. The prolongation operator P_l^{l-1} is then an interpolation operator which takes account of the solution jumps. As the FV scheme (see Section III.3) enables $u_{K_{l-1},\sigma_{l-1}}$ to be evaluated (see Eq. (III.19)), a linear interpolation is implemented from the values $(u_{K_{l-1}}, u_{K_{l-1},\sigma_{l-1}})_{K_{l-1} \in G_{l-1}}$.

We use the following linear interpolation formula

$$f(a) = \frac{f(a - \delta) + f(a + \delta)}{2}$$

along the segment $[a - \delta, a + \delta]$.

In our case, $f(a)$ represents u_{K_l,σ_l} . The interpolation nodes $\{a - \delta, a + \delta\}$ depend on the dimension d of the problem. For 2-D problems, $f(a - \delta)$ and $f(a + \delta)$ represent either $u_{K_{l-1}}$ or $u_{K_{l-1},\sigma_{l-1}}$, while for 3-D problems $f(a - \delta)$ and $f(a + \delta)$ are both side values $u_{K_{l-1},\sigma_{l-1}}$ (with different $\sigma_{l-1} \in \mathcal{E}_{K_{l-1}}$), see Fig. III.5 and Fig. III.6.

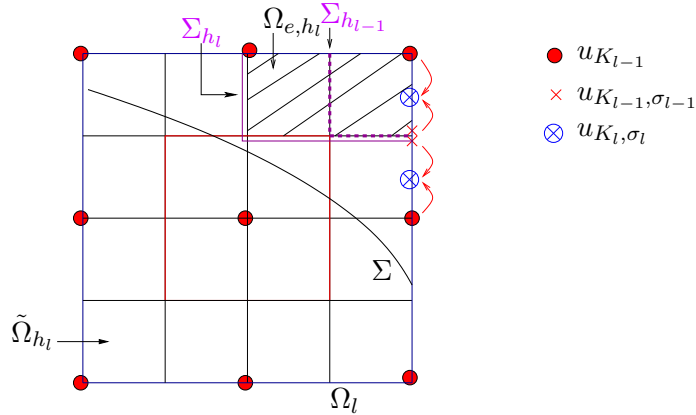


Figure III.5: 2-D case : Nodes of interpolation for the prolongation operator P_l^{l-1} .

REMARK: if $h_{l+1} \neq \frac{h_l}{2}$, the linear interpolation formula becomes a bilinear interpolation formula where the interpolation nodes are four of the values $u_{K_{l-1},\sigma_{l-1}}$ of the cell K_{l-1} .

The restriction operator R_l^{l+1}

The restriction operator R_l^{l+1} is based on the FIC restriction operator (see Eq. (III.30)). Then, $r_l(\mathcal{F})$ will take into account the flux residual between the level l and the level $l + 1$. With the E.B.C. method, since the approximate interface Σ_{h_l} is defined on each level l , a control volume

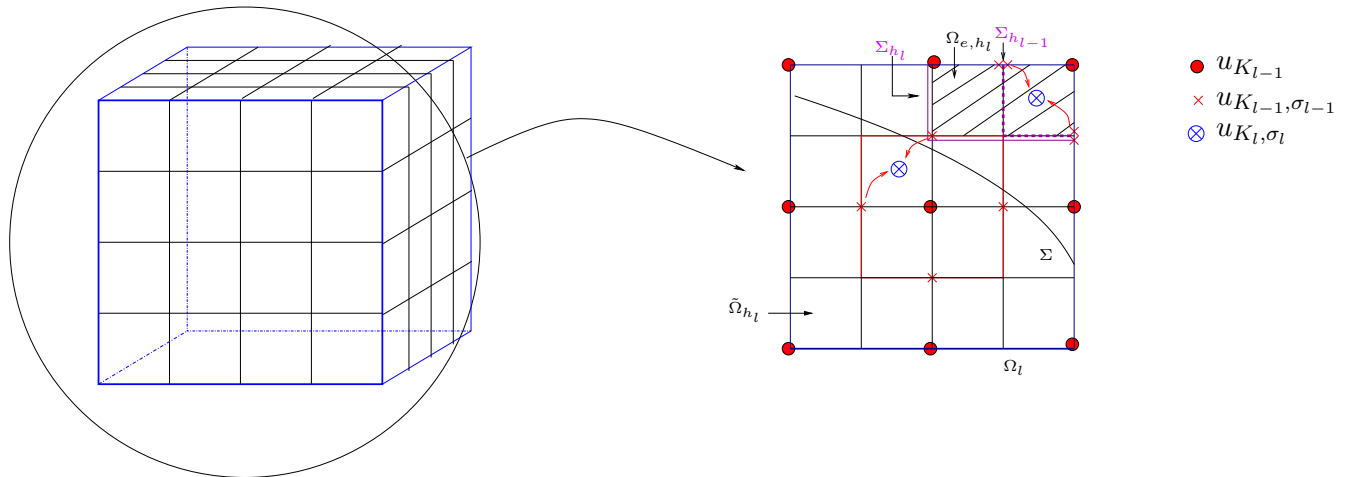


Figure III.6: 3-D case : Nodes of interpolation for the prolongation operator P_l^{l-1} .

$K_l \subset \tilde{\Omega}_{h_l}$ in the approximate original domain can contain control volumes $K_{l+1} \subset \Omega_{e,h_{l+1}}$ in the approximated external domain (see Fig. III.7). As the approximate original domain $\tilde{\Omega}_h$ and the external one $\Omega_{e,h}$ are uncoupled, the flux residual has to be evaluated on sides of control volumes in the approximate original domain only.

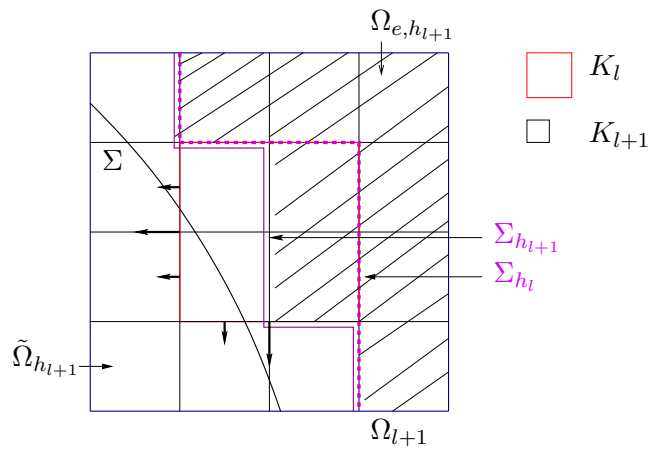


Figure III.7: Interior control volume K_l with exterior control volumes K_{l+1}

Moreover, on the sides $\sigma_l \in (\mathcal{E}_\Sigma)_l$, the immersed boundary conditions are imposed. These sides are then boundary sides of the approximate original domain $\tilde{\Omega}_{h_l}$. So, the flux correction residual $r_l(\mathcal{F})$ is obtained by the difference between the fluxes $\mathcal{F}_l(u)$ and $\mathcal{F}_{l+1}(u)$ on strictly interior sides of the approximate original domains only. Hence, at level l , the interior flux will be corrected on the approximate original domain. If we denote by $(\mathcal{E}_{ref})_l = \{\sigma_l \in \mathcal{E}_l; \sigma_l \in (\mathcal{E}_{int})_l \setminus (\mathcal{E}_\Sigma)_l; \sigma_l \subset \tilde{\Omega}_{h_l}\}$ the set of sides at the level l which are strictly interior to the approximate original domain $\tilde{\Omega}_{h_l}$,

then $\forall K_l \subset \mathcal{A}_l$,

$$r_l(\mathcal{F})(K_l) = \frac{1}{\text{meas}(\tilde{K}_l)} \left\{ R_l^{l+1}(\mathcal{F}(u))(K_l) - \sum_{\substack{\{\sigma_l \subset \partial K_l; \\ \sigma_l \in (\mathcal{E}_{ref})_l\}}} \int_{\sigma_l} \mathcal{F}_l(u) \cdot \mathbf{n}_{K_l, \sigma_l} \right\} \quad (\text{III.32})$$

with the restriction operator R_l^{l+1} defined by

$$R_l^{l+1}(\mathcal{F}(u))(K_l) = \sum_{\substack{\{\sigma_{l+1} \subset \partial K_l; K_{l+1} \subset K_l \\ \sigma_{l+1} \in (\mathcal{E}_{ref})_{l+1} \\ \sigma_{l+1} \subset \sigma_l \in (\mathcal{E}_{ref})_l\}}} \int_{\sigma_{l+1}} \mathcal{F}_{l+1}(u) \cdot \mathbf{n}_{K_{l+1}, \sigma_{l+1}} \quad (\text{III.33})$$

Domain decomposition method (DDM)

Due to the patches enlargement (see Section III.4.3.a), there is an overlapping between some patches of the same level. Hence, on each level $0 < l \leq l^*$ (at descent and ascent phases of the V-cycles), we perform a small number of domain decomposition iterations (typically 3) via a standard multiplicative Schwarz procedure (see e.g. [Tal94]) acting as a smoother. Moreover, at the ascent phase, in order to obtain the same solution on a control volume belonging to different patches, the same equation has to be solved on this control volume. The right-hand side corresponding to a restricted control volume $K_l \subset \mathcal{A}_l$, $K_l \in G_l^{int}$, is then imposed as right-hand side of all the equations solved on this control volume.

For some kind of approximations of the immersed interface (see for example the “cut” interface of the Section III.5), control volumes $K_l \subset \mathcal{A}_l$ belonging to the approximate external domain Ω_{e, h_l} at the level l , may contain control volumes K_{l+1} included in the approximate original domain $\tilde{\Omega}_{h_{l+1}}$ at the level $l+1$. In this case, at the level $l+1$, the DDM smoothing iterations (Schwarz iterations and right-hand side correction) are really necessary to have a better approximation of the flux $\mathcal{F}_{l+1}(u)$ on the neighbors patches and then to obtain a good evaluation of the restriction operator R_l^{l+1} .

The FIC-EBC algorithm

The multilevel FIC-EBC algorithm writes for V-cycles:

Initialization: Computation of u_0^0 , the solution to the original problem (\mathcal{P}_0^0) on the grid G_0 .

Iterations: Computation of u_l^k .

for $k = 1$ to $nbVcycles$ **do**

$$u_0^k = u_0^{k-1}.$$

Resolution on the fine grids G_l :

for $l = 1$ to l^* **do**

(i) Compute B.C. on $\Gamma_l \setminus (\Gamma_l \cap \Gamma)$ by interpolation of u_{l-1}^k :

$$u_l^k = P_l^{l-1} u_{l-1}^k \text{ on } \Gamma_l \setminus (\Gamma_l \cap \Gamma)$$

where P_l^{l-1} is the prolongation operator.

(ii) Computation of u_l^k by solving (\mathcal{P}_l^k) with $f_l^k = f_l^{k-1}$.

(iii) DDM iterations (Schwarz iterations).

endfor

Correction on the coarse grids G_l :
for $l = l^* - 1$ to 0 do

- (i) Evaluation of the flux residual $r_l^k(\mathcal{F})$ defined for $\forall K_l \subset \mathcal{A}_l$ by

$$r_l^k(\mathcal{F})(K_l) = \frac{1}{\text{meas}(K_l)} \left\{ R_l^{l+1}(\mathcal{F}(u^k))(K_l) - \sum_{\substack{\{\sigma_l \subset \partial K_l; \\ \sigma_l \in (\mathcal{E}_{ref})_l\}}} \int_{\sigma_l} \mathcal{F}_l(u^k) \cdot \mathbf{n}_{K_l, \sigma_l} \right\}$$

where R_l^{l+1} is the restriction operator.

- (ii) Computation of the corrected solution u_l^k : resolution of the problem

$$(\mathcal{P}_l^k) \text{ with } \begin{cases} f_l^0 &= f|_{\Omega_l} \\ f_l^k &= f_l^{k-1} + \sum_{K_l \subset \mathcal{A}_l} \chi_{K_l} r_l^k(\mathcal{F})(K_l) \end{cases} .$$

- (iii) DDM iterations (Schwarz iterations and correction of the right-hand side in the enlargement zone)

endfor
endfor

In the discrete case, with the notations of Section III.3.1, the flux integrals are approximated by the following quadrature formula, which is in agreement with the FV discretization

$$\forall l, 0 \leq l \leq l^*, \quad \int_{\sigma_l} \mathcal{F}_l^k(u) \cdot \mathbf{n}_{K_l, \sigma_l} = m(\sigma_l) \left(\mathcal{F}_l^k(u) \cdot \mathbf{n}_{K_l, \sigma_l} \right) (x_{\sigma_l}) \quad (\text{III.34})$$

The stopping criterium for the V-cycles is chosen as $\frac{\|u_0^{k+1} - u_0^k\|}{\|u_0^k\|} \leq 10^{-4}$ in the following numerical results. The steepest refinement level tested here is $l^* = 3$ (*i.e.* 4 levels including the initial coarse level). This leads to a convergence of the algorithm within about 10 V-cycles.

III.5 Numerical results

In what follows, we focus on 2-D problems, even though the simulation of 3-D problems is straightforward.

III.5.1 Solvers

In the computations, if we consider an isotropic diffusion tensor $\mathbf{a} = a(x)\mathbf{Id}$, the discretization of a diffusion problem leads to a symmetric positive definite linear system. A conjugate gradient iterative algorithm [HS52] is used to solve the linear system. However, for a convection-diffusion problem discretized with an upstream scheme for the convective flux, the linear system is no more symmetric. A Bi-GCSTAB [Van92] algorithm is then implemented. For all the resulting linear systems, a diagonal preconditioner is used to improve the ill-conditioning due to the penalization coefficients. Looking for a better preconditioning will be an interesting study for further works. However, the choice of a better preconditioner is not so crucial since the multilevel solver involves for the local patches the resolution of linear systems with a small number of unknowns.

The stopping criterium of the Krylov gradient methods is $\|r_k\| \leq 10^{-9}$, where r_k is the residual

vector at the k^{th} iteration of the algorithm. Hence, the diagonal preconditioned gradient methods converge within about 10 iterations on the local patches.

III.5.2 Discrete norms

The errors between the numerical and analytic solutions to the following test problems can be appreciate by the calculation of either the discrete L^2 -norm or the L^∞ -norm (max norm) in $\tilde{\Omega}_h$. For the approximate solution u_h , the discrete L^2 -norm in the approximate original domain $\tilde{\Omega}_h$ is defined by

$$\|u_h\|_{L^2(\tilde{\Omega}_h)} = \left(\sum_{K \subset \tilde{\Omega}_h} \text{meas}(K) |u_K|^2 \right)^{1/2}$$

and for the analytic solution \tilde{u} to the original test problems

$$\|\tilde{u}\|_{L^2(\tilde{\Omega}_h)} = \left(\sum_{K \subset \tilde{\Omega}_h} \text{meas}(K) |\tilde{u}(x_K)|^2 \right)^{1/2}.$$

Then a *relative discrete L^2 -norm* of the error is evaluated by

$$e_r(u_h) = \frac{\|\tilde{u} - u_h\|_{L^2(\tilde{\Omega}_h)}}{\|\tilde{u}\|_{L^2(\tilde{\Omega}_h)}}.$$

By definition, the discrete L^∞ -norm is:

$$\|\tilde{u} - u_h\|_{L^\infty(\tilde{\Omega}_h)} = \max_{K \subset \tilde{\Omega}_h} |\tilde{u}(x_K) - u_K|.$$

III.5.3 First test problem: a quarter disk domain

We solve a 2-D boundary value problem either for convection-diffusion or diffusion alone in a quarter of the unit disk $\tilde{\Omega}$ with symmetry conditions on the axis $\tilde{\Gamma}$ (see Fig. III.8(a)). The fictitious domain is the unit square $\Omega =]0, 1[\times]0, 1[$, see Fig. III.8(b).

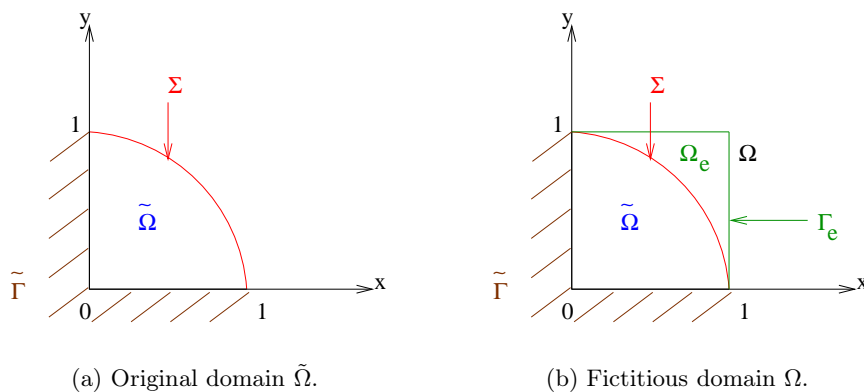


Figure III.8: Immersion of the unit disk into the unit square.

The domain Ω is meshed by uniform square cells K with a grid step varying from $h = \frac{1}{4}$ to $h = \frac{1}{512}$. This defines the exterior approximate interface Σ_h^{ext} such that $\tilde{\Omega} \subset \tilde{\Omega}_h$ and the cut approximate interface Σ_h^{cut} which may cross the physical immersed interface Σ , see Fig. III.9. The resulting approximate physical domains $\tilde{\Omega}_h$ are such that: $|\text{meas}(\tilde{\Omega}_h) - \text{meas}(\tilde{\Omega})| = \mathcal{O}(h)$, or more precisely, $\text{meas}((\tilde{\Omega} \cup \tilde{\Omega}_h) \setminus (\tilde{\Omega} \cap \tilde{\Omega}_h)) = \mathcal{O}(h)$.

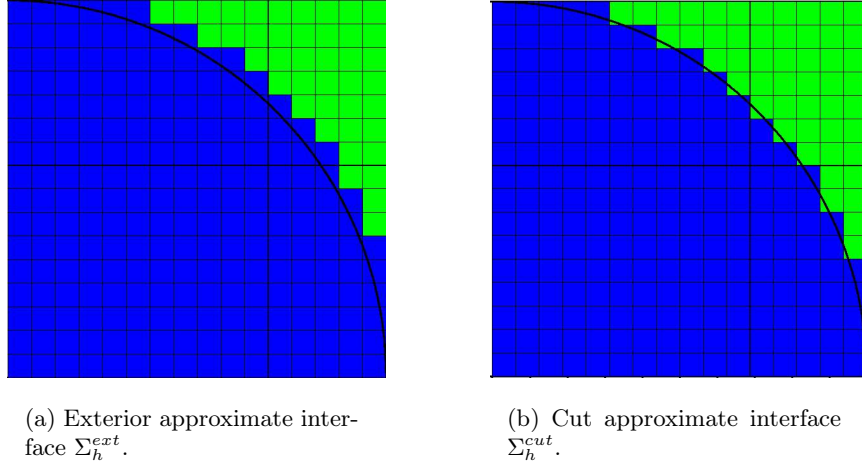


Figure III.9: Non-conforming mesh, approximate interfaces Σ_h and approximate domains $\tilde{\Omega}_h$.

III.5.3.a Diffusion problems

Dirichlet problem

We consider the Dirichlet problem

$$(\tilde{\mathcal{P}}) \quad \begin{cases} -\Delta \tilde{u} = 4 & \text{in } \tilde{\Omega} \\ \frac{\partial \tilde{u}}{\partial n} = 0 & \text{on } \tilde{\Gamma}, \\ \tilde{u} = 0 & \text{on } \Sigma (u_D = 0), \end{cases}$$

which has the analytic solution

$$\tilde{u} = 1 - r^2 \quad \text{in } \tilde{\Omega} \quad \text{where } r = \sqrt{x^2 + y^2} \text{ denotes the radius in } \tilde{\Omega}.$$

The fictitious domain problem is solved in Ω with the E.B.C. method (D1), using only the surface penalty on Σ_h without exterior control, and (D2), using both a surface penalty on Σ_h and a volume H^1 penalty in $\Omega_{e,h}$, described in the Table III.1 of Section III.2 with $u_e \equiv 0$.

In Fig. III.10, we observe that the L^2 -norm of the modelling error varies with respect to the penalization parameter η better than $\mathcal{O}(\eta^{\frac{1}{2}})$ for (D1), and $\mathcal{O}(\eta^{\frac{3}{4}})$ for (D2). These results are in agreement with the H^1 estimation of the modelling error in [Ang05]. The stagnation plateau shown in this figure corresponds to the value of the space discretization error. The following computations are performed with $\eta = 10^{-12}$ to get the modelling error negligible compared to the discretization error.

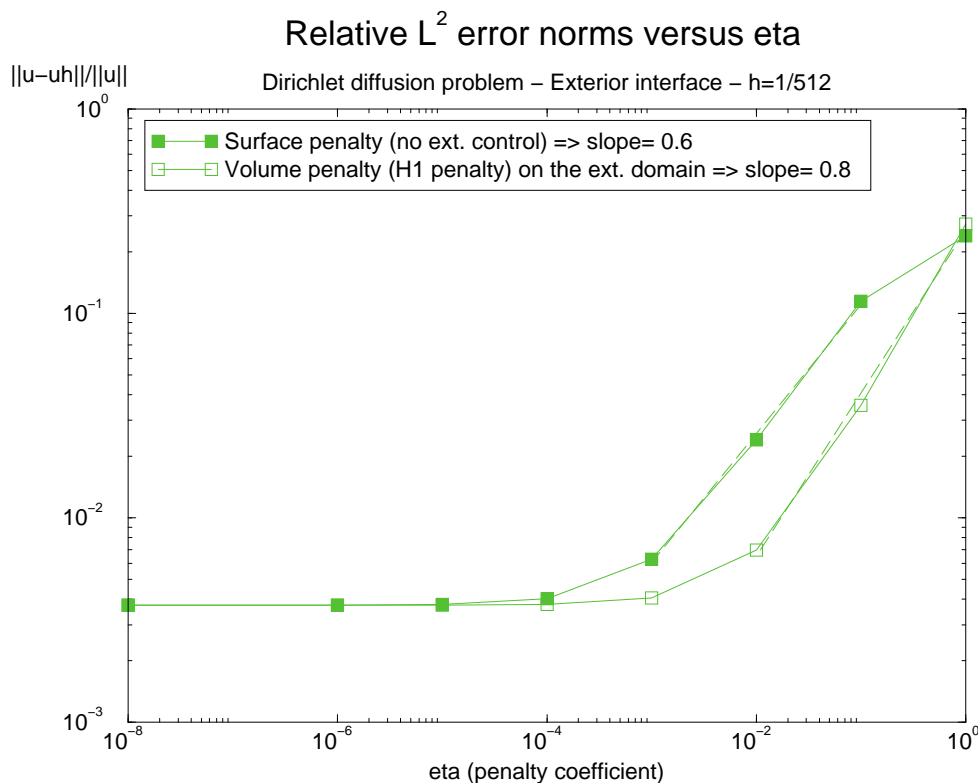


Figure III.10: Convergence for the L^2 -norm of the modelling error with η in the Dirichlet case for $(D1)$ and $(D2)$ E.B.C. methods with Σ_h^{ext} and $h = \frac{1}{512}$.

The Fig. III.11 shows the convergence of the numerical error with respect to the discretization step h . Both E.B.C. methods $(D1)$ and $(D2)$ exhibit a first-order convergence for the L^2 -norm, as expected since $|\text{meas}(\tilde{\Omega}_h) - \text{meas}(\tilde{\Omega})| = \mathcal{O}(h)$ only. We can also observe that for a given discretization Σ_h (either exterior or cut) of the immersed interface Σ , the two variants $(D1)$ and $(D2)$ lead to the same errors. Indeed, performing a H^1 penalty method in $\Omega_{e,h}$, the solution and its gradient are penalized. So $u_\eta \simeq u_D$ on the exterior domain $\Omega_{e,h}$ until the approximated interface Σ_h . As no solution jump on Σ_h is also imposed by penalization, the $(D2)$ method leads to $u_\eta \simeq u_D$ on Σ_h as for the surface penalty method $(D1)$.

Moreover, the methods which use the cut approximate interface are more accurate since Σ_h^{cut} approximates Σ more precisely than Σ_h^{ext} .

In Fig. III.12(a), the error distribution $|\tilde{u}(x_K) - u_K| \forall K \subset \tilde{\Omega}_h$, illustrates that the main differences between the approximate solution and the analytic one are located on the grid cells crossed by the immersed interface.

Then the $(D1)$ E.B.C. method is combined with the FIC-EBC solver (see Section III.4.3), the refinement zone of which is located around the immersed interface. The two-grid algorithm converges within about 10 V-cycles. The number of V-cycles for the convergence almost does not increase with the number of refinement levels. The first conclusion to draw from Fig. III.12(b), is that the error values are reduced when the FIC-EBC solver is applied.

The L^2 error norms obtained for several levels of refinement are reported in Fig. III.13.

As shown in Fig. III.13 the combination of the E.B.C. method with the FIC-EBC solver conserves the first order accuracy for the L^2 -norm. Moreover, the error on the original coarse grid is similar to

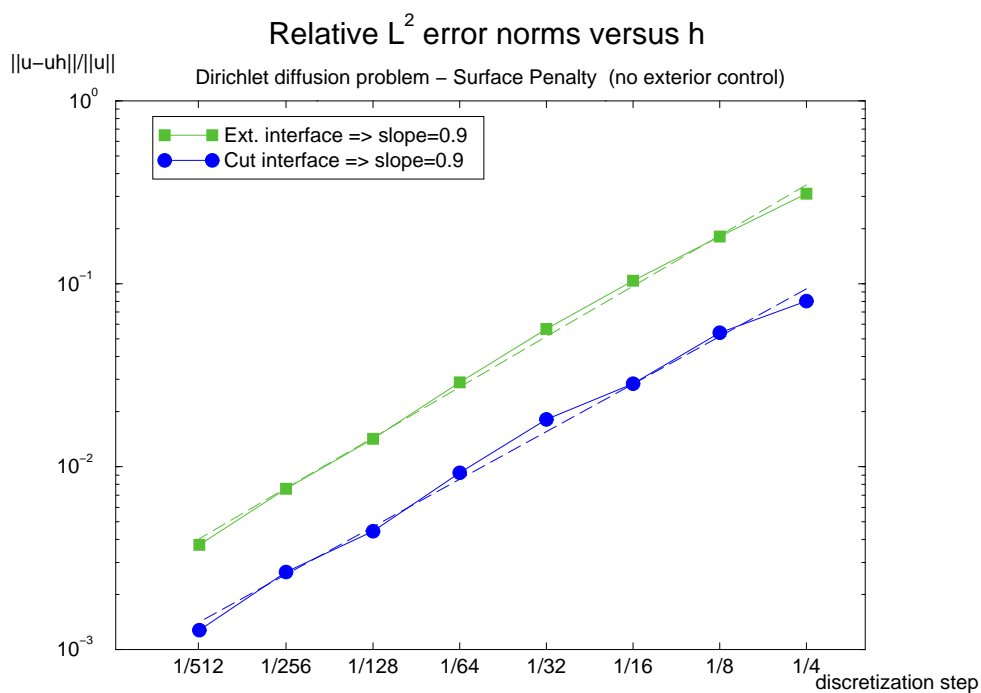
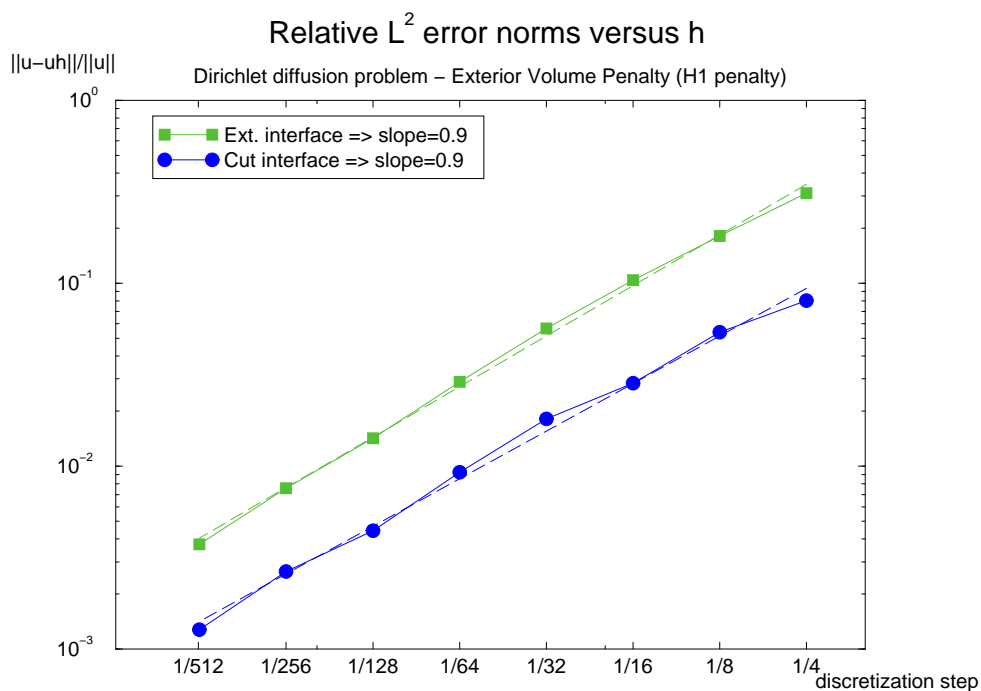
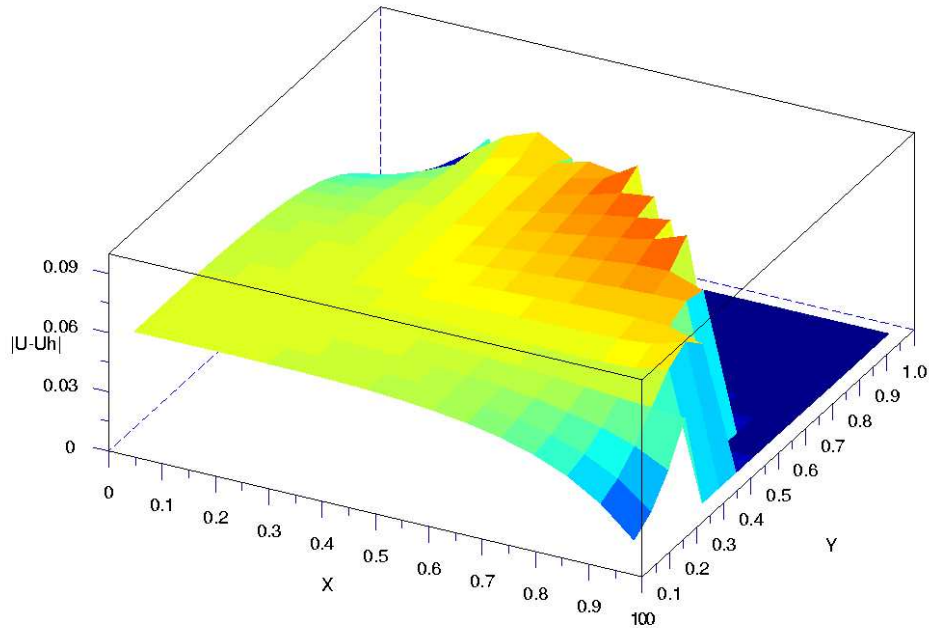
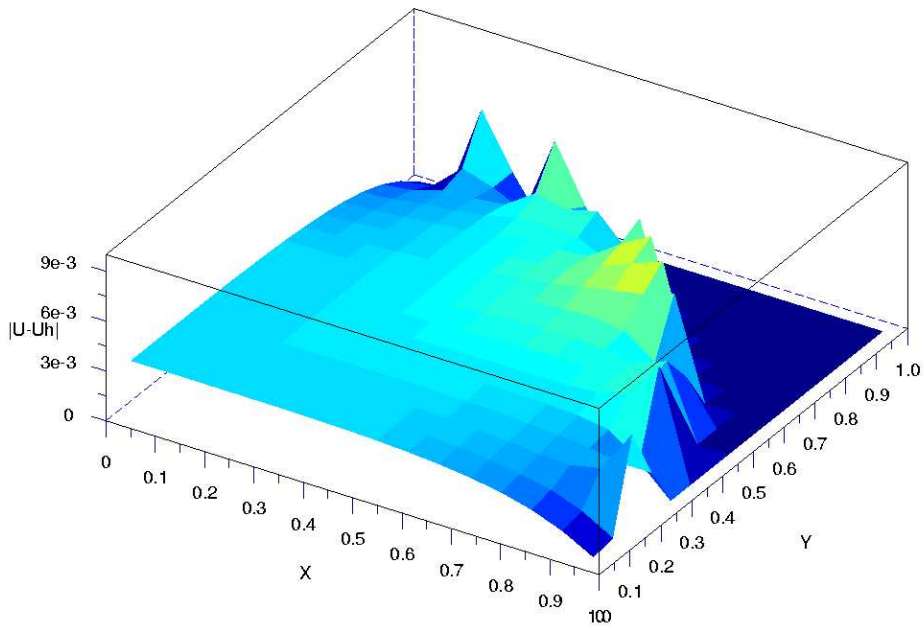
(a) ($D1$) E.B.C. method.(b) ($D2$) E.B.C. method.

Figure III.11: Convergence for the L^2 -norm of the discretization error with h for the Dirichlet diffusion problem with Σ_h^{ext} or Σ_h^{cut} and $\eta = 10^{-12}$.

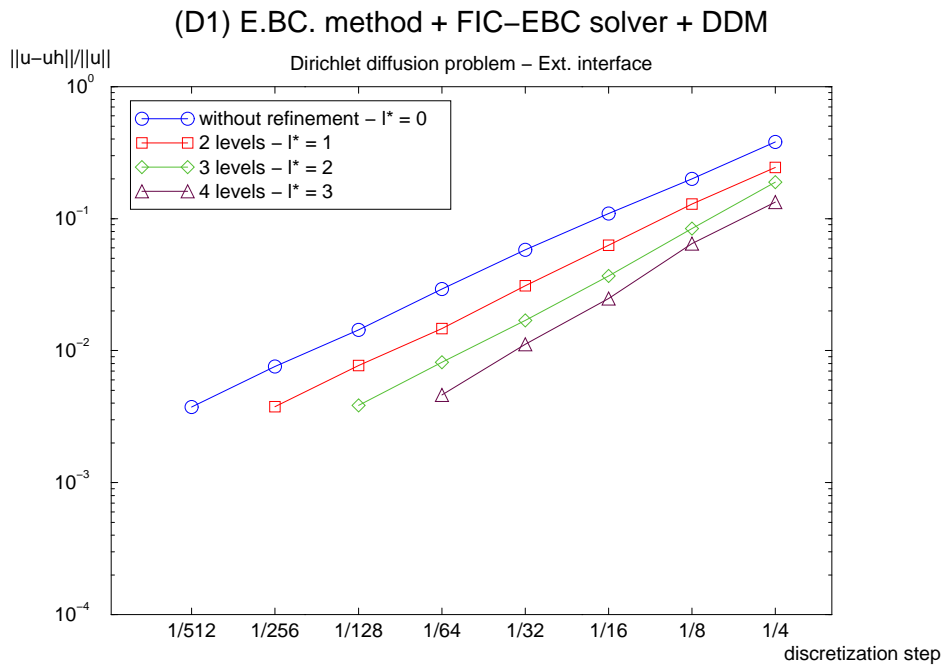


(a) Without refinement ($l^* = 0$), $\max_{K \subset \Omega_h} |\tilde{u}(x_K) - u_K| = 7.9 \cdot 10^{-2}$.

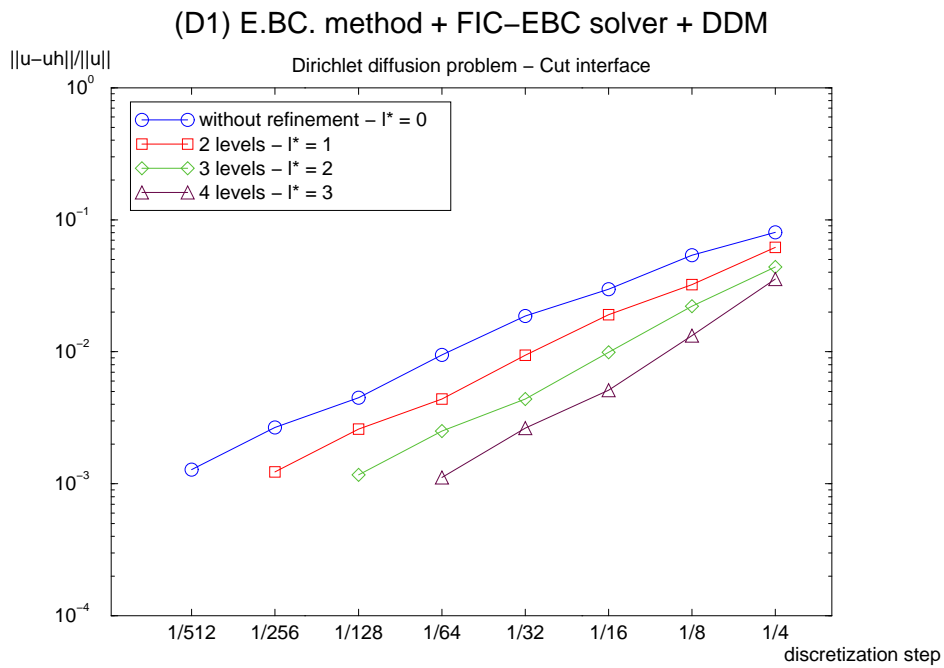


(b) With refinement: $l^* = 3$, $\max_{K \subset \Omega_h} |\tilde{u}(x_K) - u_K| = 5.8 \cdot 10^{-3}$.

Figure III.12: Error distribution with a 16×16 mesh for the (D1) E.B.C. method with Σ_h^{ext} before and after the combination with the FIC-EBC solver - Dirichlet diffusion problem.



(a) Exterior interface Σ_h^{ext} .



(b) Cut interface Σ_h^{cut} .

Figure III.13: Convergence for the L^2 -norm of the discretization error with h_0 for the combination of the (D1) E.B.C. method with the FIC-EBC solver for the Dirichlet diffusion problem.

the error obtained without refinement on a mesh with a discretization step equal to the local finest grid's discretization step. The numerical results enable us to conclude that for the L^2 -norm, the accuracy of the method varies like $\mathcal{O}(h_{l^*})$ where h_{l^*} is the mesh step of the local finest refinement grid (last level of refinement). However, since the error of the whole coarse mesh depends also on the error of the non-refined zone, the method varies like $\mathcal{O}(h_{l^*})$ for l^* less than a maximum number of refinement levels (see details in Section III.5.5).

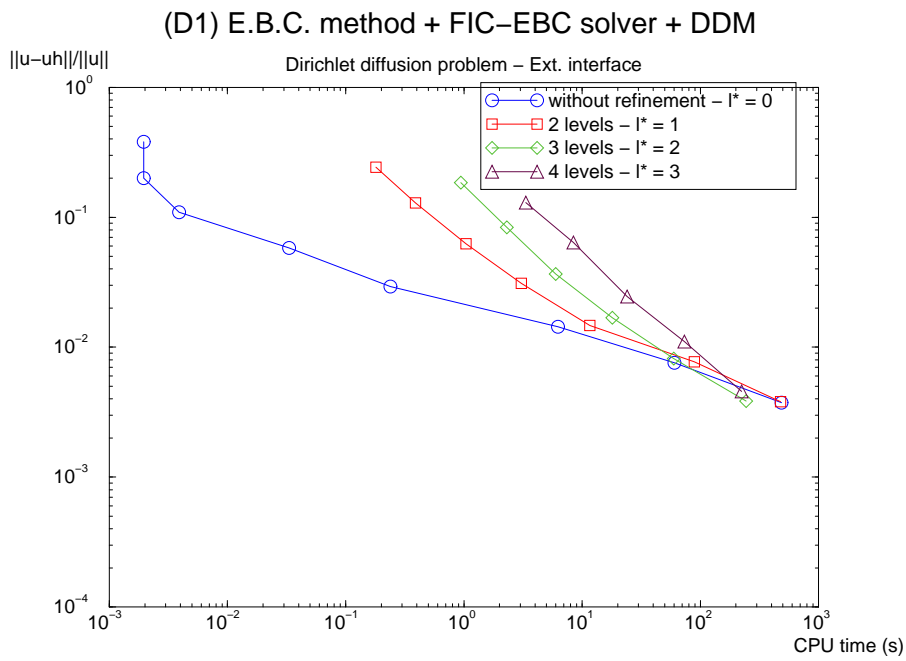
This multi-grid technique is relatively cheap since each level of refinement contains a small number of degrees of freedom. Table III.2 and Fig. III.14 show that in term of CPU (central processing unit), the combination of the (D1) E.B.C. method with the FIC-EBC solver becomes interesting from a relative error lower than $5 \cdot 10^{-2}$. For example, the CPU time is divided by 2 between the error obtained with $h_0 = \frac{1}{512}$ and $l^* = 0$ (without refinement - 1 level) and the same error obtained with $h_0 = \frac{1}{128}$ and $l^* = 2$ (3 levels). Moreover, for a given error, the memory storage required is always smaller with the FIC-EBC solver.

Exterior interface Σ_h^{ext}								
$l^* \backslash h_0$	1/4	1/8	1/16	1/32	1/64	1/128	1/256	1/512
0	$1.95 \cdot 10^{-3}$	$1.95 \cdot 10^{-3}$	$3.90 \cdot 10^{-3}$	$3.32 \cdot 10^{-2}$	$2.38 \cdot 10^{-1}$	$6.26 \cdot 10^0$	$6.02 \cdot 10^1$	$4.87 \cdot 10^2$
1	$1.79 \cdot 10^{-1}$	$3.90 \cdot 10^{-1}$	$1.03 \cdot 10^0$	$3.05 \cdot 10^0$	$1.16 \cdot 10^1$	$8.88 \cdot 10^1$	$4.78 \cdot 10^2$	
2	$9.41 \cdot 10^{-1}$	$2.31 \cdot 10^0$	$5.99 \cdot 10^0$	$1.80 \cdot 10^1$	$5.98 \cdot 10^1$	$2.44 \cdot 10^2$		
3	$3.35 \cdot 10^0$	$8.44 \cdot 10^0$	$2.41 \cdot 10^1$	$7.35 \cdot 10^1$	$2.24 \cdot 10^2$			
Cut interface Σ_h^{cut}								
$l^* \backslash h_0$	1/4	1/8	1/16	1/32	1/64	1/128	1/256	1/512
0	$1.95 \cdot 10^{-3}$	$1.95 \cdot 10^{-3}$	$5.86 \cdot 10^{-3}$	$3.12 \cdot 10^{-2}$	$2.34 \cdot 10^{-1}$	$5.76 \cdot 10^0$	$5.53 \cdot 10^1$	$4.97 \cdot 10^2$
1	$1.42 \cdot 10^{-1}$	$3.55 \cdot 10^{-1}$	$8.73 \cdot 10^{-1}$	$2.76 \cdot 10^0$	$1.01 \cdot 10^1$	$7.46 \cdot 10^1$	$4.17 \cdot 10^2$	
2	$7.90 \cdot 10^{-1}$	$1.99 \cdot 10^0$	$5.20 \cdot 10^0$	$1.52 \cdot 10^1$	$4.62 \cdot 10^1$	$1.96 \cdot 10^2$		
3	$2.86 \cdot 10^0$	$7.28 \cdot 10^0$	$1.96 \cdot 10^1$	$5.89 \cdot 10^1$	$1.84 \cdot 10^2$			

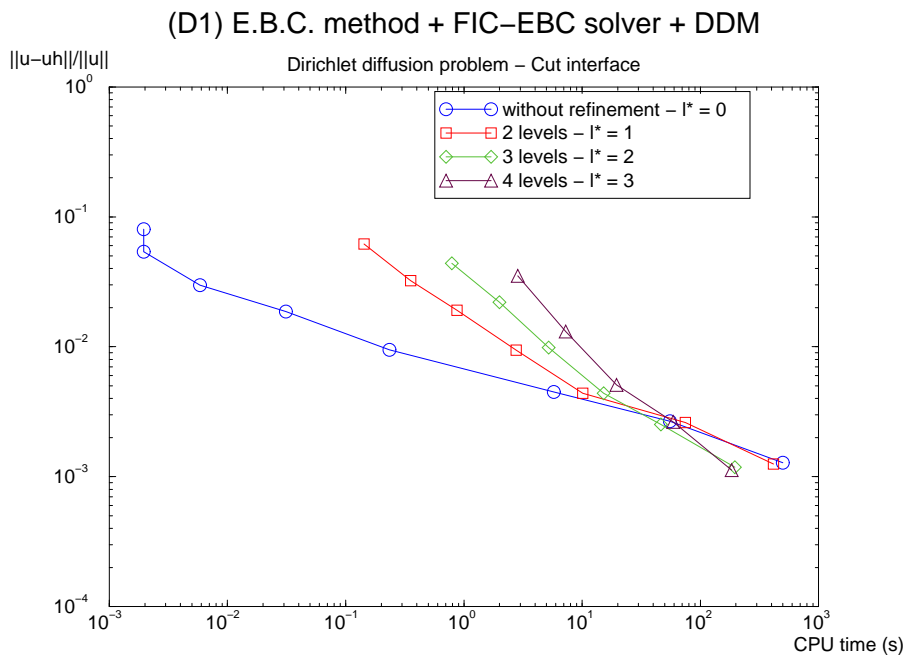
Table III.2: CPU time (in seconds) with respect to h_0 and l^* for the (D1) E.B.C. method combined with the FIC-EBC solver for the Dirichlet diffusion problem.

As we explained in Section III.4.3.b, the DDM iterations are necessary to recover the good solution with a cut interface approximation Σ_h^{cut} of Σ . On the other hand, for the exterior interface Σ_h^{ext} , at each level $l+1$, all the control volumes $K_{l+1} \in G_{l+1}^{int}$, $K_{l+1} \subset \tilde{\Omega}_{h_{l+1}}$ have their parent cell $K_l \subset \tilde{\Omega}_{h_l}$. Fig. III.15(a) shows that, even without DDM iterations, the convergence of the E.B.C. method combined with the FIC-EBC solver remains in $\mathcal{O}(h_{l^*})$ for Σ_h^{ext} . In this case the CPU time is reduced (see Table III.3 and Fig. III.15(b)). Indeed, to obtain the error of $h_0 = \frac{1}{512}$ and $l^* = 0$ using the FIC-EBC solver with $h_0 = \frac{1}{128}$ and $l^* = 2$, the CPU time is divided by a factor 9.

Since the method with the exterior interface Σ_h^{ext} does not require DDM iterations, the ratio of the precision of the solution over the CPU time is better for this method than for the method with a cut interface Σ_h^{cut} . To avoid the DDM smoothing iterations for the cut interface approach, some patches (of the same level of refinement) have to be gathered.

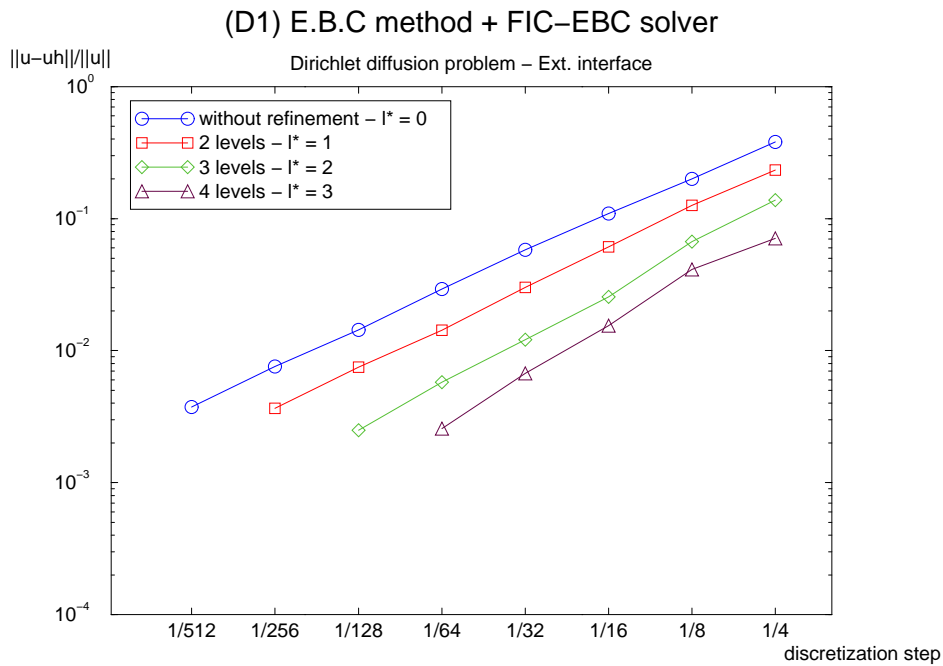
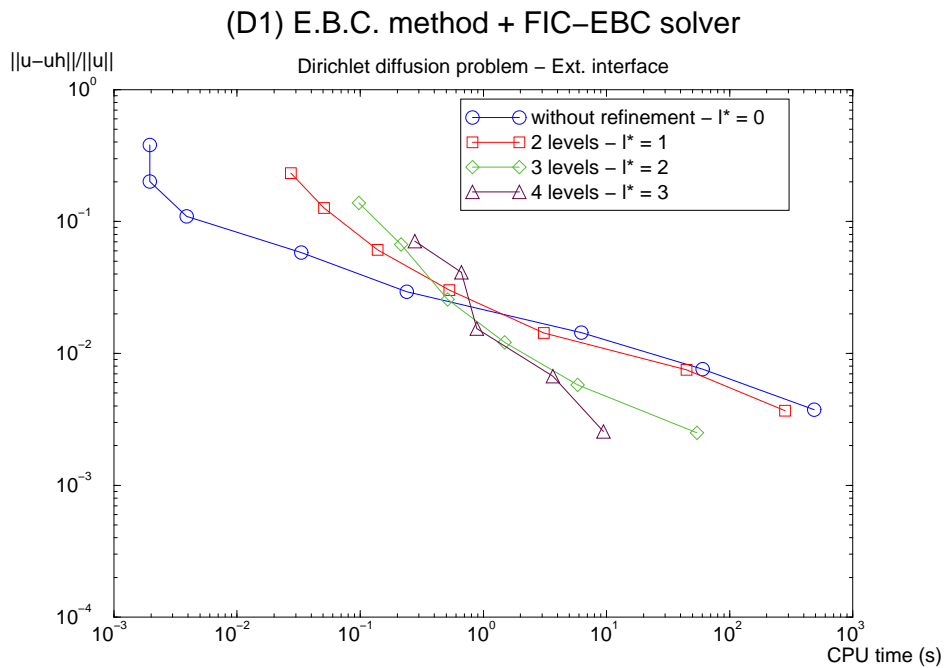


(a) Exterior interface Σ_h^{ext} .



(b) Cut interface Σ_h^{cut} .

Figure III.14: Convergence for the L^2 -norm of the discretization error with the CPU time for the combination of the (D1) E.B.C. method with the FIC-EBC solver for the Dirichlet diffusion problem.

(a) Error versus h_0 .

(b) Error versus CPU time.

Figure III.15: Convergence for the L^2 -norm of the discretization error for the combination of the (D1) E.B.C. method with the FIC-EBC solver without DDM iterations for the Dirichlet diffusion problem with Σ_h^{ext} .

Exterior interface Σ_h^{ext} (FIC-EBC solver without DDM)								
l^* \backslash h_0	1/4	1/8	1/16	1/32	1/64	1/128	1/256	1/512
0	$1.95 \cdot 10^{-3}$	$1.95 \cdot 10^{-3}$	$3.90 \cdot 10^{-3}$	$3.32 \cdot 10^{-2}$	$2.38 \cdot 10^{-1}$	$6.26 \cdot 10^0$	$6.02 \cdot 10^1$	$4.87 \cdot 10^2$
1	$2.73 \cdot 10^{-2}$	$5.08 \cdot 10^{-2}$	$1.39 \cdot 10^{-1}$	$5.29 \cdot 10^{-1}$	$3.09 \cdot 10^0$	$4.46 \cdot 10^1$	$2.83 \cdot 10^2$	
2	$9.77 \cdot 10^{-2}$	$2.15 \cdot 10^{-1}$	$5.12 \cdot 10^{-1}$	$1.49 \cdot 10^0$	$5.85 \cdot 10^0$	$5.43 \cdot 10^1$		
3	$2.77 \cdot 10^{-1}$	$6.62 \cdot 10^{-1}$	$8.87 \cdot 10^{-1}$	$3.68 \cdot 10^0$	$9.46 \cdot 10^0$			

Table III.3: CPU time (in seconds) with respect to h_0 and l^* for the (D1) E.B.C. method combined with the FIC-EBC solver without DDM iterations for the Dirichlet diffusion problem with Σ_h^{ext} .

Robin problem

We now consider the Robin problem

$$(\tilde{\mathcal{P}}) \quad \begin{cases} -\Delta \tilde{u} = 16r^2 & \text{in } \tilde{\Omega}, \\ \frac{\partial \tilde{u}}{\partial \tilde{n}} = 0 & \text{on } \tilde{\Gamma}, \\ -\frac{\partial \tilde{u}}{\partial n} = u + 3 & \text{on } \Sigma (\alpha_R = 1, g_R = 3), \end{cases}$$

which has the analytic solution

$$\tilde{u} = 2 - r^4 \quad \text{in } \tilde{\Omega} \quad \text{with } r = \sqrt{x^2 + y^2}.$$

The fictitious domain problem is solved in Ω with the E.B.C. method (R) without exterior control, as described in the Table III.1. We investigate in Fig. III.16(a) the effect of the global correction for the approximate interface proposed in Section III.3.3 where ϵ_h is computed by Eq. (III.28) in each finite volume crossed by Σ . An asymptotic stagnation of the error can be observed and the first-order precision is lost. For a local correction ϵ_K , if a local formula (see Eq. (III.23)) is applied without taking into account the control volumes $K \subset \omega_{h,\Sigma}$ with $\hat{\mathcal{E}}_K = \emptyset$, there is no error convergence (see Fig. III.16(b)).

When the accurate local correction ϵ_K (see Eq. (III.26)) taking account of all the local measures of $\Sigma_{l,K}$ for $K \subset \omega_{h,\Sigma}$ is computed, the first-order accuracy is then yielded for the L^2 -norm error, see Fig. III.17. Here again, the approximate interface Σ_h^{cut} gives a better precision than the approximate interface Σ_h^{ext} .

The (R) E.B.C. with the accurate local correction is then combined with the FIC-EBC solver. The results reported in Fig. III.18 show a L^2 -norm asymptotic accuracy of the method in $\mathcal{O}(h_{l^*})$, h_{l^*} being the discretization step of the local finest grid.

As we can observe in Table III.4 and Fig. III.19, the combination of the E.B.C. method with the FIC-EBC solver improves the ratio of the obtained precision over the CPU time from a relative precision of 10^{-1} . This improvement is better than for the Dirichlet case: the CPU ratio is around 15 between the error obtained with $h_0 = \frac{1}{512}$ and $l^* = 0$ and the same error obtained with $h_0 = \frac{1}{128}$ and $l^* = 2$.

As in the Dirichlet case, Fig. III.20(a) enables us to conclude that DDM iterations are not required for the exterior interface Σ_h^{ext} . The relative CPU time is more improved (see Table III.5 and Fig. III.20(b)). The CPU time ratio reaches 25 between the same error obtained either with $h_0 = \frac{1}{512}$ and $l^* = 0$ or with $h_0 = \frac{1}{128}$ and $l^* = 2$. However, even looking at the results in term of

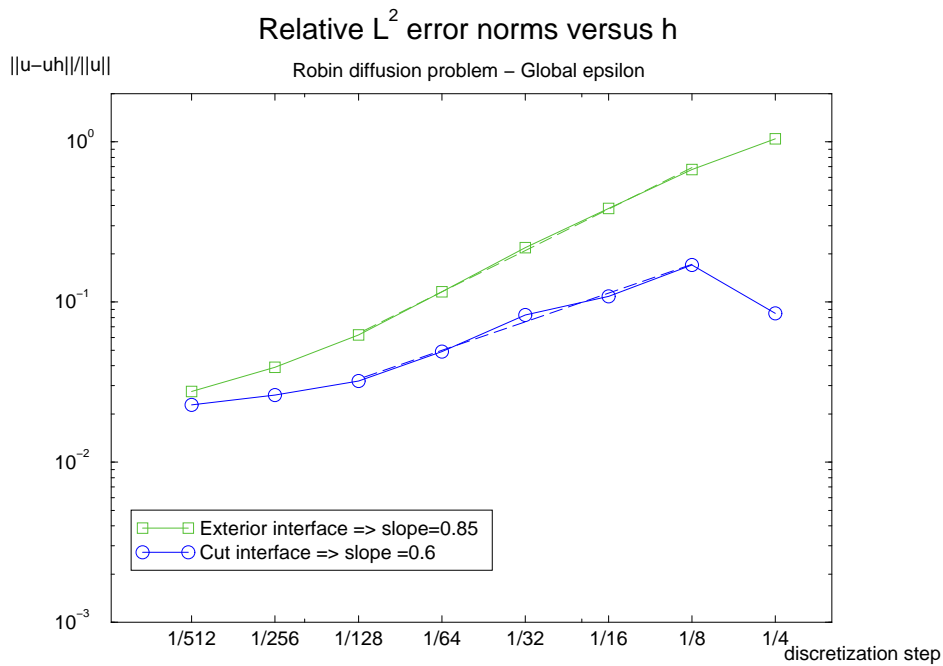
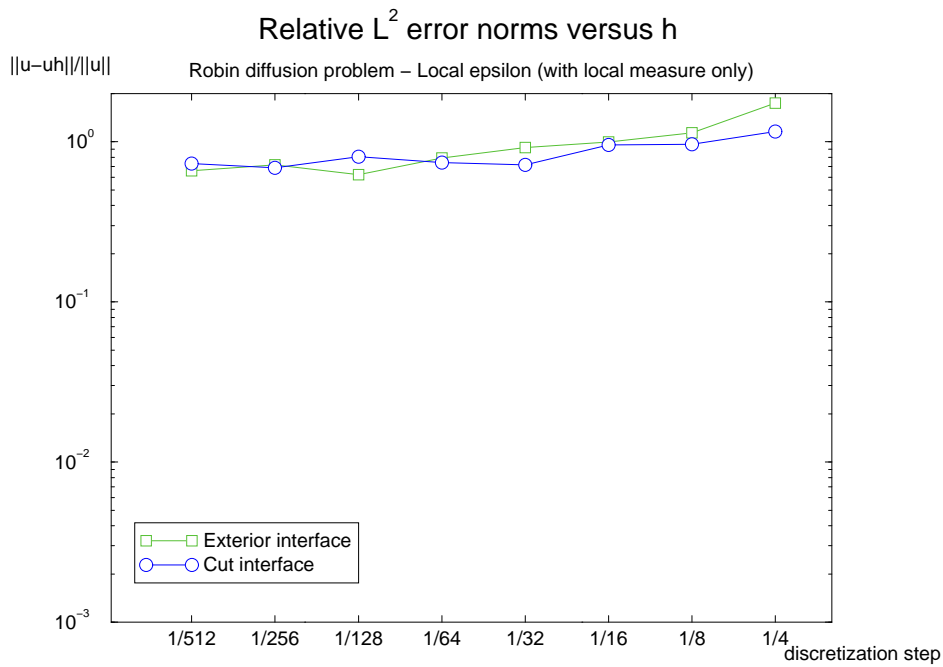
(a) Global correction with ϵ_h .(b) Local correction ϵ_K without correction of $\Sigma_{l,K}$.

Figure III.16: Convergence for the L^2 -norm of the discretization error with h of the (R) E.B.C. method for the Robin problem with Σ_h^{ext} or Σ_h^{cut} : global correction and local correction without extension of the local surface $\Sigma_{l,K}$.

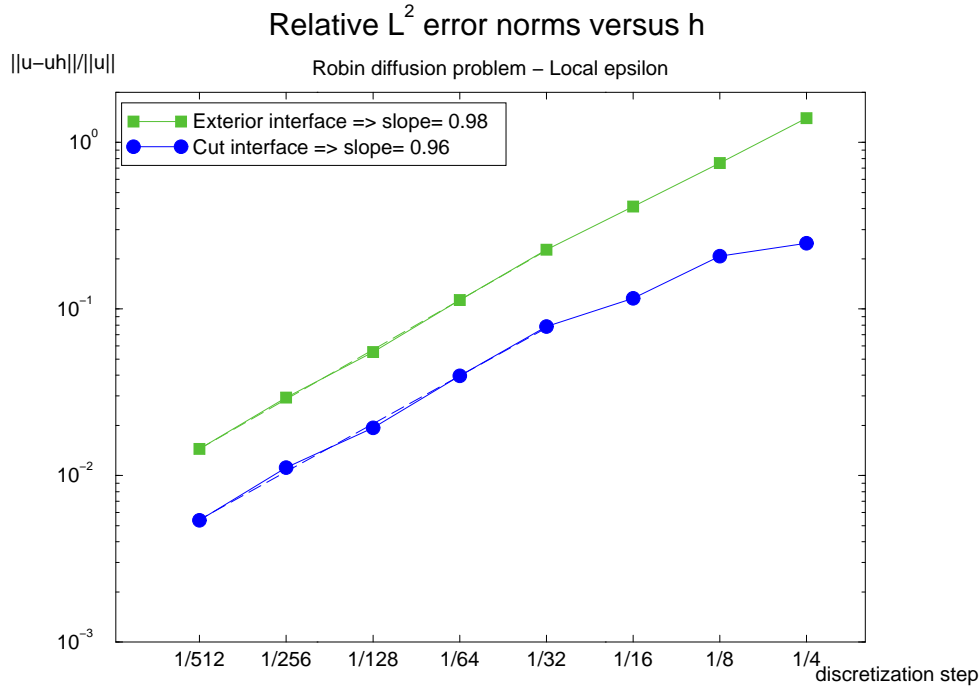


Figure III.17: Convergence for the L^2 -norm of the discretization error with h of the (R) E.B.C. method for the Robin problem with Σ_h^{ext} or Σ_h^{cut} : local correction with extension of the local surface $\Sigma_{l,K}$.

Exterior interface Σ_h^{ext}								
l^* \ h_0	1/4	1/8	1/16	1/32	1/64	1/128	1/256	1/512
0	$3.90 \cdot 10^{-3}$	$3.90 \cdot 10^{-3}$	$5.86 \cdot 10^{-3}$	$3.71 \cdot 10^{-2}$	$2.81 \cdot 10^{-1}$	$7.43 \cdot 10^0$	$8.04 \cdot 10^1$	$5.89 \cdot 10^2$
1	$4.29 \cdot 10^{-2}$	$9.77 \cdot 10^{-2}$	$2.13 \cdot 10^{-1}$	$6.76 \cdot 10^{-1}$	$2.33 \cdot 10^0$	$2.17 \cdot 10^1$	$1.77 \cdot 10^2$	
2	$2.22 \cdot 10^{-1}$	$4.92 \cdot 10^{-1}$	$9.04 \cdot 10^{-1}$	$3.44 \cdot 10^0$	$9.84 \cdot 10^0$	$5.17 \cdot 10^1$		
3	$7.66 \cdot 10^{-1}$	$1.55 \cdot 10^0$	$3.05 \cdot 10^0$	$1.19 \cdot 10^1$	$4.01 \cdot 10^1$			
Cut interface Σ_h^{cut}								
l^* \ h_0	1/4	1/8	1/16	1/32	1/64	1/128	1/256	1/512
0	$1.95 \cdot 10^{-3}$	$1.95 \cdot 10^{-3}$	$5.86 \cdot 10^{-3}$	$3.71 \cdot 10^{-2}$	$2.89 \cdot 10^{-1}$	$7.22 \cdot 10^0$	$7.72 \cdot 10^1$	$6.18 \cdot 10^2$
1	$3.90 \cdot 10^{-2}$	$9.77 \cdot 10^{-2}$	$2.07 \cdot 10^{-1}$	$6.44 \cdot 10^{-1}$	$2.17 \cdot 10^0$	$2.20 \cdot 10^1$	$1.83 \cdot 10^2$	
2	$2.13 \cdot 10^{-1}$	$4.04 \cdot 10^{-1}$	$8.77 \cdot 10^{-1}$	$2.84 \cdot 10^0$	$9.67 \cdot 10^0$	$4.08 \cdot 10^1$		
3	$6.56 \cdot 10^{-1}$	$1.50 \cdot 10^0$	$3.75 \cdot 10^0$	$9.86 \cdot 10^0$	$4.01 \cdot 10^1$			

Table III.4: CPU time (in seconds) with respect to h_0 and l^* for the (R) E.B.C. method combined with the FIC-EBC solver for the Robin diffusion problem.

CPU time, the method with the cut interface Σ_h^{cut} and DDM iterations is the most accurate in the Robin case.

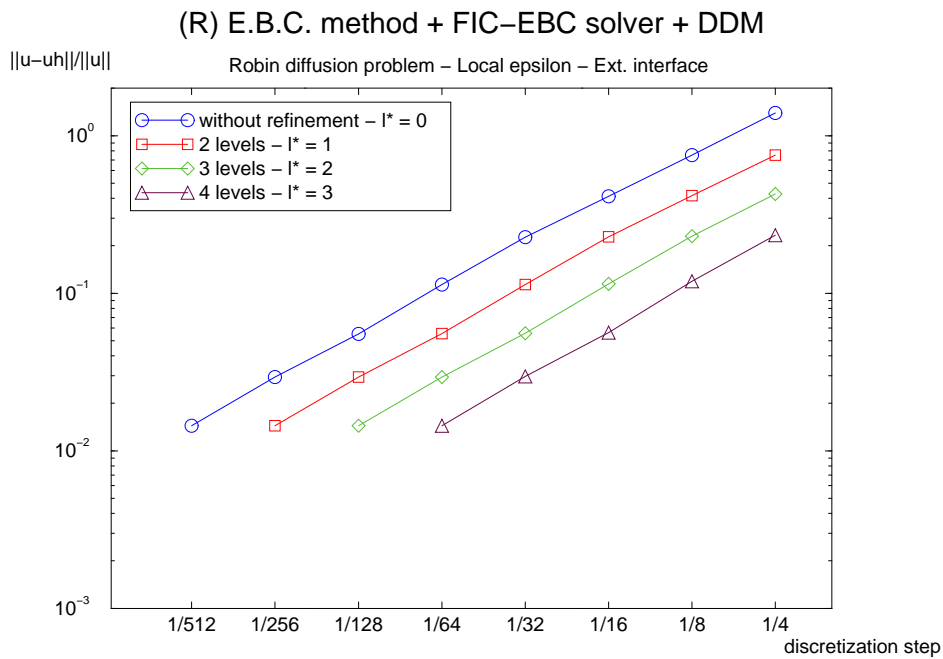
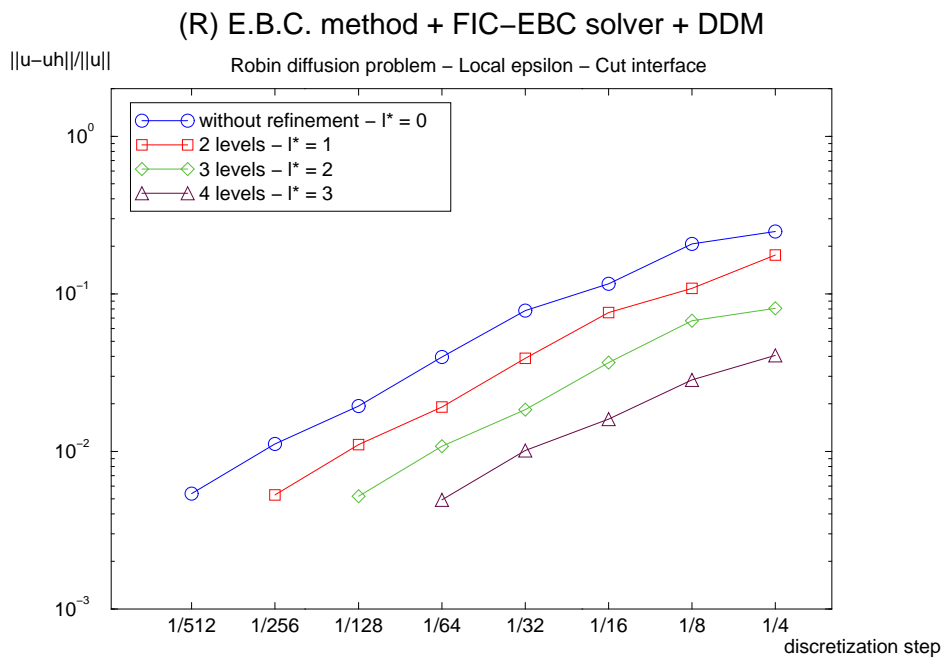
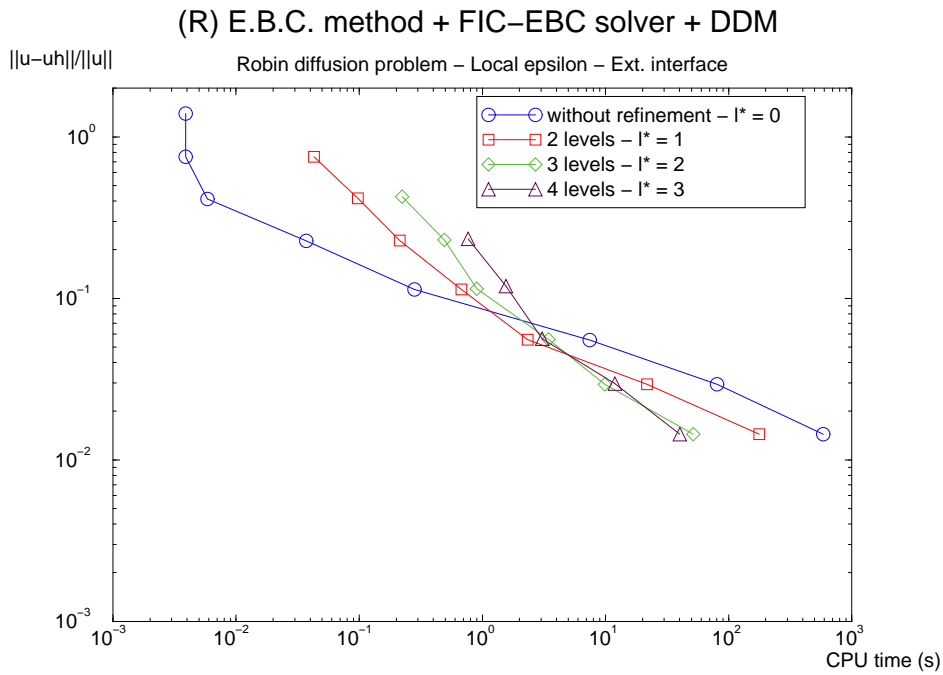
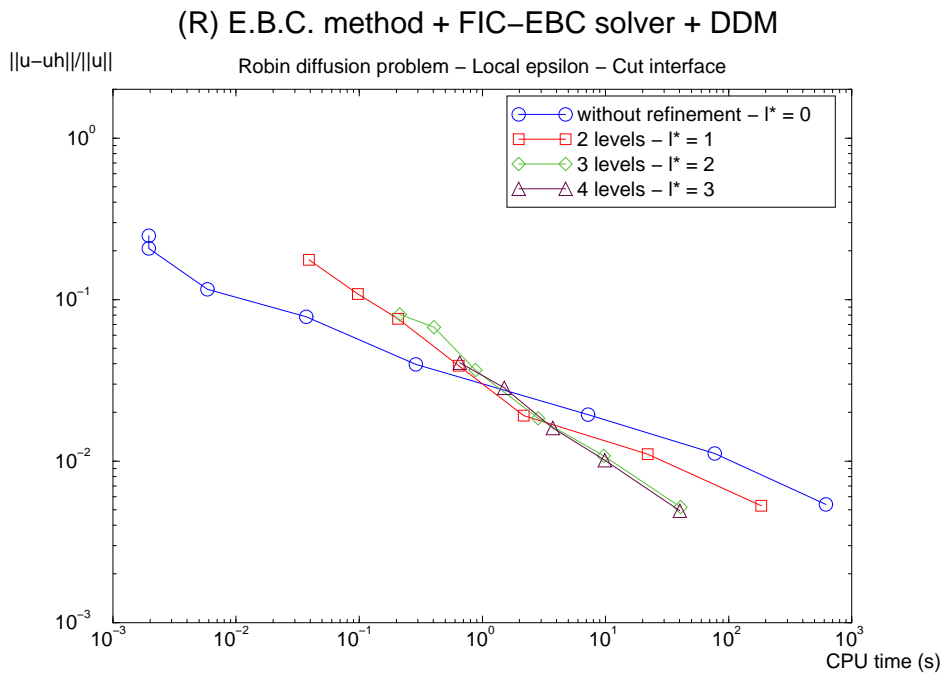
(a) Exterior interface Σ_h^{ext} .(b) Cut interface Σ_h^{cut} .

Figure III.18: Convergence for the L^2 -norm of the discretization error with h_0 for the combination of the (R) E.B.C. method with the FIC-EBC solver for the Robin diffusion problem with a local correction ϵ_K .



(a) Exterior interface Σ_h^{ext} .



(b) Cut interface Σ_h^{cut} .

Figure III.19: Convergence for the L^2 -norm of the discretization error with CPU time for the combination of the (R) E.B.C. method with the FIC-EBC solver for the Robin diffusion problem.

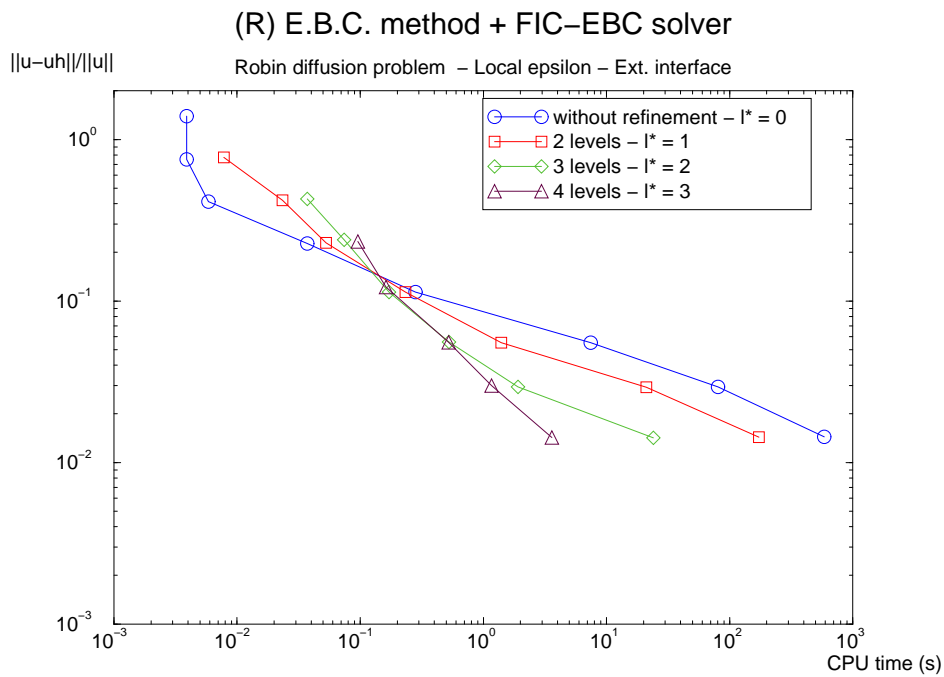
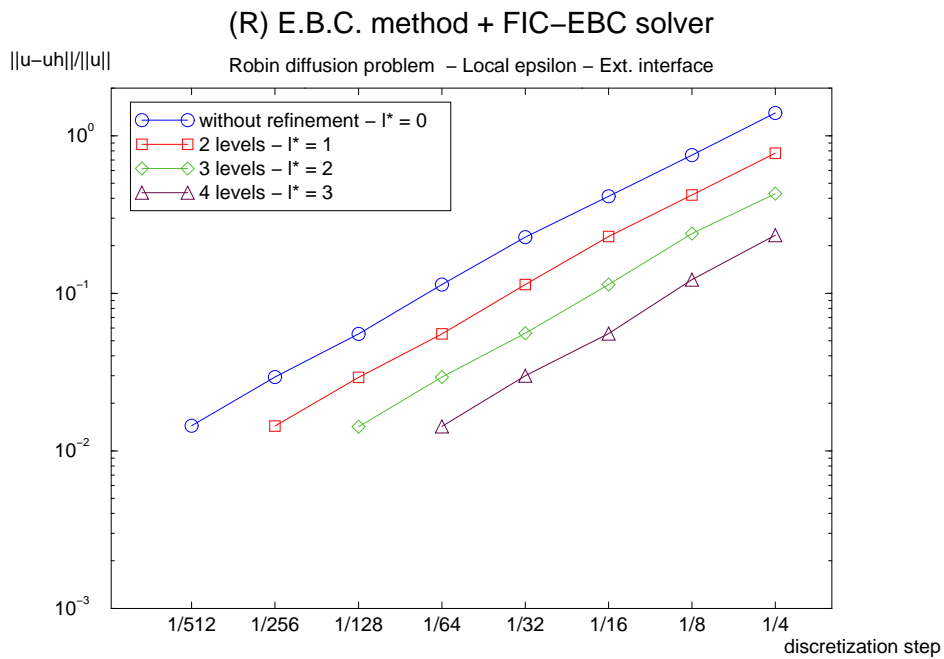


Figure III.20: Convergence for the L^2 -norm of the discretization error for the combination of the (R) E.B.C. method with the FIC-EBC solver without DDM iterations for the Robin diffusion problem with Σ_h^{ext} .

Exterior interface Σ_h^{ext} (FIC-EBC solver without DDM)								
l^* \backslash h_0	1/4	1/8	1/16	1/32	1/64	1/128	1/256	1/512
0	$3.90 \cdot 10^{-3}$	$3.90 \cdot 10^{-3}$	$5.86 \cdot 10^{-3}$	$3.71 \cdot 10^{-2}$	$2.81 \cdot 10^{-1}$	$7.43 \cdot 10^0$	$8.04 \cdot 10^1$	$5.89 \cdot 10^2$
1	$7.81 \cdot 10^{-3}$	$2.34 \cdot 10^{-2}$	$5.27 \cdot 10^{-2}$	$2.32 \cdot 10^{-1}$	$1.40 \cdot 10^0$	$2.11 \cdot 10^1$	$1.73 \cdot 10^2$	
2	$3.71 \cdot 10^{-2}$	$7.42 \cdot 10^{-2}$	$1.72 \cdot 10^{-1}$	$5.25 \cdot 10^{-1}$	$1.91 \cdot 10^0$	$2.40 \cdot 10^1$		
3	$9.57 \cdot 10^{-2}$	$1.62 \cdot 10^{-1}$	$5.21 \cdot 10^{-1}$	$1.17 \cdot 10^0$	$3.60 \cdot 10^0$			

Table III.5: CPU time (in seconds) with respect to h_0 and l^* for the (R) E.B.C. method combined with the FIC-EBC solver without DDM iterations for the Robin diffusion problem with Σ_h^{ext} .

REMARK. The convergence results for the L^∞ -norm are similar to those presented for the L^2 -norm (see the curves plotted for convection-diffusion problems in the next section):

$$\|\tilde{u} - u_h\|_{L^\infty(\tilde{\Omega}_h)} = \mathcal{O}(h_{l^*})$$

and

$$\|\tilde{u} - u_h\|_{L^\infty(\tilde{\Omega}_h)} = \mathcal{O}(h_0) \text{ when the residual stagnation error is reached.}$$

III.5.3.b Convection-diffusion problems

Dirichlet problem

The convection-diffusion Dirichlet problem is considered as follows

$$\begin{cases} -\Delta \tilde{u} + \operatorname{div}(\tilde{\mathbf{v}}\tilde{u}) = 4 & \text{in } \tilde{\Omega}, \\ \frac{\partial \tilde{u}}{\partial n} = 0 & \text{on } \tilde{\Gamma}, \\ \tilde{u} = u_D = 0 & \text{on } \Sigma, \end{cases}$$

with $\tilde{\mathbf{v}} = \frac{r}{2}\mathbf{e}_r$ where $r = \sqrt{x^2 + y^2}$ and \mathbf{e}_r is the radial unit vector.

The analytic solution of this problem is :

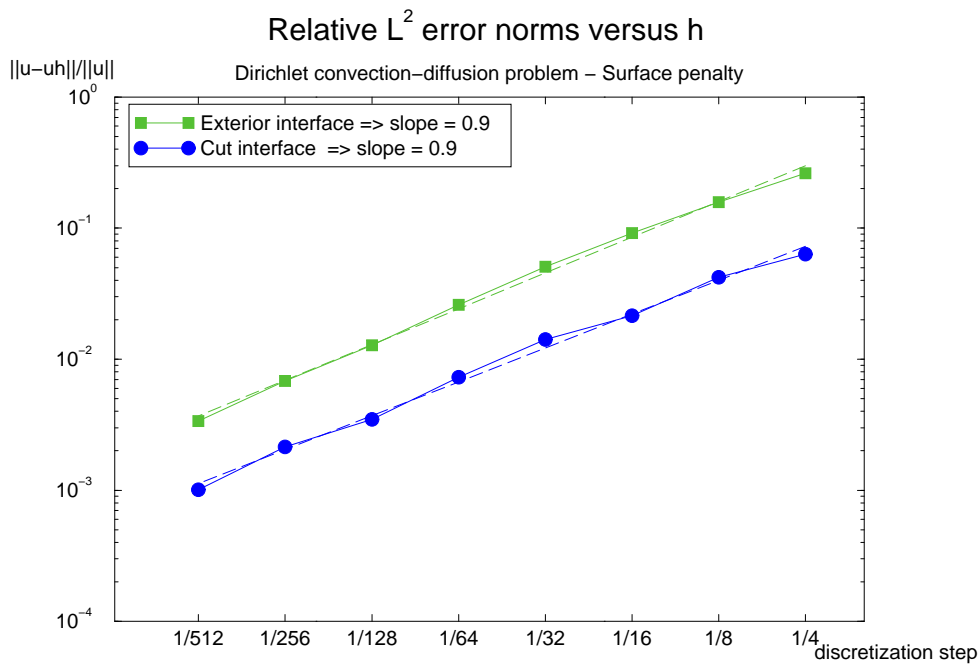
$$\tilde{u} = 4 \left(1 - \exp\left(\frac{r^2 - 1}{4}\right)\right) \quad \text{in } \tilde{\Omega}.$$

The associated fictitious problem (\mathcal{P}) is solved using either the (D1) or (D2) E.B.C method (see Table III.1). The following results have been performed with $\eta = 10^{-12}$ to obtain a negligible modelling error compared to the discretization error. As in the diffusion case, the two Dirichlet E.B.C. methods are both first-order methods for the L^2 -norm and lead to the same errors (see Fig. III.21).

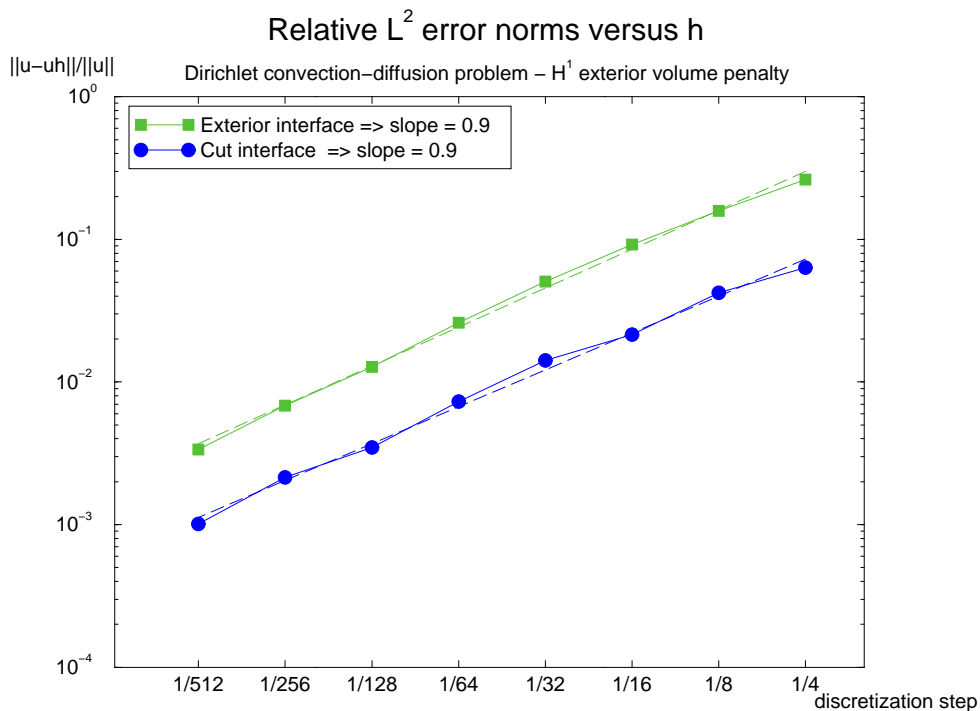
An adaptive mesh refinement is performed around the immersed interface for the (D1) E.B.C. method. As shown in Fig. III.22, the (D1) E.B.C. method combined with the FIC-EBC algorithm is a first-order method for the L^2 -norm. However for the cut interface with 4 levels ($l^* = 3$), a stagnation appears: the error due to the non-refined zone of the original domain is reached. Hence, the combination of the E.B.C. method and the FIC-EBC solver varies like $\mathcal{O}(h_{l^*})$ until the discretization error of the non-refined zone is obtained.

If we look towards the error obtained for the L^∞ -norm, we can see in Fig. III.23 that the behaviour of the max norm error is similar to the behaviour of the L^2 -norm error. The E.B.C. method is of first-order for the L^∞ -norm, and the combination of the (D1) E.B.C. method with the FIC-EBC solver remains of first-order with respect to the finest local grid discretization step.

Moreover, the discretization of the convective flux makes the DDM iterations necessary even for

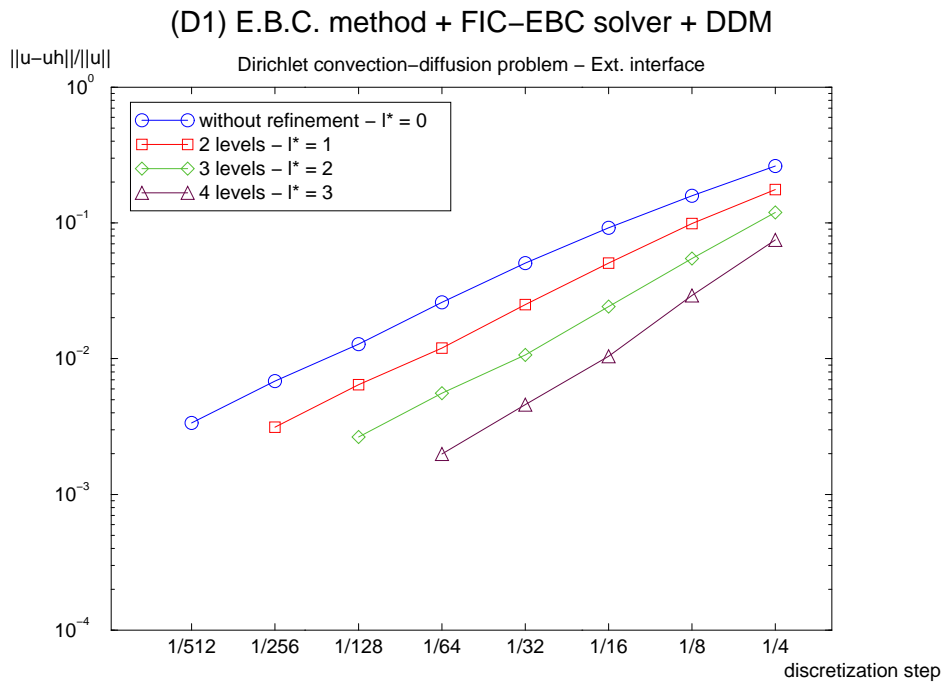


(a) (D1) E.B.C. method.

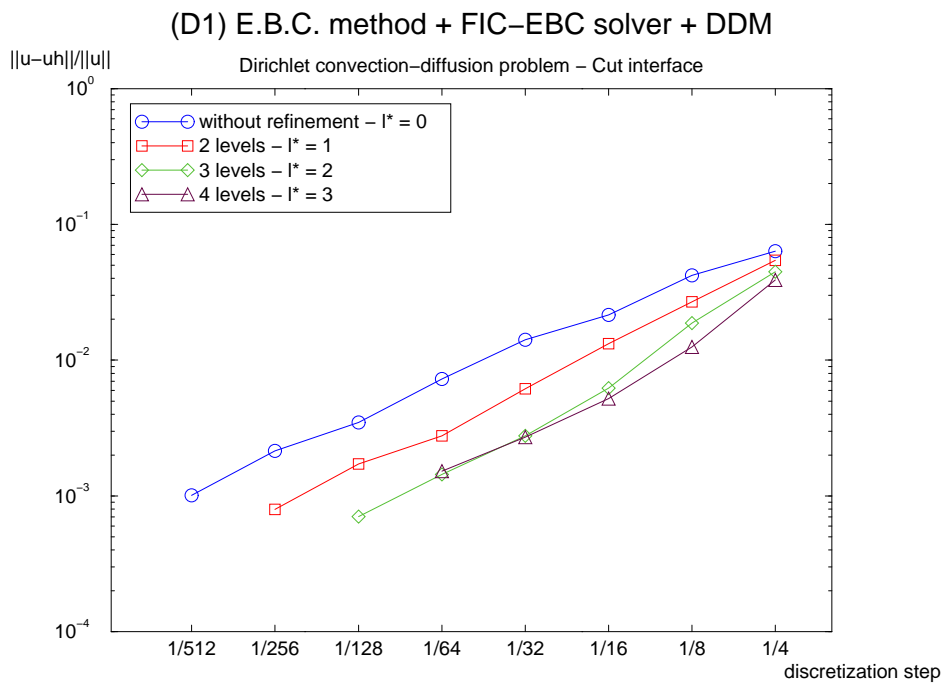


(b) (D2) E.B.C. method.

Figure III.21: Convergence for the L^2 -norm of the discretization error with h for the Dirichlet convection-diffusion problem with Σ_h^{ext} or Σ_h^{cut} .



(a) Exterior interface Σ_h^{ext} .



(b) Cut interface Σ_h^{cut} .

Figure III.22: Convergence for the L^2 -norm of the discretization error with h_0 for the combination of the (D1) E.B.C. method with the FIC-EBC solver for the Dirichlet convection-diffusion problem.

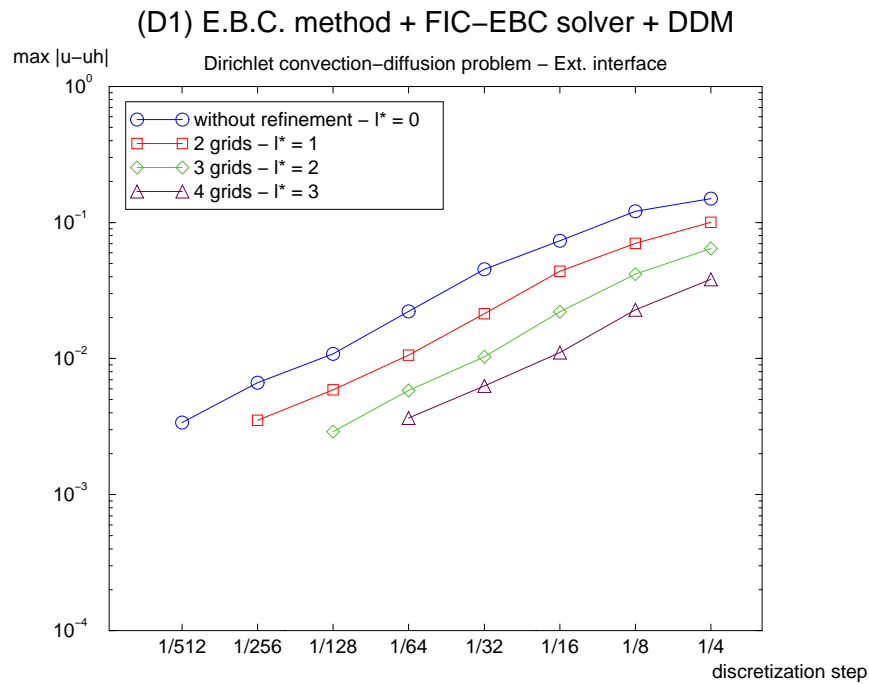
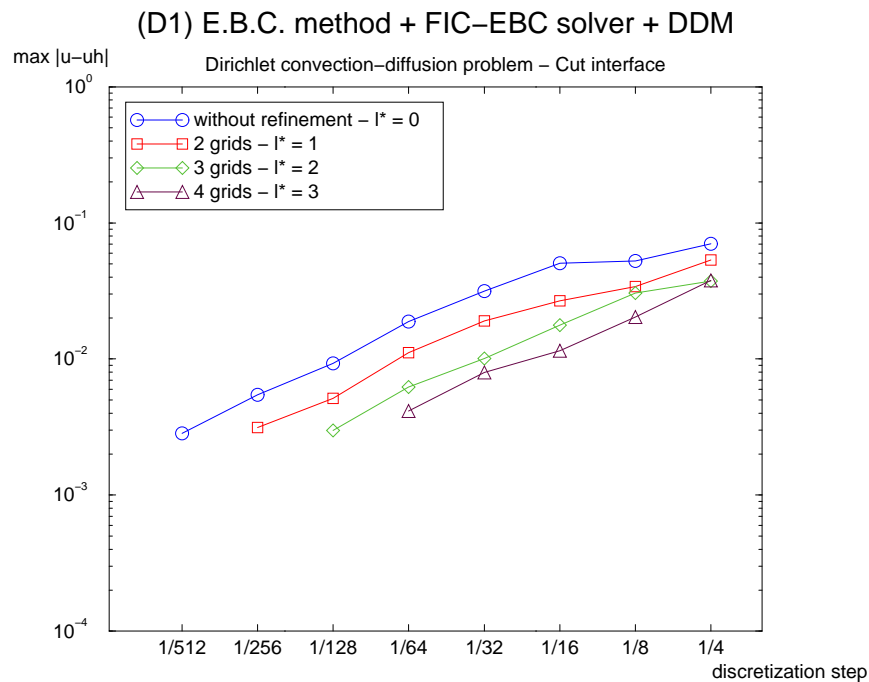
(a) Exterior interface Σ_h^{ext} .(b) Cut interface Σ_h^{cut} .

Figure III.23: Convergence for the L^∞ -norm of the discretization error with h_0 for the combination of the (D1) E.B.C. method with the FIC-EBC solver for the Dirichlet convection-diffusion problem.

the exterior interface Σ_h^{ext} . The upstream scheme may require the unknown value of the neighbor control volume. If this control volume belongs to the enlargement zone of a patch and also belongs to the refinement zone of another patch, the values of the convective flux can then be really different. This may cause large differences on the next coarser grids.

Robin problem

We now consider the Robin problem

$$\begin{cases} -\Delta \tilde{u} + \text{div}(\tilde{\mathbf{v}}\tilde{u}) = 16r^2 & \text{in } \tilde{\Omega}, \\ \frac{\partial \tilde{u}}{\partial n} = 0 & \text{on } \tilde{\Gamma}, \\ -\frac{\partial \tilde{u}}{\partial n} = \tilde{u} + 3 & \text{on } \Sigma \ (\alpha_R = 1, g_R = 3), \end{cases}$$

with $\tilde{\mathbf{v}} = 2r^3 \mathbf{e}_r$ where $r = \sqrt{x^2 + y^2}$ and \mathbf{e}_r is the radial unit vector.

The analytic solution of this problem is :

$$\tilde{u} = 2 - \frac{5}{3} \exp\left(\frac{r^4 - 1}{2}\right) \quad \text{in } \tilde{\Omega}.$$

Since $|\text{meas}(\tilde{\Omega}_h) - \text{meas}(\tilde{\Omega})| = \mathcal{O}(h)$, the expected accuracy is of first-order for the L^2 -norm. In Fig. III.24, the convergence of the (R) E.B.C. method (see Table III.1) for two kinds of surface correction is compared. A global approximation of the characteristic parameter ϵ_h (see Eq. (III.28)) leads to an asymptotic stagnation of the error and then the first-order precision is lost. With an accurate local correction (see Eq. (III.26)), the asymptotically first-order accuracy is then yielded for the L^2 -norm error. Compared to diffusion problems, the asymptotic stagnation of the variant involving a global ϵ_h appears earlier, from the 8×8 mesh for the cut interface Σ_h^{cut} . For Robin (or non homogeneous Neumann) problems, a local correction is thus required to keep the first-order method.

A multi-level algorithm with local nested patches around the immersed interface is performed with the method involving a local surface correction. As in the Dirichlet case, the FIC-EBC solver reduces the original coarse error until the stagnation due to the global error in the non-refined zone (see Fig. III.25). Then, the combination of the E.B.C. method with the FIC-EBC solver leads to a convergence for the L^2 -norm in $\mathcal{O}(h_{l^*})$ as long as the most important error remains around the immersed boundary.

The max norm convergence of the error obtained with the combination of (R) E.B.C. method and the FIC-EBC solver is also of first order, see Fig. III.26. For the cut approximate interface, the same stagnation as for the L^2 -norm appears. The max norm error is then controlled by the max norm error of the non-refined zone.

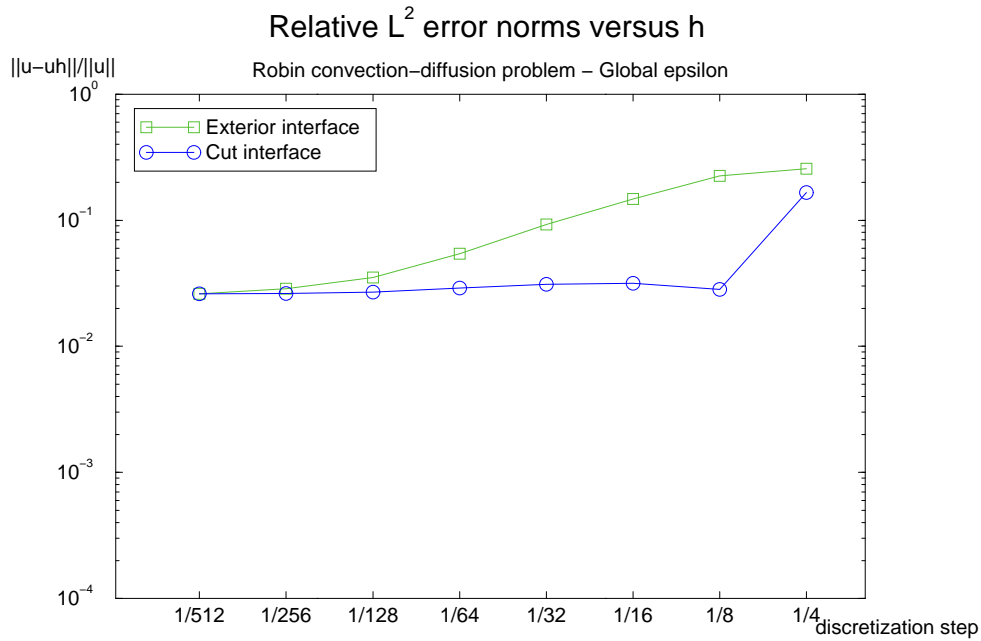
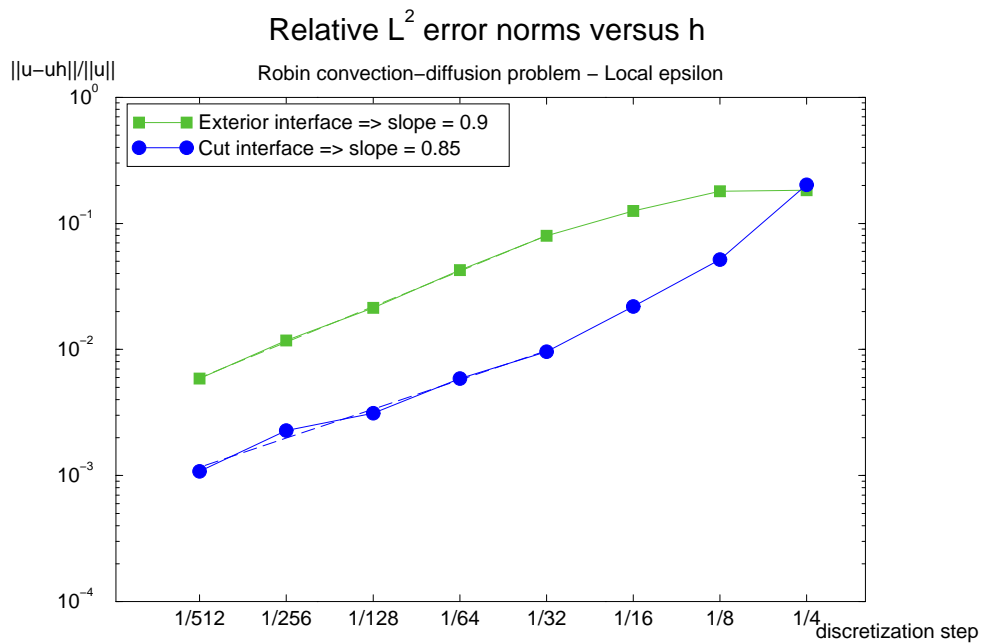
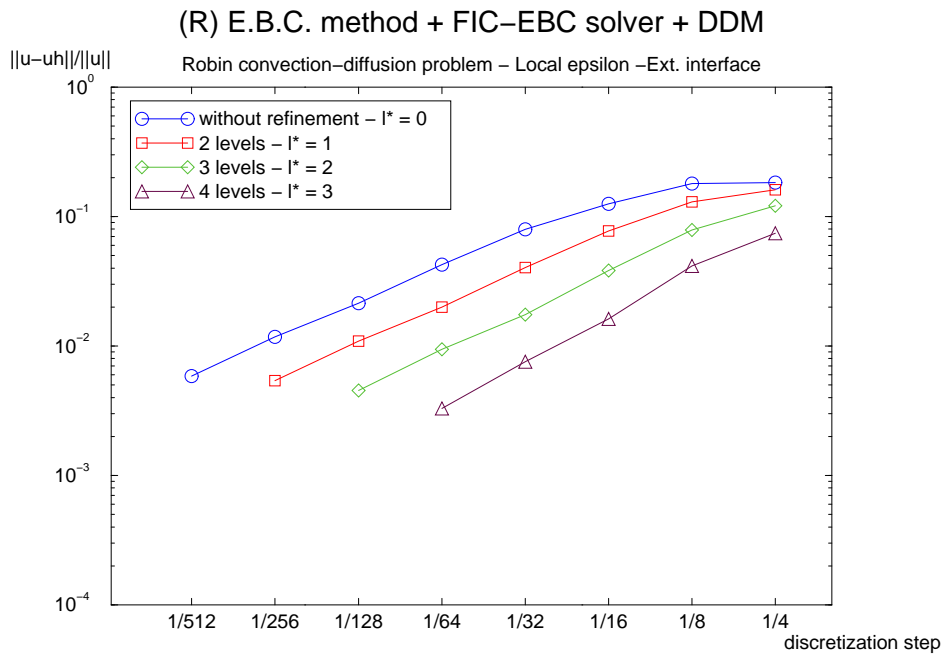
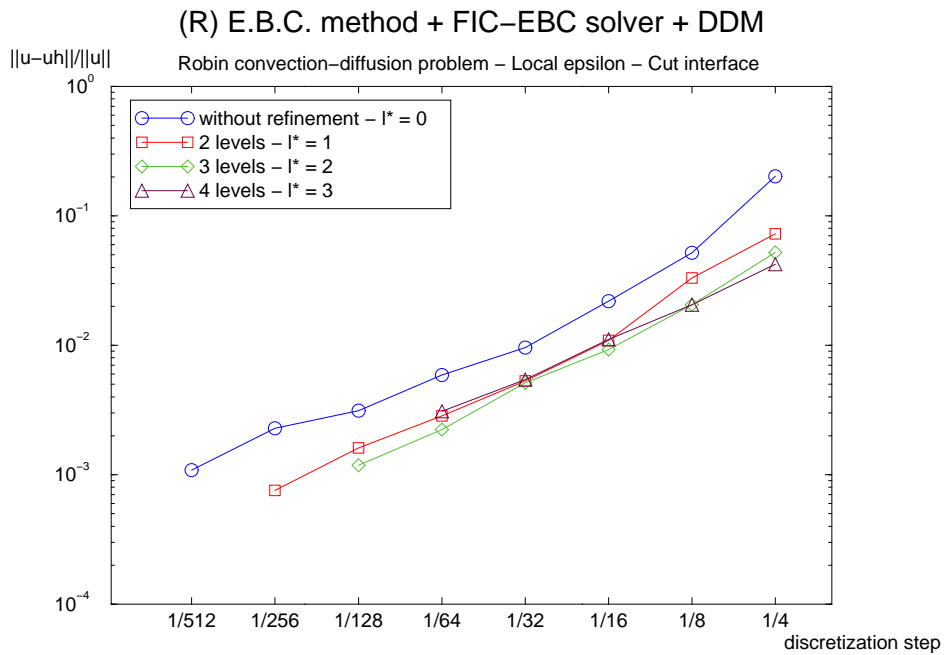
(a) Global correction with ϵ_h .(b) Local correction ϵ_K .

Figure III.24: Convergence for the L^2 -norm of the discretization error with h of the (R) E.B.C. method for the Robin convection-diffusion problem with Σ_h^{ext} or Σ_h^{cut} : global correction and local correction with extension of the local surface $\Sigma_{l,K}$.



(a) Exterior interface Σ_h^{ext} .



(b) Cut interface Σ_h^{cut} .

Figure III.25: Convergence for the L^2 -norm of the discretization error with h_0 for the combination of the (R) E.B.C. method with the FIC-EBC solver for the Robin convection-diffusion problem with a local correction ϵ_K .

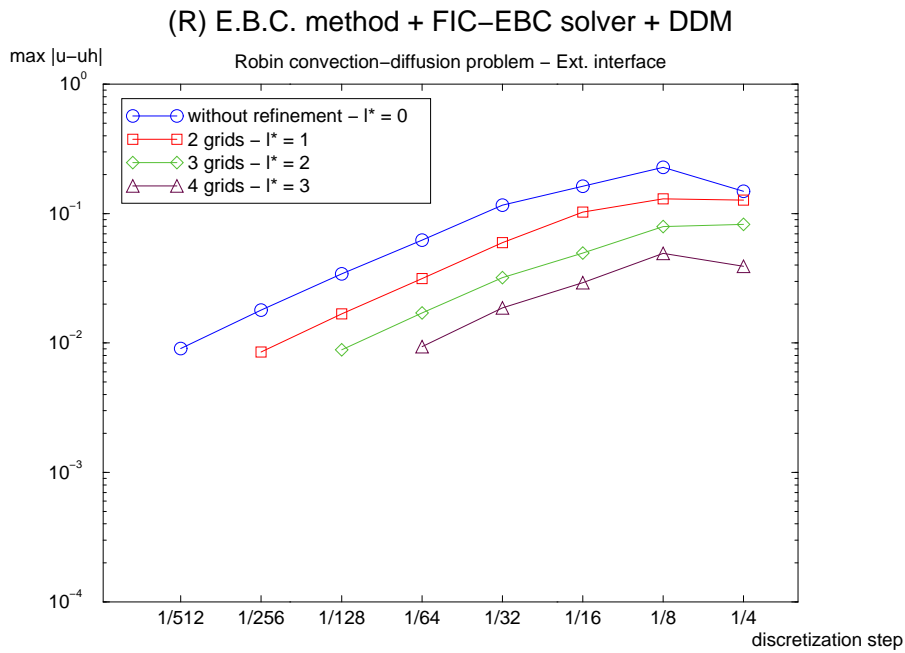
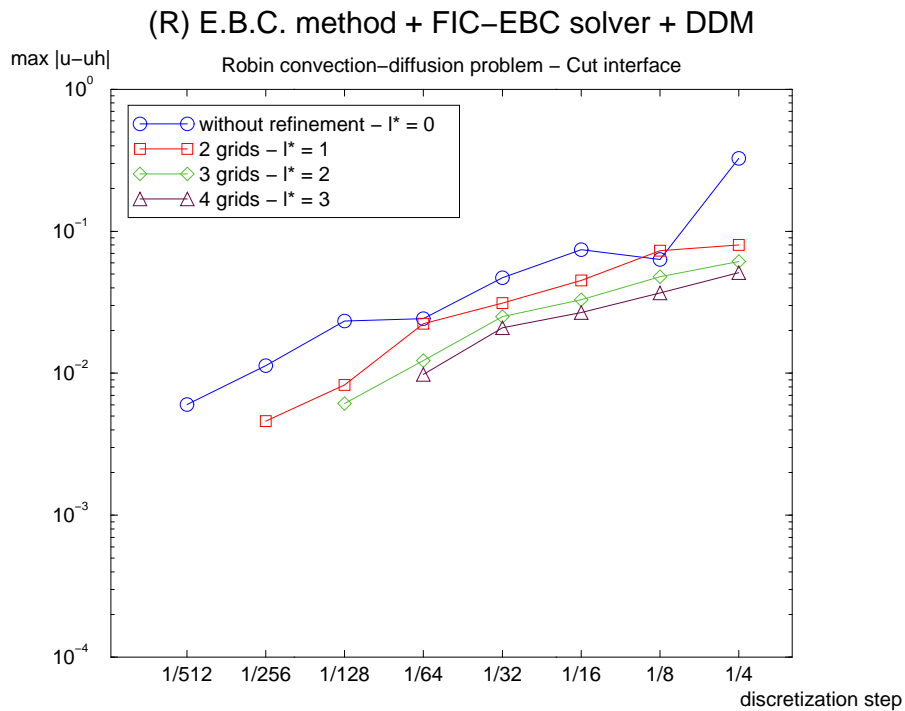
(a) Exterior interface Σ_h^{ext} .(b) Cut interface Σ_h^{cut} .

Figure III.26: Convergence for the L^∞ -norm of the discretization error with h_0 for the combination of the (R) E.B.C. method with the FIC-EBC solver for the Robin convection-diffusion problem.

III.5.4 Second test problem: a corner domain

We now consider an original polygonal domain $\tilde{\Omega}$ immersed in the unit square $\Omega =]0, 1[\times]0, 1[$. That defines a corner immersed interface $\Sigma = \Sigma_1 \cup \Sigma_2$, see Fig. III.27(a). As in the quarter disk case (see section III.5.3), the fictitious square domain is meshed with a grid step varying from $h = \frac{1}{4}$ to $h = \frac{1}{512}$. The approximate immersed interface Σ_h , lying on sides of the mesh, is chosen such that it crosses the physical immersed interface Σ , see Fig. III.27(b). Then, the approximate physical domain verifies $\text{meas}((\tilde{\Omega} \cup \tilde{\Omega}_h) \setminus (\tilde{\Omega} \cap \tilde{\Omega}_h)) = \mathcal{O}(h)$.

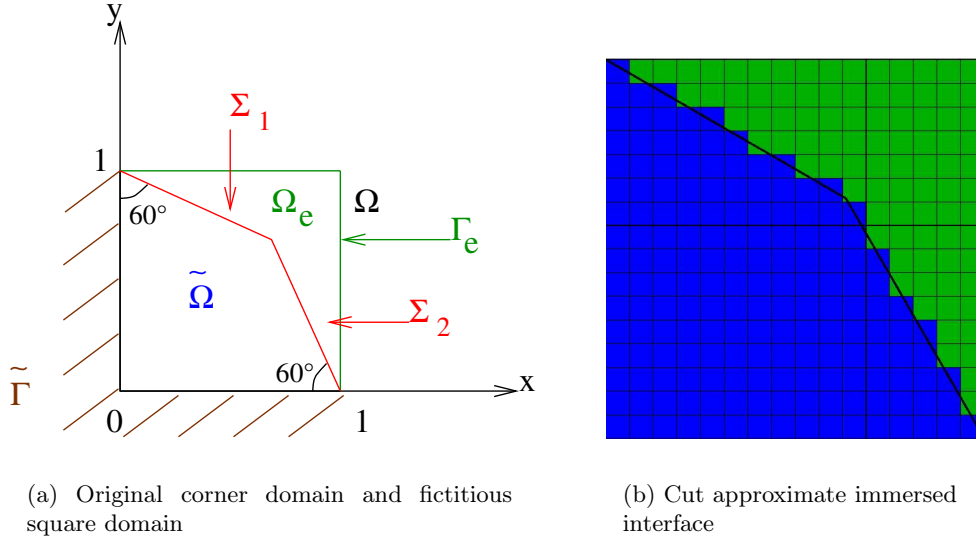


Figure III.27: Description of the corner domain, associated fictitious domain mesh and approximate immersed interface.

We want to solve the **mixed** problem

$$(\tilde{\mathcal{P}}) \quad \begin{cases} -\Delta \tilde{u} = 4 & \text{in } \tilde{\Omega}, \\ \frac{\partial \tilde{u}}{\partial n} = 0 & \text{on } \tilde{\Gamma}, \\ \tilde{u}|_{\Sigma_1} = -\frac{4}{3}x^2 + \frac{2}{\sqrt{3}}x + 1 & \text{on } \Sigma_1 \ (u_D = -\frac{4}{3}x^2 + \frac{2}{\sqrt{3}}x + 1), \\ -\frac{\partial \tilde{u}}{\partial n}|_{\Sigma_2} = \tilde{u}|_{\Sigma_2} + 4x^2 - 6x + 1 + \sqrt{3} & \text{on } \Sigma_2 \ (\alpha_R = 1, g_R = 4x^2 - 6x + 1 + \sqrt{3}). \end{cases}$$

with the analytic solution

$$\tilde{u} = 2 - (x^2 + y^2) \text{ in } \tilde{\Omega}.$$

This mixed problem is solved over the square domain Ω with the E.B.C. method (D1) on $\Sigma_{1,h}$ and the E.B.C. method (R) on $\Sigma_{2,h}$ with a local correction parameter ϵ_K . We combine these E.B.C. methods with the FIC-EBC solver in order to improve the accuracy of the solution around the immersed interface. The results are reported in Fig. III.28.

This test case enables us to conclude that even when the shape of the immersed interface is more singular (with corners for example), the E.B.C. method is in $\mathcal{O}(h)$ for the L^2 -norm. Then, the combination of the FIC-EBC solver leads to a convergence in $\mathcal{O}(h_{l^*})$, with l^* the finest grid level, until the error of the non-refined zone is reached. Moreover, these results confirm that the fictitious

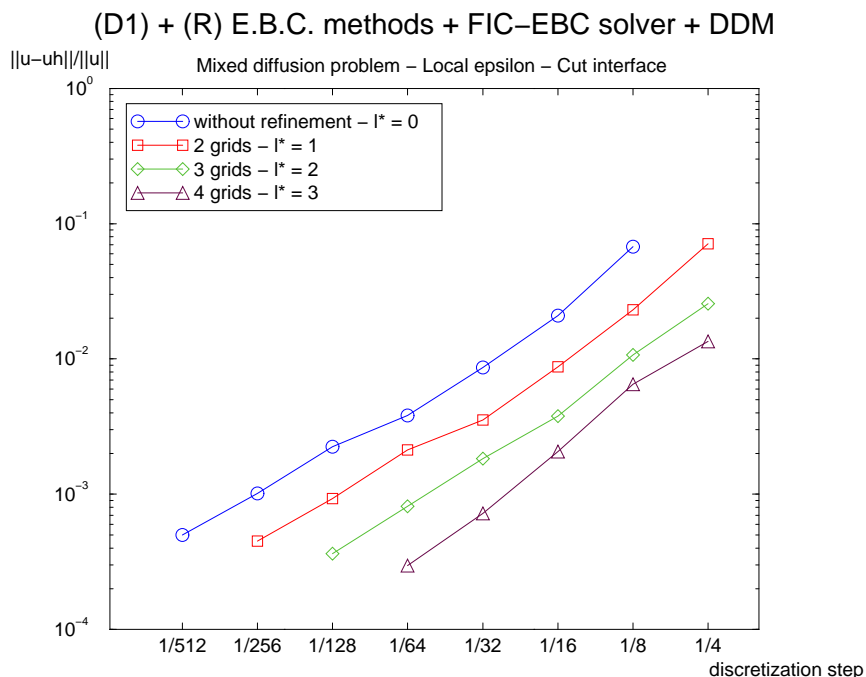


Figure III.28: Convergence for the L^2 -norm of the discretization error with h_0 for the combination of the (D1) and (R) E.B.C. methods with the FIC-EBC solver for the mixed diffusion problem on the corner immersed domain.

domain method presented in this article can be used without difficulty for mixed boundary conditions. Indeed, for each general boundary condition, the same generic formulation with appropriate coefficients is used to evaluate the numerical fluxes.

III.5.5 Analysis and comments on the numerical results

In all the previous examples, the space discretization error is numerically measured by several manners. The L^2 -norms (e.g. Fig. III.18) or L^∞ -norms (e.g. Fig. III.23) of the error inside the approximate original domain $\tilde{\Omega}_h$ are plotted with respect to the discretization step h_0 of the global coarse mesh. Typical distributions inside $\tilde{\Omega}_h$ of the absolute error calculated with or without local refinement are represented in Fig. III.12. These numerical results enable us to draw the following conclusions for diffusion or convection-diffusion problems with Dirichlet, Robin or mixed embedded boundary conditions:

- for the L^2 -norm and the L^∞ -norm, the mesh convergence of the E.B.C. methods asymptotically varies like $\mathcal{O}(h_0)$, where h_0 denotes the global mesh step.
- when the multilevel FIC-EBC solver is used, the mesh convergence becomes in $\mathcal{O}(h_{l^*})$ where h_{l^*} denotes the discretization step of the local finest grid (last level of refinement). Indeed, the slope of all the plotted curves (in log-log representation) is nearly one: the accuracy still varies as $\mathcal{O}(h_0)$. Moreover, the error obtained with l^* refinement levels from a given global mesh step h_0 is reduced to the error obtained without refinement (monogrid calculation) with a global mesh step equal to h_{l^*} . However the $\mathcal{O}(h_{l^*})$ convergence holds until a maximum number of refinement levels is reached, over which no more improvement of the discretization error is observed (see Fig. III.22 and Fig. III.25). Then, only the $\mathcal{O}(h_0)$ convergence remains.

- the stagnation of the error, which can be observed when the number of refinement levels increases, is due to the residual discretization error in the non-refined zone of the global mesh. This residual error is also of first-order. Indeed, as we solve elliptic problems, the influence of the boundary conditions is visible on the whole domain and consequently remains non negligible far away from the boundary. The error distribution inside the approximate original domain confirms this conclusion, see Fig. III.12. Thus, the discretization error of non-refined zone (which does not contain the immersed boundary) is always spoiled by the poor discretization of the immersed interface by stair cases, even with a local mesh refinement around this immersed boundary. Whatever the number of refinement levels l^* is, the residual error converges like $\mathcal{O}(h_0)$ and never like $\mathcal{O}(h_0^2)$, which is clearly observed in the mesh convergence results.

These previous remarks suggest that the discretization error in the approximate original domain $\tilde{\Omega}_h$ converges for the L^2 -norm and by the same way for the L^∞ norm with the following law

$$e_r(u_h) \simeq c_0 h_0 + C_{l^*} h_{l^*}, \quad 0 < c_0 < C_0 < C_1 < \dots < C_{l^*}, \quad h_{l^*} = \frac{h_0}{2^{l^*}}, \quad (\text{III.35})$$

where the constants $c_0, C_l, 0 \leq l \leq l^*$ do not depend on the discretization steps. Thus, the term $c_0 h_0$ is the residual stagnation error in the non-refined zone.

This numerical estimation summarizes the previous conclusions:

- without refinement ($l^* = 0$), the first order accuracy with respect to h_0 is obtained

$$e_r(u_h) \simeq (c_0 + C_0) h_0.$$

- while l^* is sufficiently small in order to have

$$c_0 h_0 \ll C_{l^*} h_{l^*},$$

the mesh convergence varies like $\mathcal{O}(h_{l^*})$.

- as soon as the number of refinement levels l^* is bigger than a “stagnation” number of refinement levels l_{stag}^* , the residual stagnation error is reached. So we have

$$C_{l^*} h_{l^*} \ll c_0 h_0, \quad l^* \geq l_{stag}^*,$$

where

$$C_{l_{stag}^*} h_{l_{stag}^*} \simeq \nu c_0 h_0, \quad \nu \ll 1.$$

Then, for l^* bigger than $l_{stag}^* = \frac{\ln\left(\frac{C_{l_{stag}^*}}{\nu c_0}\right)}{\ln 2}$, which is a bounded number of refinement levels independent of h_0 , the global error $e_r(u_h)$ is equal to the residual error $c_0 h_0$. The correction of the solution around the immersed interface is then negligible compared to the residual error of the non-refined part.

The figures of the discretization error versus the CPU time (Figs. III.14 and III.19) and corresponding tables with respect to h_0 and l^* (Tables III.2 and III.4) show the performances of the multilevel solver.

In view of all the previous comments, the optimal strategy to obtain a given error is first to increase the number of refinement levels l^* before to decrease h_0 if the residual stagnation error is reached.

The resolution of 3-D problems with the previous E.B.C. methods combined with the FIC-EBC solver should follow the same strategy. In particular, the mesh convergence will be of first-order: $\mathcal{O}(h_{l^*})$ or $\mathcal{O}(h_0)$ as in 2-D. There still exists a maximum number of refinement levels independent of h_0 over which no improvement of the solution is observed. However, we may expect that the multilevel solver would be relatively less efficient than in 2-D. In this case, the improvement of the ratio between the solution precision and the CPU time will be surely a little bit less important.

III.6 Conclusion and perspectives

An accurate fictitious domain approach to solve elliptic problems with general boundary conditions has been introduced. This method is based on the introduction of embedded transmission conditions linking jumps of flux and solution through the immersed interface. This method is cheap since a unique Cartesian mesh of the fictitious domain is required. As this method yields a first-order convergence for the L^2 and L^∞ -error norm, an adaptive refinement algorithm is implemented to improve the accuracy of the solution. This algorithm takes account of the properties of the fictitious domain method introduced here and then an asymptotic convergence in $\mathcal{O}(h_{l^*})$, h_{l^*} being the discretization step of the finest local grid, can be observed until the discretization error of the non-refined zone is reached. The numerical results obtained for Dirichlet, Robin or mixed problems are very satisfactory.

Such a fictitious domain method is full of promise, especially to simulate moving and deformable boundaries with a cheap computational cost since no boundary-fitted remeshing is required. Only the local patches of refinement have to be adjusted around the moving immersed boundary. The generalization of this embedded boundary conditions method to the corresponding parabolic evolution problems is also straightforward. The next step will consist in extending this fictitious domain method to the resolution of Navier-Stokes equations (with a projection step for example) with moving boundaries problems like two phase flow simulations or fluid/structure interactions (see [Ang06]).

Chapitre IV

Analyse de convergence en maillage non adapté à la frontière avec une méthode d'éléments finis Q_1

“Convergence analysis of the Q_1 -finite element method for elliptic problems with non-boundary fitted meshes”,
by Philippe Angot and Isabelle Ramière,
submitted to IMA Journal of Numerical Analysis, 2006 [AR06].

Contents

IV.1 Introduction	105
IV.2 Dirichlet problem	107
IV.2.1 Definition of the problem	107
IV.2.2 Discretization by finite elements	107
IV.2.2.a Definitions and notations	107
IV.2.2.b Semi-conforming mesh	109
IV.2.2.c Nonconforming mesh	118
IV.3 Robin problem	125
IV.3.1 Definition of the problem	125
IV.3.2 Nonconforming Q_1 finite element mesh	126
IV.4 Numerical experiments	133
IV.4.1 Fictitious domain approach	133
IV.4.2 Dirichlet case	134
IV.4.3 Robin case	136

Abstract

The aim of this paper is to derive *a priori* error estimates when the mesh does not fit the original domain's boundary. The convergence of a Q_1 -nonconforming finite element method is analyzed for second-order elliptic problems with Dirichlet, Robin or Neumann boundary conditions. The finite element method uses standard Q_1 rectangular finite elements. As the finite element approximate space is not contained in the original solution space, this method is denoted as nonconforming. This study is issued from fictitious domain techniques, that impose original boundary conditions on an approximate immersed interface. The rate of convergence is proved to be in $\mathcal{O}(h^{1/2})$ for the H^1 norm for all general boundary conditions. Moreover, for Dirichlet problems, an error estimate in $\mathcal{O}(h)$ is obtained for L^2 norm. Numerical results are reported and confirm the theoretical rates of convergence.

IV.1 Introduction

We are interesting to solve second-order elliptic problems with general boundary conditions (Dirichlet, Robin or Neumann) using a structured Cartesian mesh. Due to the arbitrary shape of the original domain Ω , the mesh generally does not fit the original problem's boundary. The mesh is then *not boundary-fitted*. If the mesh step is h , an approximate domain Ω_h is thus defined such that $|\text{meas}(\Omega_h) - \text{meas}(\Omega)| = \mathcal{O}(h)$ (see Fig. IV.1). The boundary conditions are then imposed on the approximate boundary defined from the mesh.

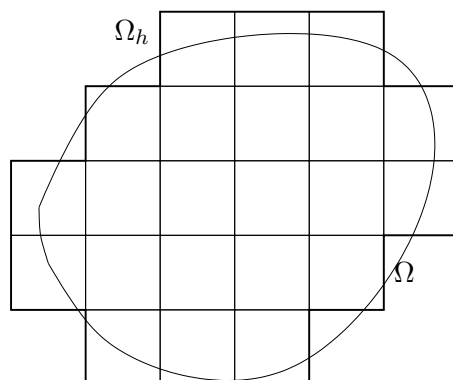


Figure IV.1: A non-boundary fitted mesh.

This study can be considered as a subproblem of the convergence analysis of fictitious domain methods with an approximate immersed interface derived from the fictitious domain mesh (see Ramière *et al.* [RAB07, Ang05, ALR05, RAB06]). Indeed, in the fictitious domain context (see [Sau63, Mar82]), the original domain Ω is embedded in a geometrically simpler domain (most often rectangular in 2D), called fictitious domain. The main interest of such a kind of methods is to use a Cartesian mesh and then to process fast solvers. However, the original boundary conditions have to be enforced on an immersed interface. Among the methods which deal with a fictitious domain approach, few studies are devoted to error estimates, especially for Neumann or Robin boundary conditions. Moreover, most these works are carried out for a boundary-fitted mesh.

One of the most popular approach to deal with embedded boundary conditions is to use boundary or distributed Lagrange multipliers (e.g. Glowinski *et al.* [GPP94, GPHJ99]). In the boundary

Lagrange multiplier approach a surface mesh of the immersed boundary is used whereas in the distributed approach a volume mesh is required on the complementary set of the original domain. Then the boundary conditions are weakly imposed. It involves the solution of a saddle-point problem which requires the inf-sup condition to be satisfied for the discrete subspaces. Some error analysis of the Lagrange multiplier/fictitious domain method can be found for Dirichlet boundary conditions in [GG95, Tom97b, MT99] for second-order elliptic problems. Using P_1 finite elements on a mesh independent of the original domain, in [GG95], the fictitious domain approach with boundary Lagrange multipliers on the original immersed interface is proved to be of order h for the H^1 norm on the original domain Ω . On the fictitious domain, the solution may not belong to H^2 and then the order of convergence is $h^{1/2-\epsilon}$ for all ϵ positive. For the fictitious domain method with volume or distributed Lagrange multipliers, Tomas [Tom97b] proves an error estimate in $\mathcal{O}(h^{1/2-\epsilon})$ for the H^1 norm when the mesh does not match the boundary of Ω . Maitre and Tomas [MT99] use Raviart Thomas mixed finite elements and obtain an optimal convergence in $\mathcal{O}(h)$ for the $H(\text{div})$ norm on a locally adapted mesh. Another analysis of a Dirichlet fictitious problem with a non-smooth right-hand side can be found in [BGH⁺01]. The fictitious domain is discretized with triangular finite elements and it is proved that one may expect at least $\mathcal{O}(h^{1/2})$ precision in the L^2 norm.

Another main class of fictitious domain methods derives from the immersed boundary method (IBM) of Peskin [Pes72] (see an overview in [Pes02]). The main idea of the IBM is to use a discrete delta function to regularize and to transfer to the Cartesian grid the forces exerted on the interface. The method is first-order accurate due to the smearing of the boundary layers by the discrete delta function. However, for some one dimensional problems, the use of a non smooth discrete delta function [BL92] gives second order accuracy solutions. The immersed interface method (IIM) [LL94] (see an overview in [Li03]) is an extension of the IBM for problems with discontinuous coefficients and solutions across the immersed boundary. A finite difference scheme, with a modified stencil near the immersed boundary and additional unknowns on the immersed boundary, is derived to account for the immersed jumps. Then, the method is proved to be formally second order accurate in the L^2 norm for Dirichlet problems [HL99, WB00, LI01].

In the Fat Boundary Method recently developed by Maury [Mau01], two subproblems are solved: a global problem on the fictitious domain and a local subproblem in a narrow domain around the immersed boundary. For a Dirichlet problem, Bertoluzza *al.* [BIM04] prove that an optimal rate of convergence in the H^1 norm is obtained locally in a domain strictly included in Ω . A convergence study of a homogeneous Neumann problem is made in [Ism04]: the strong convergence of the approximate solution to the analytical solution is demonstrated for the H^1 norm.

Glowinski *et al.* [GPWZ96] introduce regularization techniques in the form of penalty parameters for a Neumann problem and this approach is of order h for the H^1 norm and of order h^2 for the L^2 norm. Another study of convergence for a fictitious domain approach dedicated to Neumann problems can be found in [VV04]. This approach deals with a difference scheme. When the solution of the original problem belongs to the space $W^{k,2}$, $k = 3, 4$, the order of accuracy of the approximate solution is $\mathcal{O}(h^{(k-2)/3})$ in the H^1 (or $W^{1,2}$) norm.

In this paper, rectangular elements discretize the approximate domain Ω_h . A Lagrangian Q_1 finite element method (see for example [Cia78]) is used. As Ω_h is not included in Ω , the finite element space V_h is not a subspace of the Hilbert space V to which the original solution belongs. Thus, we have a Q_1 -nonconforming finite element discretization. For each kind of boundary conditions (Dirichlet, Robin, Neumann), the error estimates are proved to be in $\mathcal{O}(h^{1/2})$ for the H^1 norm. For Robin or Neumann boundary conditions, a local correction is devised to take account of the relative surface ratio which allows the convergence order to be preserved. Moreover, for Dirichlet boundary conditions, the duality arguments enable us to prove the $\mathcal{O}(h)$ accuracy for the L^2 norm by using the Aubin-Nitsche theorem.

An outline of the paper is as follows. Section IV.2 is devoted to the convergence analysis of the Dirichlet problem. A first analysis of a *semi-conforming* mesh (see the definition later) is derived to introduce more simply the convergence analysis of the general nonconforming mesh. In Section IV.3, the Robin (or Neumann) problem is studied. Then, in Section IV.4, numerical results are presented which are in good agreement with the theoretical analysis.

IV.2 Dirichlet problem

IV.2.1 Definition of the problem

Let Ω be an open bounded domain in \mathbb{R}^d ($d = 2, 3$) with a Lipschitz-continuous boundary Γ . The approximation of the solution to an elliptic problem over Ω with Dirichlet boundary conditions on Γ is studied in this section.

The following hypothesis (\mathcal{H}) hold:

- $\mathbf{a} = (a_{ij})_{1 \leq i, j \leq d}$ with $a_{ij} \in L^\infty(\Omega)$ verifying the *ellipticity assumptions*:

$$\exists a_0 > 0, \forall \boldsymbol{\xi} \in \mathbb{R}^d, \sum_{i,j=1}^d a_{ij}(x) \xi_j \xi_i \geq a_0 |\boldsymbol{\xi}|^2 \text{ a.e. in } \Omega,$$

where $|\cdot|$ is the Euclidean norm in \mathbb{R}^d ,

- f belongs to $L^2(\Omega)$.

We consider the second-order elliptic problem

$$\begin{cases} -\operatorname{div}(\mathbf{a}\nabla u) = f & \text{in } \Omega, \\ u|_\Gamma = 0. \end{cases} \quad (\text{IV.1})$$

The variational formulation (\mathcal{P}) of (IV.1) writes :

$$(\mathcal{P}) \quad \text{find } u \in V = \{v \in H^1(\Omega), v|_\Gamma = 0\} = H_0^1(\Omega), \text{ such that } a(u, v) = L(v), \forall v \in V \quad (\text{IV.2})$$

where

$$\begin{cases} a(u, v) = \sum_{i,j=1}^d \int_{\Omega} a_{ij} \frac{\partial u}{\partial x_j} \frac{\partial v}{\partial x_i} dx, \\ L(v) = \int_{\Omega} f v dx. \end{cases} \quad (\text{IV.3})$$

Under the hypothesis (\mathcal{H}), the bilinear form $a(\cdot, \cdot)$ is continuous on $V \times V$ and V -elliptic. Moreover, the linear form $L(\cdot)$ is continuous on V . Lax-Milgram's theorem (e.g. [Cia78]) enables us to conclude that the solution $u \in V$ to the problem (\mathcal{P}) exists and is unique.

IV.2.2 Discretization by finite elements

IV.2.2.a Definitions and notations

From now on, we assume that Ω is convex for sake of simplicity. If Ω is not convex, the further H^1 error estimates still probably hold by using more technical arguments.

We focus on Dirichlet problems in \mathbb{R}^2 ($d = 2$). Let $(\mathcal{T}_h)_h$ denote a family of meshes of Ω by (closed) finite elements K in the sense of [Cia78]. We introduce the following notations:

$$h_K = \text{diam}(K) \quad (\text{maximum of the Euclidean distances between two points of } K), \quad (\text{IV.4})$$

$$h = \max\{h_K, K \in \mathcal{T}_h\} \quad \text{is the mesh size}, \quad (\text{IV.5})$$

$$\rho_K = \sup\{\text{diam}(S); S \text{ is a ball contained in } K\}. \quad (\text{IV.6})$$

Definition IV.1 (Regular family). A family $(\mathcal{T}_h)_h$ of finite elements is regular if the following two conditions are satisfied

i) There exists a constant $\sigma \geq 1$ such that

$$\forall h, \forall K \in \mathcal{T}_h, \frac{h_K}{\rho_K} \leq \sigma. \quad (\text{IV.7})$$

ii) The diameters h_K approach zero:

$$h = \max_{K \in \mathcal{T}_h} h_K \rightarrow 0. \quad (\text{IV.8})$$

Each mesh \mathcal{T}_h defines an approximate polygonal open domain Ω_h such that

$$\overline{\Omega}_h = \bigcup_{K \in \mathcal{T}_h} K,$$

with the boundary $\Gamma_h = \partial\Omega_h$.

Let $\partial\mathcal{T}_h$ denote the set of elements $K \in \mathcal{T}_h$ such that the intersection of K with Γ_h has a positive measure in \mathbb{R}^{d-1} (see Fig. IV.2) and $\partial\mathcal{T}_h^0 = \{K \in \mathcal{T}_h; \partial K \cap \Gamma_h \neq \emptyset\}$ denote the set of rectangles K which have a node on Γ_h at least.

A Lagrangian Q_1 finite element method is used to approximate the solution u of the problem (\mathcal{P}) . The discretization nodes $(a_{i,K})_{1 \leq i \leq 4}$ are located on the vertices of the rectangular element K and the shape functions $(q_{i,K})_{1 \leq i \leq 4}$ associated to the nodes $a_{i,K}$ belong to $Q_1(K)$ (see e.g. [Cia78]).

For a homogeneous Dirichlet case, the approximation space V_h is defined by

$$V_h = \{v \in C^0(\overline{\Omega}_h); v|_{\Gamma_h} = 0, \forall K \in \mathcal{T}_h, v|_K \in Q_1(K)\} \subset H_0^1(\Omega_h), \quad (\text{IV.9})$$

where Q_k stands for the space of polynomials of degree for each variable less than or equal to k . In \mathbb{R}^2 , $Q_1 = \text{span}\{1, x, y, xy\}$.

The spaces V and V_h are endowed with the H^1 semi-norm

$$\forall v \in H^1(\Omega), \quad |v|_{H^1(\Omega)} = \int_{\Omega} |\nabla v|^2, \quad \forall v_h \in H^1(\Omega_h), \quad |v_h|_{H^1(\Omega_h)} = \int_{\Omega_h} |\nabla v_h|^2, \quad (\text{IV.10})$$

which is a Hilbert norm on H_0^1 equivalent to the H^1 norm.

In what follows, to lighten the notations, the subscript K is omitted when no ambiguity lies on the rectangle K under consideration. Moreover, C stands for a generic constant that may vary from one line to the other but is always independent of h .

IV.2.2.b Semi-conforming mesh

As a first step, we want to approximate the original domain Ω by a polygonal domain Ω_h such that some vertices of the boundary Γ_h of Ω_h are located on Γ (see Fig. IV.2). This enables us to use some classical arguments to prove the convergence of the error and to enlighten some key points of the general demonstration for nonconforming structured meshes.

Definition IV.2 (Semi-conforming mesh). A mesh $\mathcal{T}_h = \{K\}$ of $\bar{\Omega}$ is denoted as semi-conforming if

- i) The open bounded domain Ω is approximated by the open polygonal domain Ω_h such that $\bar{\Omega}_h = \bigcup_{K \in \mathcal{T}_h} K \subset \bar{\Omega}$ with usual assumptions on K (see e.g. [Cia78]).
- ii) Each element $K \in \partial\mathcal{T}_h$ has a vertex on Γ at least.

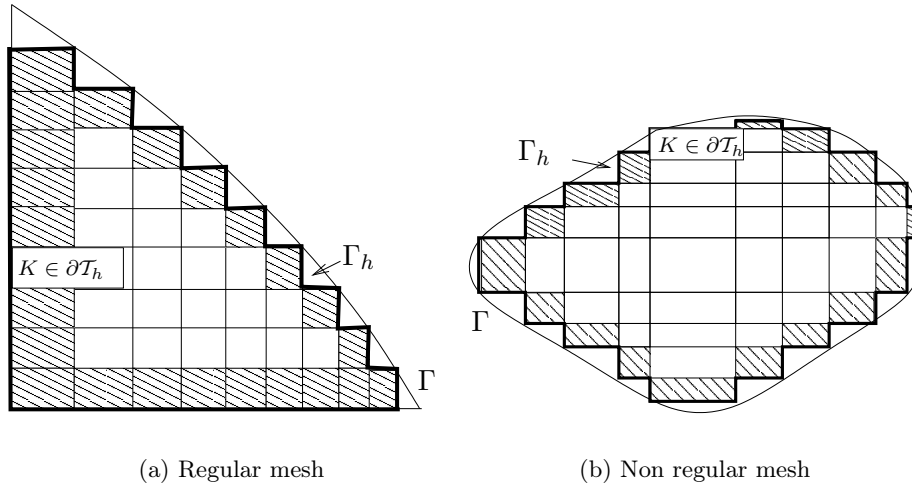


Figure IV.2: Examples of semi-conforming meshes composed by rectangles K .

The domain Ω is discretized by a Q_1 semi-conforming mesh \mathcal{T}_h composed by rectangles K with diameter $h_K \leq h$. The family $(\mathcal{T}_h)_h$ is regular, in the sense of definition IV.1, if the curve boundaries of the domain Ω accept neither a vertical nor a horizontal tangent (see examples in Fig. IV.2).

The family $(\mathcal{T}_h)_h$ is chosen regular. As the open domain Ω is supposed to be regular, then there exists a constant C depending on the curvature of Γ only such that

$$\forall x \in \Gamma_h \cap \partial K, \quad \text{dist}(x, \Gamma) \leq Ch_K. \quad (\text{IV.11})$$

The hypothesis (\mathcal{H}) on the data \mathbf{a} and f enables us to conclude to the existence and the uniqueness of the solution $u_h \in V_h$ of the discrete problem (\mathcal{P}_h)

$$(\mathcal{P}_h) \quad \forall v_h \in V_h, \quad \sum_{i,j=1}^2 \int_{\Omega_h} a_{ij} \frac{\partial u_h}{\partial x_j} \frac{\partial v_h}{\partial x_i} dx = \int_{\Omega_h} f v_h dx. \quad (\text{IV.12})$$

Since $V_h \not\subset V$, we introduced the space \tilde{V}_h defined in Ω by

$$\tilde{V}_h = \{v \in \mathcal{C}^0(\bar{\Omega}); v|_{\Omega_h} \in V_h, v|_{\Omega \setminus \Omega_h} = 0\}. \quad (\text{IV.13})$$

The space \tilde{V}_h is then a finite dimensional subspace of $V = H_0^1(\Omega)$.

Let \tilde{u}_h be the extension by 0 in $\Omega \setminus \Omega_h$ of the solution u_h of the discrete problem (\mathcal{P}_h) (cf. Eq.(IV.12)):

$$\tilde{u}_h = \begin{cases} u_h & \text{in } \Omega_h \\ 0 & \text{in } \Omega \setminus \Omega_h \end{cases} \in \tilde{V}_h.$$

The function $\tilde{u}_h \in \tilde{V}_h$ can be characterized as the solution to following variational problem:

$$\forall \tilde{v}_h \in \tilde{V}_h, \quad \sum_{i,j=1}^2 \int_{\Omega} a_{ij} \frac{\partial \tilde{u}_h}{\partial x_j} \frac{\partial \tilde{v}_h}{\partial x_i} dx = \int_{\Omega} f \tilde{v}_h dx.$$

Thus,

$$\forall \tilde{v}_h \in \tilde{V}_h \subset H_0^1(\Omega), \quad a(\tilde{u}_h, \tilde{v}_h) = L(\tilde{v}_h). \quad (\text{IV.14})$$

Lemma IV.1 (Céa's lemma in the semi-conforming case). *There exists a constant $C > 0$ independent of the subspace \tilde{V}_h (resp. V_h) such that:*

$$|u - \tilde{u}_h|_{H^1(\Omega)} \leq C \inf_{\tilde{v}_h \in \tilde{V}_h} |u - \tilde{v}_h|_{H^1(\Omega)}. \quad (\text{IV.15})$$

$$|u - u_h|_{H^1(\Omega_h)} \leq C \inf_{v_h \in V_h} |u - v_h|_{H^1(\Omega_h)}. \quad (\text{IV.16})$$

Proof. We use the same proof as for adapted meshes (see e.g. [Cia78, RT92]).

From (IV.2) and (IV.14), we have

$$\begin{aligned} a(u, v) &= L(v) \quad \forall v \in V = H_0^1(\Omega). \\ a(\tilde{u}_h, \tilde{v}_h) &= L(\tilde{v}_h) \quad \forall \tilde{v}_h \in \tilde{V}_h \subset H_0^1(\Omega). \end{aligned}$$

The function $\tilde{w}_h = \tilde{v}_h - \tilde{u}_h \in \tilde{V}_h$ is used as test function. As \tilde{V}_h is a subspace of V , \tilde{w}_h belongs to V . Then,

$$a(u, \tilde{w}_h) = a(\tilde{u}_h, \tilde{w}_h).$$

Hence

$$a(u - \tilde{u}_h, \tilde{w}_h) = 0, \quad (\text{IV.17})$$

$$\forall \tilde{v}_h \in \tilde{V}_h, \quad a(u - \tilde{u}_h, u - \tilde{u}_h) = a(u - \tilde{u}_h, u - \tilde{v}_h). \quad (\text{IV.18})$$

The V -ellipticity and the continuity of the bilinear form $a(\cdot, \cdot)$ lead to

$$\begin{aligned} a_0 |u - \tilde{u}_h|_{H^1(\Omega)}^2 &\leq a(u - \tilde{u}_h, u - \tilde{u}_h) = a(u - \tilde{u}_h, u - \tilde{v}_h) \leq M |u - \tilde{u}_h|_{H^1(\Omega)} |u - \tilde{v}_h|_{H^1(\Omega)}, \\ |u - \tilde{u}_h|_{H^1(\Omega)}^2 &\leq \frac{M}{a_0} |u - \tilde{u}_h|_{H^1(\Omega)} |u - \tilde{v}_h|_{H^1(\Omega)}, \end{aligned}$$

where M is the continuity constant. Inequality (IV.15) follows with $C = \frac{M}{a_0} \geq 1$.

From Eq.(IV.17), we can also write

$$\forall v_h \in V_h, \quad \sum_{i,j=1}^2 \int_{\Omega_h} a_{ij} \frac{\partial}{\partial x_j} (u - u_h) \frac{\partial}{\partial x_i} (u - u_h) dx = \sum_{i,j=1}^2 \int_{\Omega_h} a_{ij} \frac{\partial}{\partial x_j} (u - u_h) \frac{\partial}{\partial x_i} (u - v_h) dx.$$

Inequality (IV.16) is then deduced from the properties of $\mathbf{a} = (a_{ij})_{1 \leq i,j \leq 2}$. \square

Moreover,

$$\forall \tilde{v}_h \in \tilde{V}_h, \quad |u - \tilde{v}_h|_{H^1(\Omega)} = \left(|u - \tilde{v}_h|_{H^1(\Omega_h)}^2 + |u|_{H^1(\Omega \setminus \Omega_h)}^2 \right)^{1/2}.$$

Then for $\tilde{v}_h = \tilde{u}_h$

$$\boxed{|u - \tilde{u}_h|_{H^1(\Omega)} = \left(|u - u_h|_{H^1(\Omega_h)}^2 + |u|_{H^1(\Omega \setminus \Omega_h)}^2 \right)^{1/2}}. \quad (\text{IV.19})$$

We introduce the dual problem (\mathcal{P}^*): For $g \in L^2(\Omega)$, find $\varphi_g \in V$ such that

$$(\mathcal{P}^*) \quad \forall v \in V, \quad a(v, \varphi_g) = \int_{\Omega} g v dx. \quad (\text{IV.20})$$

With the Lax-Milgram's theorem and the hypothesis (\mathcal{H}), the problem (\mathcal{P}^*) admits an unique solution.

If for any $g \in L^2(\Omega)$, the solution φ_g of (IV.20) belongs to $H^2(\Omega) \cap V$, the problem (\mathcal{P}^*) is said to be *regular*. It then follows that there exists a constant C^* such that

$$\|\varphi_g\|_{H^2(\Omega)} \leq C^* \|g\|_{L^2(\Omega)} \quad \forall g \in L^2(\Omega). \quad (\text{IV.21})$$

Remark. Since Ω is convex, using [Gri85] yields that, if $\mathbf{a} \in W^{1,\infty}(\Omega) = \{v \in L^\infty(\Omega), \partial v \in L^\infty(\Omega)\}$, the problems (\mathcal{P}) and (\mathcal{P}^*) are regular.

Theorem IV.2 (Error estimate with a Q_1 semi-conforming mesh - Dirichlet case).

Let Ω be a regular convex open bounded domain. We assume that the solution u of the Dirichlet problem (\mathcal{P}) (see Eq.(IV.2)) is in the space $H^2(\Omega)$ and that u_h is the solution to the discrete problem (\mathcal{P}_h) (see Eq.(IV.12)). For any regular family $(\mathcal{T}_h)_h$ of Q_1 semi-conforming meshes to Ω , there exists some constants C such that

$$|u - u_h|_{H^1(\Omega_h)} \leq C h^{1/2} \|u\|_{H^2(\Omega)}, \quad (\text{IV.22})$$

and if the dual problem (\mathcal{P}^*) (see Eq. (IV.20)) is regular,

$$\|u - u_h\|_{L^2(\Omega_h)} \leq C h \|u\|_{H^2(\Omega)}. \quad (\text{IV.23})$$

In order to demonstrate theorem IV.2, two lemmas are introduced.

Lemma IV.3 (Trace inequality). Let σ be an edge of a simplex $\omega \subset \mathbb{R}^d$ then

$$\forall u \in H^1(\omega), \quad \|u\|_{L^2(\sigma)} \leq \left(d \frac{\text{meas}(\sigma)}{\text{meas}(\omega)} \right)^{1/2} (\|u\|_{L^2(\omega)} + \text{diam}(\omega) |u|_{H^1(\omega)}). \quad (\text{IV.24})$$

A proof of this lemma can be found in [Ver99].

Lemma IV.4. If the property (IV.11) holds, there exists a constant C such that any function $u \in H^2(\Omega)$ satisfies

$$|u|_{H^1(\Omega \setminus \Omega_h)} \leq C h^{1/2} \|u\|_{H^2(\Omega)}. \quad (\text{IV.25})$$

Proof of Lemma IV.4. With the same reasoning as in [RT92, Lemma 5.2-3], we will demonstrate that there exists a constant C such that

$$\forall v \in H^1(\Omega), \quad \|v\|_{L^2(\Omega \setminus \Omega_h)} \leq C \left(h^{1/2} \|v\|_{L^2(\Gamma)} + h |v|_{H^1(\Omega \setminus \Omega_h)} \right). \quad (\text{IV.26})$$

Due to the trace theorem (e.g. [Cia78]), the estimation (IV.26) yields

$$\forall v \in H^1(\Omega), \quad \|v\|_{L^2(\Omega \setminus \Omega_h)} \leq Ch^{1/2} \|v\|_{H^1(\Omega)}. \quad (\text{IV.27})$$

Then, the estimate (IV.25) is deduced from (IV.27) where $v = \frac{\partial u}{\partial x}$ and $v = \frac{\partial u}{\partial y}$.

To proof inequality (IV.26), let first introduce some additional notations for the rectangles $K \in \partial \mathcal{T}_h$ (cf. Fig. IV.3):

- $a_{i,K}^*$, $1 \leq i \leq 4$, is the orthogonal projection of $a_{i,K}$ onto Γ , ($|a_{i,K} a_{i,K}^*|$ is then the distance from $a_{i,K}$ to Γ);
- $(a_{i,K}, \xi_{i,K}, \eta_{i,K})$ is the orthonormal basis such that the axis $\eta_{i,K}$ coincide with the directed line $(a_{i,K} a_{i,K}^*)$;
- The vertices of K are numbered so that the segment $[a_{2,K} a_{3,K}]$ belongs to Γ_h with $a_{3,K} \in \Gamma_h \cap \Gamma$ and $a_{2,K} \notin \Gamma$. The open domain \mathcal{O}_K is delimited by the side $[a_{2,K} a_{3,K}]$, the paren $a_{3,K} a_{j,K'}$ and the side $[a_{2,K} a_{j,K'}]$, where $a_{j,K'}$ denotes the nearest node of $a_{2,K}$ which is on $\Gamma_h \cap \Gamma$ and distinct of $a_{3,K}$.

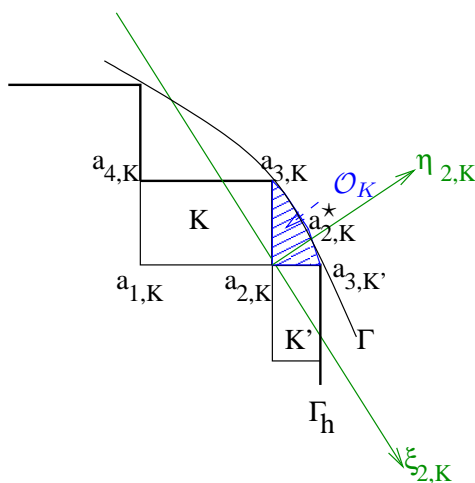


Figure IV.3: Example of an open \mathcal{O}_K .

Let $\mathcal{D}(\overline{\Omega})$ denote the space of indefinitely differentiable functions with compact support in $\overline{\Omega}$. As $\mathcal{D}(\overline{\Omega})$ is dense in $H^1(\Omega)$, we will prove inequality (IV.26) for any function $v \in \mathcal{D}(\overline{\Omega})$.

In the orthonormal basis $(a_{2,K}, \xi_{2,K}, \eta_{2,K})$ (simpler named $(a_{2,K}, \xi, \eta)$), let $\eta = \varphi(\xi)$ be the equation of the paren $a_{3,K} a_{j,K'}$ and (ξ, η) be a point in \mathcal{O}_K . Then for all $v \in \mathcal{D}(\overline{\Omega})$,

$$v(\xi, \eta) = v(\xi, \varphi(\xi)) + \int_{\varphi(\xi)}^{\eta} \frac{\partial v}{\partial s}(\xi, s) ds.$$

So,

$$v^2(\xi, \eta) \leq 2v^2(\xi, \varphi(\xi)) + 2 \left(\int_{\varphi(\xi)}^{\eta} \frac{\partial v}{\partial s}(\xi, s) ds \right)^2.$$

The Cauchy-Schwarz inequality leads to

$$v^2(\xi, \eta) \leq 2v^2(\xi, \varphi(\xi)) + 2|\varphi(\xi) - \eta| \int_{\eta}^{\varphi(\xi)} \left(\frac{\partial v}{\partial s}(\xi, s) \right)^2 ds.$$

Since $(\xi, \eta) \in \mathcal{O}_K$, inequality (IV.11) yields

$$v^2(\xi, \eta) \leq 2v^2(\xi, \varphi(\xi)) + Ch_K \int_{\eta}^{\varphi(\xi)} \left(\frac{\partial v}{\partial s}(\xi, s) \right)^2 ds.$$

Integrating on \mathcal{O}_K , we have

$$\forall K \in \partial\mathcal{T}_h, \quad \|v\|_{L^2(\mathcal{O}_K)}^2 \leq C \left(h_K \|v\|_{L^2(\Gamma \cap \partial\mathcal{O}_K)}^2 + h_K^2 \left\| \frac{\partial v}{\partial \eta} \right\|_{L^2(\mathcal{O}_K)}^2 \right).$$

Summing over all the rectangles $K \in \partial\mathcal{T}_h$,

$$\|v\|_{L^2(\Omega \setminus \Omega_h)}^2 \leq C \left(h \|v\|_{L^2(\Gamma)}^2 + h^2 |v|_{H^1(\Omega \setminus \Omega_h)}^2 \right).$$

Then, the boundedness (IV.26) is obtained. \square

Remark.

- When $v|_{\Gamma} = 0$, inequality (IV.26) becomes

$$\|v\|_{L^2(\Omega \setminus \Omega_h)} \leq Ch |v|_{H^1(\Omega \setminus \Omega_h)}. \quad (\text{IV.28})$$

- Following the same arguments as in the above proof, we can easily prove that

$$\forall v \in H^1(\Omega), \quad \|v\|_{L^2(\Omega \setminus \Omega_h)} \leq C \left(h^{1/2} \|v\|_{L^2(\Gamma_h)} + h |v|_{H^1(\Omega \setminus \Omega_h)} \right), \quad (\text{IV.29})$$

and then, for $v|_{\Gamma_h} = 0$, we have

$$\|v\|_{L^2(\Omega \setminus \Omega_h)} \leq Ch |v|_{H^1(\Omega \setminus \Omega_h)}. \quad (\text{IV.30})$$

Proof of theorem IV.2. Let Π_h be the Lagrange Q_1 -interpolation operator, defined for any continuous function v on K by

$$\forall K \in \mathcal{T}_h, \quad \Pi_h v|_K = \sum_{i=1}^4 v(a_i) q_i, \quad (\text{IV.31})$$

Then

$$\forall K \in \mathcal{T}_h, \quad \Pi_h v|_K \in Q_1(K), \quad \Pi_h v(a_i) = v(a_i).$$

With a semi-conforming mesh, the function $\Pi_h v$ does not vanish on Γ_h . Consequently, $\Pi_h v$ does not belong to the discretization space V_h . Another Q_1 -interpolation operator Π_h^0 , which belongs to V_h , is then introduced by

$$\forall K \in \mathcal{T}_h, \quad \Pi_h^0 v|_K = \sum_{i=1}^4 \tilde{v}(a_i) q_i \quad (\text{IV.32})$$

with

$$\tilde{v}(a_i) = \begin{cases} 0 & \text{if } a_i \in \Gamma_h, \\ v(a_i) & \text{otherwise.} \end{cases} \quad (\text{IV.33})$$

So we can write,

$$\boxed{\inf_{v_h \in V_h} |u - v_h|_{H^1(\Omega_h)} \leq |u - \Pi_h^0 u|_{H^1(\Omega_h)} \leq |u - \Pi_h u|_{H^1(\Omega_h)} + |\Pi_h u - \Pi_h^0 u|_{H^1(\Omega_h)}}. \quad (\text{IV.34})$$

Each right terms of inequality (IV.34) is then bounded as follows.

• **Boundedness of $|u - \Pi_h u|_{H^1(\Omega_h)}$**

The interpolation theory (e.g. [Cia78]) gives an estimate of $v - \Pi_h v$ on any Q_1 finite element K and for any function $v \in H^2(K)$,

$$|v - \Pi_h v|_{H^1(K)} \leq C \frac{h_K^2}{\rho_K} |v|_{H^2(K)}, \quad (\text{IV.35})$$

Then, for $u \in H^2(\Omega) \cap V$,

$$|u - \Pi_h u|_{H^1(\Omega_h)} = \left(\sum_{K \in \mathcal{T}_h} |u - \Pi_h u|_{H^1(K)}^2 \right)^{1/2} \leq C h \max_{K \in \mathcal{T}_h} \left(\frac{h_K}{\rho_K} \right) |u|_{H^2(\Omega_h)}.$$

Using the regularity of $(\mathcal{T}_h)_h$

$$\boxed{|u - \Pi_h u|_{H^1(\Omega_h)} \leq C h |u|_{H^2(\Omega)}} \quad (\text{IV.36})$$

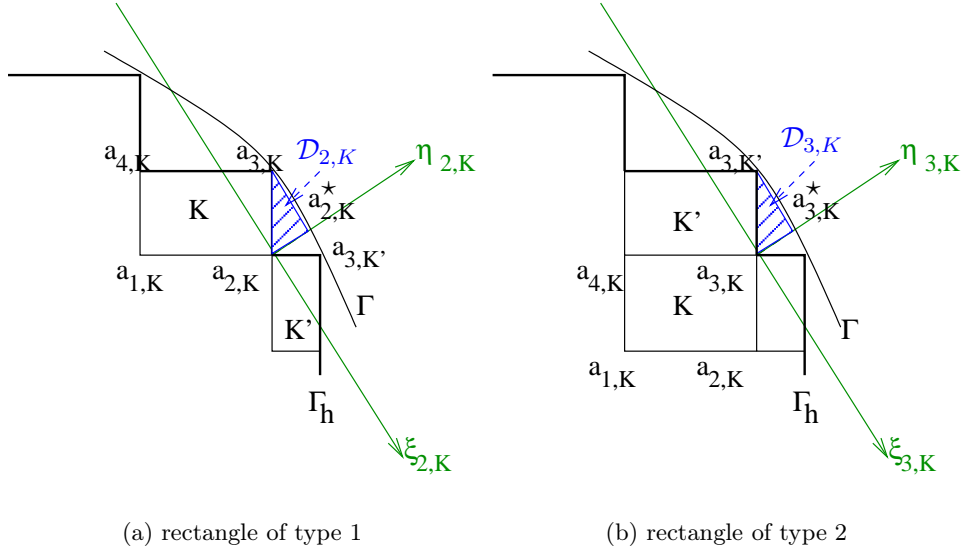
• **Boundedness of $|\Pi_h u - \Pi_h^0 u|_{H^1(\Omega_h)}$**

By definition, the function $\Pi_h u - \Pi_h^0 u$ does not vanish on the rectangles $K \in \partial \mathcal{T}_h^0$ only. For sake of clarity, we suppose that each rectangle $K \in \partial \mathcal{T}_h^0$ has either 2 sides lying on Γ_h (rectangle of type 1) or a node on Γ_h only (rectangle of type 2). For each $K \in \partial \mathcal{T}_h^0$ the same notations as in the proof of Lemma IV.4 are used, completed by the following notations (see Fig. IV.4):

- the vertices $a_{i,K}$, $1 \leq i \leq 4$ of the rectangle K are such that the sides $[a_{2,K} a_{3,K}]$ and $[a_{3,K} a_{4,K}]$ are located on Γ_h for a rectangle of type 1, the point $a_{3,K}$ is located on Γ_h for a rectangle of type 2;
- for i such that $a_{i,K} \in \Gamma_h \setminus \Gamma$, let $\mathcal{D}_{i,K}$ be the triangle delimited by the sides $[a_{i,K} a_{i,K}^*]$, $[a_{i,K}^* a_{j,K'}]$ and $[a_{i,K} a_{j,K'}]$, where $a_{j,K'}$ denotes a node belonging to $\Gamma_h \cap \Gamma$ which is a direct neighbor of $a_{i,K}^*$. Among the direct neighbors of $a_{i,K}^*$, the node $a_{j,K'}$ is chosen such that the measure of the triangle $\mathcal{D}_{i,K}$ is as large as possible. As Ω is convex, $\mathcal{D}_{i,K} \subset (\Omega \setminus \Omega_h)$.

For any rectangle $K \in \partial \mathcal{T}_h^0$ of type 1, $(\Pi_h u - \Pi_h^0 u)$ is defined by :

$$\begin{aligned} & \bullet (\Pi_h u - \Pi_h^0 u)|_K \in Q_1(K). \\ & \bullet \begin{cases} (\Pi_h u - \Pi_h^0 u)(a_i) = 0 & \text{if } i = 1 \text{ or } 3, \\ (\Pi_h u - \Pi_h^0 u)(a_i) = u(a_i) & \text{if } i = 2 \text{ or } 4. \end{cases} \end{aligned}$$


 Figure IV.4: Notations for the two types of rectangles $K \in \partial\mathcal{T}_h^0$.

Then,

$$(\Pi_h u - \Pi_h^0 u)|_K = u(a_2)q_2 + u(a_4)q_4. \quad (\text{IV.37})$$

For a rectangle K of type 2, we have :

$$(\Pi_h u - \Pi_h^0 u)|_K = u(a_3)q_3. \quad (\text{IV.38})$$

For any $K \in \partial\mathcal{T}_h^0$, the estimation of $|\Pi_h u - \Pi_h^0 u|_{H^1(K)}$ is given by bounding the term $|u(a_i)q_i|_{H^1(K)}$ for a node $a_i \in \Gamma_h \setminus \Gamma$.

One focuses on the product $u(a_2)q_2$ for a rectangle K of type 1. For sake of clarity, let ξ and η denote the axis of the orthonormal basis (a_2, ξ_2, η_2) .

We have

$$|u(a_2)q_2|_{H^1(K)} \leq |u(a_2)| |q_2|_{H^1(K)}.$$

As

$$u(a_2) = u(a_2^*) + \int_{a_2^*}^{a_2} \frac{\partial u}{\partial \eta}(\xi, \eta) d\eta,$$

the definition of the problem (IV.1) gives

$$u(a_2) = \int_{a_2^*}^{a_2} \frac{\partial u}{\partial \eta}(\xi, \eta) d\eta.$$

Thanks to Cauchy-Schwarz inequality,

$$|u(a_2)| \leq |a_2 a_2^*|^{1/2} \left\| \frac{\partial u}{\partial \eta} \right\|_{L^2([a_2, a_2^*])} \quad (\text{IV.39})$$

We apply the trace inequality (Lemma IV.3) to $\frac{\partial u}{\partial \eta}$ on the edge $[a_2 a_2^*]$ of the triangle $\mathcal{D}_{2,K}$.

$$\left\| \frac{\partial u}{\partial \eta} \right\|_{L^2([a_2, a_2^*])} \leq C \left(\frac{|a_2 a_2^*|}{\text{meas}(\mathcal{D}_{2,K})} \right)^{1/2} \left(\left\| \frac{\partial u}{\partial \eta} \right\|_{L^2(\mathcal{D}_{2,K})} + h_K \left| \frac{\partial u}{\partial \eta} \right|_{H^1(\mathcal{D}_{2,K})} \right).$$

By construction of the regular semi-conforming mesh and since Ω is convex, the measure of \mathcal{O}_K is of order h^2 . Then, the measure of triangle $\mathcal{D}_{i,K}$ can be bounded by

$$\text{meas}(\mathcal{D}_{i,K}) \geq Ch^2.$$

The property (IV.11) yields

$$|u(a_2)| \leq C \left(|u|_{H^1(\mathcal{D}_{2,K})} + h_K |u|_{H^2(\mathcal{D}_{2,K})} \right). \quad (\text{IV.40})$$

Using the expression of each q_i , $1 \leq i \leq 4$, on a rectangle K , we can show that

$$\forall K \in \mathcal{T}_h, \forall 1 \leq i \leq 4, |q_i|_{H^1(K)} \leq C \frac{h_K}{\varrho_K}, \quad (\text{IV.41})$$

with $C = \sqrt{\frac{1}{3}}$.

For each $K \in \partial \mathcal{T}_h^0$ of type 1 (resp. type 2), we have

$$\begin{aligned} |\Pi_h u - \Pi_h^0 u|_{H^1(K)} &\leq \left(C_1 \left(|u|_{H^1(\mathcal{D}_{2,K})} + h_K |u|_{H^2(\mathcal{D}_{2,K})} \right) + C_2 \left(|u|_{H^1(\mathcal{D}_{4,K})} + h_K |u|_{H^2(\mathcal{D}_{4,K})} \right) \right) \frac{h_K}{\varrho_K} \\ &\quad (\text{resp. } |\Pi_h u - \Pi_h^0 u|_{H^1(K)} \leq C \left(|u|_{H^1(\mathcal{D}_{3,K})} + h_K |u|_{H^2(\mathcal{D}_{3,K})} \right) \frac{h_K}{\varrho_K}.) \end{aligned}$$

Summing over all $K \in \partial \mathcal{T}_h^0$ and using the regularity of $(\mathcal{T}_h)_h$ lead to

$$|\Pi_h u - \Pi_h^0 u|_{H^1(\Omega_h)} \leq C \left(|u|_{H^1(\Omega \setminus \Omega_h)} + h |u|_{H^2(\Omega \setminus \Omega_h)} \right).$$

Thanks to Lemma IV.4, we obtain

$$|\Pi_h u - \Pi_h^0 u|_{H^1(\Omega_h)} \leq C \left(h^{1/2} \|u\|_{H^2(\Omega)} + h |u|_{H^2(\Omega \setminus \Omega_h)} \right).$$

To finish,

$$\boxed{|\Pi_h u - \Pi_h^0 u|_{H^1(\Omega_h)} \leq Ch^{1/2} \|u\|_{H^2(\Omega)}} \quad (\text{IV.42})$$

Combining the bounds (IV.36) and (IV.42), inequality (IV.34) yields

$$\inf_{v_h \in V_h} |u - v_h|_{H^1(\Omega_h)} \leq Ch^{1/2} \|u\|_{H^2(\Omega)}. \quad (\text{IV.43})$$

This concludes the proof of (IV.22).

Remark. Combining equation (IV.19) to estimations (IV.22) and (IV.25) lead to the following estimate

$$\boxed{|u - \tilde{u}_h|_{H^1(\Omega)} \leq Ch^{1/2} \|u\|_{H^2(\Omega)}} \quad (\text{IV.44})$$

As usual, for the L^2 -norm error estimate, we suppose the regularity of the dual problem (\mathcal{P}^*). From (IV.20), taking v equal to $u - \tilde{u}_h$, we can write

$$a(u - \tilde{u}_h, \varphi_g) = \int_{\Omega} g(u - \tilde{u}_h) dx. \quad (\text{IV.45})$$

Combining the variational formulation (IV.2) and (IV.14) lead to

$$a(u - \tilde{u}_h, \tilde{v}_h) = 0 \quad \forall \tilde{v}_h \in \tilde{V}_h \subset V,$$

Hence $\forall \tilde{\varphi}_h \in \tilde{V}_h$,

$$a(u - \tilde{u}_h, \varphi_g - \tilde{\varphi}_h) = \int_{\Omega} g(u - \tilde{u}_h) dx. \quad (\text{IV.46})$$

As

$$\|u - \tilde{u}_h\|_{L^2(\Omega)} = \sup_{\substack{g \in L^2(\Omega) \\ g \neq 0}} \frac{\int_{\Omega} g(u - \tilde{u}_h) dx}{\|g\|_{L^2(\Omega)}}, \quad (\text{IV.47})$$

the continuity of the bilinear form $a(\cdot, \cdot)$ gives the inequality of Aubin-Nitsche (see [Aub67, Nit68, Cia78]) for $u - \tilde{u}_h \in V$

$$\|u - \tilde{u}_h\|_{L^2(\Omega)} \leq M |u - \tilde{u}_h|_{H^1(\Omega)} \sup_{\substack{g \in L^2(\Omega) \\ g \neq 0}} \inf_{\tilde{\varphi}_h \in \tilde{V}_h} \frac{|\varphi_g - \tilde{\varphi}_h|_{H^1(\Omega)}}{\|g\|_{L^2(\Omega)}}. \quad (\text{IV.48})$$

Using the same proof as to find estimations (IV.43) and (IV.44), we obtain

$$\inf_{\tilde{\varphi}_h \in \tilde{V}_h} |\varphi_g - \tilde{\varphi}_h|_{H^1(\Omega)} \leq Ch^{1/2} \|\varphi_g\|_{H^2(\Omega)},$$

The regularity of the dual problem (\mathcal{P}^*) leads to

$$\|u - \tilde{u}_h\|_{L^2(\Omega)} \leq Ch^{1/2} |u - \tilde{u}_h|_{H^1(\Omega)}. \quad (\text{IV.49})$$

Hence, using (IV.44)

$$\boxed{\|u - \tilde{u}_h\|_{L^2(\Omega)} \leq Ch \|u\|_{H^2(\Omega)}}. \quad (\text{IV.50})$$

As $\Omega_h \subset \Omega$ and $\tilde{u}_h|_{\Omega_h} = u_h$, this concludes the proof. \square

Remark. *The following step could be to consider a structured regular Q_1 non-boundary fitted mesh (mainly a uniform Cartesian mesh) which is **strictly interior** to the domain Ω . In this case, the solution u_h can also be extended by zero in $\Omega \setminus \Omega_h$, and then the Céa Lemma is the same as in the semi-conforming case. The solution u have to be estimated on all the nodes of the boundary Γ_h . Since all these boundary nodes are interior to Ω , the demonstration of the error convergence is very similar to the previous one. So we will directly study the general nonconforming case.*

IV.2.2.c Nonconforming mesh

Definition IV.3 (Nonconforming mesh). A mesh $\mathcal{T}_h = \{K\}$ is denoted as nonconforming to Ω if

- i) The open bounded domain Ω is approximated by the open polygonal domain Ω_h such that $\bar{\Omega}_h = \bigcup_{K \in \mathcal{T}_h} K$ with usual assumptions on K (see e.g. [Cia78]).
- ii) The approximate domain Ω_h is not boundary-fitted to Ω (see Fig. IV.1).

As the approximate domain Ω_h is not boundary-fitted to Ω , the discretization space V_h related to Ω_h is not a subspace of V (see problem (\mathcal{P}) -Eq.(IV.2)). The terminology *nonconforming* used here comes from the analogy with an adapted mesh to Ω composed by finite elements that are not in $\mathcal{C}^0(\bar{\Omega})$ implying $V_h \not\subset V$ too (see e.g. the Wilson's brick in [Cia78]).

Remark. A semi-conforming mesh (cf. Definition IV.2) is a particular case of nonconforming meshes.

We want to discretize the original domain Ω with a structured regular nonconforming mesh \mathcal{T}_h (e.g. a uniform Cartesian mesh) composed by Q_1 rectangular finite elements K , such that if h is the mesh diameter, the approximate domains $(\Omega_h)_h$ verify

$$\text{meas}((\Omega \cup \Omega_h) \setminus (\Omega \cap \Omega_h)) = \mathcal{O}(h).$$

The domain Ω being supposed to be regular, there exists a constant C depending on the curvature of Γ only, such that

$$\forall x \in \Gamma_h \cap \partial K, \quad \text{dist}(x, \Gamma) \leq Ch_K, \quad (\text{IV.51})$$

where $\Gamma_h = \partial\Omega_h$.

The boundary Γ of Ω is supposed to be Lipschitz-continuous, then there exists (see e.g. [Lio62] or [Neč67]) an extension operator

$$E : H^2(\Omega) \rightarrow H^2(\mathbb{R}^d),$$

such that $\forall v \in H^2(\Omega)$, the function $Ev \in H^2(\mathbb{R}^d)$ verifies $Ev|_{\Omega} = v$. Moreover, the operator E is continuous

$$\exists C(\Omega) \text{ such that, } \forall v \in H^2(\Omega), \quad \|Ev\|_{H^2(\mathbb{R}^d)} \leq C(\Omega) \|v\|_{H^2(\Omega)}. \quad (\text{IV.52})$$

Let $\tilde{\Omega}$ be an open bounded domain such that

$$\Omega \subset \tilde{\Omega} \quad \text{and} \quad \forall h, \quad \Omega_h \subset \tilde{\Omega}.$$

Assume that the solution u of the problem (\mathcal{P}) belongs to $H^2(\Omega) \cap H_0^1(\Omega)$. Let $\tilde{u} = Eu|_{\tilde{\Omega}}$ be an extension of the function u in $\tilde{\Omega}$. Then $\tilde{u} \in H^2(\tilde{\Omega})$ and thanks to (IV.52):

$$\forall h, \quad \|\tilde{u}\|_{H^2(\Omega_h)} \leq \|\tilde{u}\|_{H^2(\tilde{\Omega})} \leq C \|u\|_{H^2(\Omega)}. \quad (\text{IV.53})$$

We consider the following variational problem (\mathcal{P}_h) on Ω_h : find $u_h \in V_h$ such that

$$(\mathcal{P}_h) \quad \forall v_h \in V_h, \quad \sum_{i,j=1}^2 \int_{\Omega_h} \tilde{a}_{ij} \frac{\partial u_h}{\partial x_j} \frac{\partial v_h}{\partial x_i} dx = \int_{\Omega_h} \tilde{f} v_h dx, \quad (\text{IV.54})$$

where $\tilde{\mathbf{a}}$ (resp. \tilde{f}) is an extension of \mathbf{a} (resp. f) in $L^\infty(\tilde{\Omega})$ (resp. $L^2(\tilde{\Omega})$). Moreover $\tilde{\mathbf{a}}$ verifies the ellipticity assumptions on $\tilde{\Omega}$. Then using Lax-Milgram's theorem, the solution $u_h \in V_h$ of the equation (IV.54) exists and is unique.

Remark. The extension \tilde{f} of f in $L^2(\tilde{\Omega})$ may be chosen as:

$$\tilde{f} = -\operatorname{div}(\tilde{\mathbf{a}}\nabla\tilde{u}).$$

However in practical computations, the function u is the unknown of the problem (\mathcal{P}) and then its extension \tilde{u} is not known either. So the extension \tilde{f} of f , which is a given data of the variational problem (\mathcal{P}_h) , cannot be defined by the previous equation. In the sequel we will denote by \hat{f} the particular extension of f verifying

$$\hat{f} = -\operatorname{div}(\tilde{\mathbf{a}}\nabla\tilde{u}).$$

Lemma IV.5. There exists a constant $C > 0$ such that

$$|\tilde{u} - u_h|_{H^1(\Omega_h)} \leq C \left(\inf_{v_h \in V_h} |\tilde{u} - v_h|_{H^1(\Omega_h)} + \sup_{w_h \in V_h} \frac{\left| \sum_{i,j=1}^2 \int_{\Omega_h} \tilde{a}_{ij} \frac{\partial \tilde{u}}{\partial x_j} \frac{\partial w_h}{\partial x_i} dx - \int_{\Omega_h} \tilde{f} w_h dx \right|}{|w_h|_{H^1(\Omega_h)}} \right). \quad (\text{IV.55})$$

Proof. For any $v_h \in V_h$, the V_h -ellipticity property leads to

$$\begin{aligned} \tilde{a}_0 |u_h - v_h|_{H^1(\Omega_h)}^2 &\leq \sum_{i,j=1}^2 \int_{\Omega_h} \tilde{a}_{ij} \frac{\partial(u_h - v_h)}{\partial x_j} \frac{\partial(u_h - v_h)}{\partial x_i} dx, \\ &\leq \sum_{i,j=1}^2 \int_{\Omega_h} \tilde{a}_{ij} \frac{\partial(\tilde{u} - v_h)}{\partial x_j} \frac{\partial(u_h - v_h)}{\partial x_i} dx + \sum_{i,j=1}^2 \int_{\Omega_h} \tilde{a}_{ij} \frac{\partial(u_h - \tilde{u})}{\partial x_j} \frac{\partial(u_h - v_h)}{\partial x_i} dx, \\ &\leq C |\tilde{u} - v_h|_{H^1(\Omega_h)} |u_h - v_h|_{H^1(\Omega_h)} + \int_{\Omega_h} \tilde{f}(u_h - v_h) dx - \sum_{i,j=1}^2 \int_{\Omega_h} \tilde{a}_{ij} \frac{\partial \tilde{u}}{\partial x_j} \frac{\partial(u_h - v_h)}{\partial x_i} dx, \end{aligned}$$

where \tilde{a}_0 is the V_h -ellipticity constant.

Then,

$$|u_h - v_h|_{H^1(\Omega_h)} \leq C \left(|\tilde{u} - v_h|_{H^1(\Omega_h)} + \sup_{w_h \in V_h} \frac{\left| \sum_{i,j=1}^2 \int_{\Omega_h} \tilde{a}_{ij} \frac{\partial \tilde{u}}{\partial x_j} \frac{\partial w_h}{\partial x_i} dx - \int_{\Omega_h} \tilde{f} w_h dx \right|}{|w_h|_{1,\Omega_h}} \right).$$

The triangular inequality concludes the proof. \square

Remark. The inequality of Lemma IV.5 is analogous to the second Strang's lemma (see [Str72, SF73, Cia78]) in our case of nonconforming elements.

Theorem IV.6 (Error estimate with a Q_1 nonconforming mesh - Dirichlet case).

Let Ω and $\tilde{\Omega}$ be two regular convex open bounded domains such that $\Omega \subset \tilde{\Omega}$. Let u be the solution to the Dirichlet problem (\mathcal{P}) (see Eq. (IV.2)) and u_h be the solution to the discrete problem (\mathcal{P}_h) (see Eq. (IV.54)). The solution u is supposed to belong to $H^2(\Omega) \cap H_0^1(\Omega)$. Thus, there exists an extension $\tilde{u} \in H^2(\tilde{\Omega})$ of u such that $\|\tilde{u}\|_{H^2(\tilde{\Omega})} \leq C(\Omega)\|u\|_{H^2(\Omega)}$. Let \tilde{f} denote a L^2 -extension of f in $\tilde{\Omega}$ and $\tilde{\mathbf{a}} \in W^{1,\infty}(\tilde{\Omega})$ be an extension of \mathbf{a} that verifies ellipticity assumptions. Let introduce

$$\hat{f} = -\operatorname{div}(\tilde{\mathbf{a}}\nabla\tilde{u}) \in L^2(\tilde{\Omega}).$$

For any regular family $(\mathcal{T}_h)_h$ of Q_1 nonconforming meshes to Ω such that

$$\Omega_h \subset \tilde{\Omega} \quad \text{and} \quad \operatorname{meas}((\Omega \cup \Omega_h) \setminus (\Omega \cap \Omega_h)) = \mathcal{O}(h),$$

there exists some constants C such that

$$|\tilde{u} - u_h|_{H^1(\Omega_h)} \leq Ch^{1/2}(\|u\|_{H^2(\Omega)} + h^{1/2}\|\hat{f} - \tilde{f}\|_{L^2(\Omega_h)}), \quad (\text{IV.56})$$

and if the dual problem $(\tilde{\mathcal{P}}_h^*)$ (see Eq. (IV.64)) on the convex hull $\tilde{\Omega}_h$ of $\Omega \cup \Omega_h$ is regular,

$$\|\tilde{u} - u_h\|_{L^2(\Omega_h)} \leq Ch(\|u\|_{H^2(\Omega)} + h^{1/2}\|\hat{f} - \tilde{f}\|_{L^2(\Omega_h)}). \quad (\text{IV.57})$$

Proof. We begin by estimate the two terms of inequality (IV.55).

• **Boundedness of** $\inf_{v_h \in V_h} |\tilde{u} - v_h|_{1,\Omega_h}$

Following the same idea as in the semi-conforming case, the first term of the right hand side of (IV.55) is bounded by

$$\inf_{v_h \in V_h} |\tilde{u} - v_h|_{H^1(\Omega_h)} \leq |\tilde{u} - \Pi_h^0 \tilde{u}|_{H^1(\Omega_h)} \leq |\tilde{u} - \Pi_h \tilde{u}|_{H^1(\Omega_h)} + |\Pi_h \tilde{u} - \Pi_h^0 \tilde{u}|_{H^1(\Omega_h)},$$

where Π_h is the Lagrange Q_1 interpolation operator over (\mathcal{T}_h) (see Eq. (IV.31) and [Cia78]) and Π_h^0 is defined by Eqs. (IV.32-IV.33).

By definition of Π_h , we have

$$|\tilde{u} - \Pi_h \tilde{u}|_{H^1(\Omega_h)} \leq Ch|\tilde{u}|_{H^2(\Omega_h)}.$$

The function $\Pi_h u - \Pi_h^0 u$ does not vanish on the rectangles $K \in \partial\mathcal{T}_h^0$ only.

$$\forall K \in \partial\mathcal{T}_h^0, \quad (\Pi_h \tilde{u} - \Pi_h^0 \tilde{u})|_K = \sum_{i; a_i \in \Gamma_h} \tilde{u}(a_i) q_i.$$

Then

$$|\Pi_h \tilde{u} - \Pi_h^0 \tilde{u}|_{H^1(K)} \leq \sum_{i; a_i \in \Gamma_h} |\tilde{u}(a_i)| |q_i|_{H^1(K)}$$

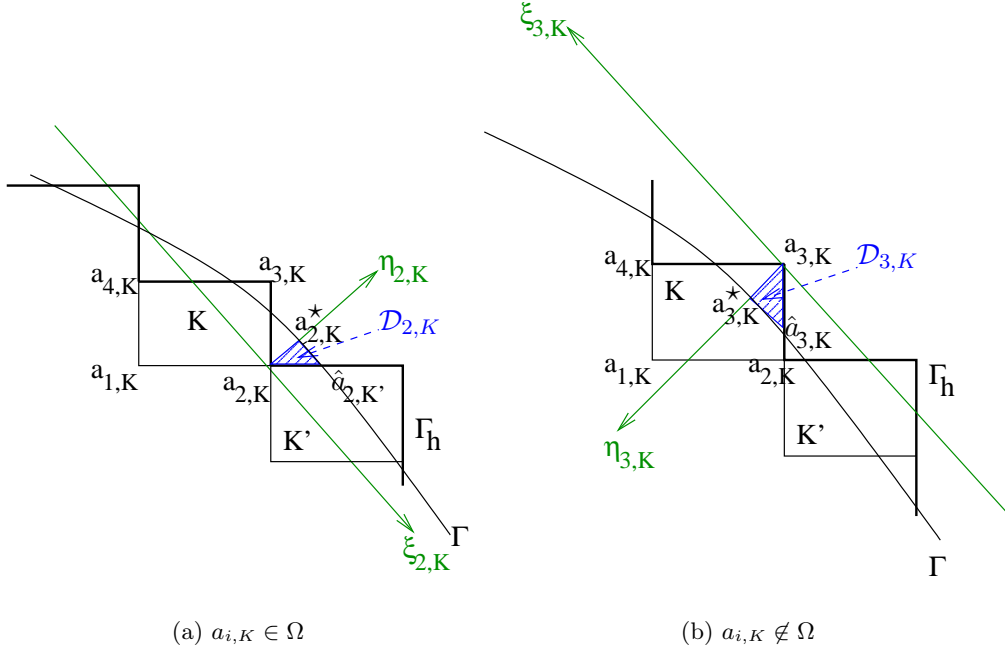
From estimate (IV.41), we have

$$\forall K \in \mathcal{T}_h, \quad \forall 1 \leq i \leq 4, \quad |q_i|_{H^1(K)} \leq C \frac{h_K}{\rho_K}$$

For each $K \in \partial\mathcal{T}_h^0$, we use the same notations as these introduced in the proof of Lemma IV.4.

For each $a_{i,K} \in \Gamma_h$, the point $\hat{a}_{i,K'}$ is defined such that (see Fig. IV.5):

- the triangle $\mathcal{D}_{i,K}$, delimited by the sides $[a_{i,K} a_{i,K}^*]$, $[a_{i,K}^* \hat{a}_{i,K'}]$ and $[a_{i,K} \hat{a}_{i,K'}]$, is included in $\Omega \setminus \Omega_h$ (resp. in $\Omega_h \setminus \Omega$) for $a_{i,K} \in \Omega$ (resp. $a_{i,K} \notin \Omega$),

Figure IV.5: Definition of $\hat{a}_{i,K'}$ according to the position of $a_{i,K}$.

- the ratio $\frac{|a_{i,K} a_{i,K}^*|^2}{\text{meas}(\mathcal{D}_{i,K})} \leq C$ independently of h .

By definition of the regular nonconforming mesh $(\mathcal{T}_h)_h$ and since Ω is convex, such a point $\hat{a}_{i,K'}$ always exists.

By the same reasoning as in the semi-conforming case, we can prove that:

$$|\tilde{u}(a_i)| \leq C \left(|u|_{H^1(\mathcal{D}_{i,K})} + h_K |u|_{H^2(\mathcal{D}_{i,K})} \right).$$

Let Ω_i be the open defined by:

$$\Omega_i = (\Omega \cup \Omega_h) \setminus (\Omega \cap \Omega_h). \quad (\text{IV.58})$$

Then,

$$|\Pi_h \tilde{u} - \Pi_h^0 \tilde{u}|_{H^1(\Omega_h)} \leq C \left(|\tilde{u}|_{H^1(\Omega_i)} + h |\tilde{u}|_{H^2(\Omega_i)} \right).$$

Moreover, by the same proof as in Lemma IV.4, we obtain that

$$|\tilde{u}|_{H^1(\Omega \setminus \Omega_h)} \leq Ch^{1/2} \|\tilde{u}\|_{H^2(\tilde{\Omega})}, \quad (\text{IV.59})$$

$$|\tilde{u}|_{H^1(\Omega_h \setminus \Omega)} \leq Ch^{1/2} \|\tilde{u}\|_{H^2(\tilde{\Omega})}. \quad (\text{IV.60})$$

Hence,

$$|\tilde{u}|_{H^1(\Omega_i)} \leq Ch^{1/2} \|\tilde{u}\|_{H^2(\tilde{\Omega})}. \quad (\text{IV.61})$$

Finally,

$$\boxed{|\Pi_h \tilde{u} - \Pi_h^0 \tilde{u}|_{H^1(\Omega_h)} \leq Ch^{1/2} \|\tilde{u}\|_{H^2(\tilde{\Omega})}.}$$

The extension theorem (IV.52) gives

$$\boxed{\inf_{v_h \in V_h} |\tilde{u} - v_h|_{H^1(\Omega_h)} \leq Ch^{1/2} \|u\|_{H^2(\Omega)}} \quad (\text{IV.62})$$

• **Boundedness of** $\sup_{w_h \in V_h} \frac{\left| \sum_{i,j=1}^2 \int_{\tilde{\Omega}_h} \tilde{a}_{ij} \frac{\partial \tilde{u}}{\partial x_j} \frac{\partial w_h}{\partial x_i} dx - \int_{\Omega_h} \tilde{f} w_h dx \right|}{|w_h|_{H^1(\Omega_h)}}$

Let $D_h(\tilde{u}, w_h) = \sum_{i,j=1}^2 \int_{\tilde{\Omega}_h} \tilde{a}_{ij} \frac{\partial \tilde{u}}{\partial x_j} \frac{\partial w_h}{\partial x_i} dx - \int_{\Omega_h} \tilde{f} w_h dx, \quad \forall w_h \in V_h \subset H_0^1(\Omega_h).$

The Green formula leads to

$$\begin{aligned} \sum_{i,j=1}^2 \int_{\tilde{\Omega}_h} \tilde{a}_{ij} \frac{\partial \tilde{u}}{\partial x_j} \frac{\partial w_h}{\partial x_i} dx &= - \int_{\Omega_h} \operatorname{div}(\tilde{\mathbf{a}} \cdot \nabla \tilde{u}) w_h dx, \\ &= \int_{\Omega_h} \hat{f} w_h dx. \end{aligned}$$

Since \hat{f} and \tilde{f} are extensions of f in $\tilde{\Omega}$, we obtain:

$$D_h(\tilde{u}, w_h) = \int_{\Omega_h \setminus \Omega} (\hat{f} - \tilde{f}) w_h, \quad \forall w_h \in V_h \subset H_0^1(\Omega_h).$$

According to Cauchy-Schwartz inequality as well as generalized Poincaré inequality (IV.28) on $\Omega_h \setminus \Omega$, we obtain

$$D_h(\tilde{u}, w_h) \leq Ch \|\hat{f} - \tilde{f}\|_{L^2(\Omega_h \setminus \Omega)} |w_h|_{H^1(\Omega_h \setminus \Omega)} \quad (\text{IV.63})$$

To conclude, the estimate (IV.56) is obtained combining (IV.62) and (IV.63) in inequality of Lemma IV.5.

Concerning the L^2 -norm estimate, we introduce the open bounded domain $\tilde{\tilde{\Omega}}_h$ which is the convex hull of $\Omega \cup \Omega_h$ (cf. Figure IV.6). By definition $\tilde{\tilde{\Omega}}_h \subset \tilde{\Omega}$. The dual problem $(\tilde{\mathcal{P}}_h^*)$ is then defined on $\tilde{\tilde{\Omega}}_h$ by: given \tilde{g} in $L^2(\tilde{\tilde{\Omega}}_h)$, find $\tilde{\varphi}_g$ in $H_0^1(\tilde{\tilde{\Omega}}_h)$ such that

$$(\tilde{\mathcal{P}}_h^*) \quad \forall \tilde{v} \in H_0^1(\tilde{\tilde{\Omega}}_h), \quad \sum_{i,j=1}^2 \int_{\tilde{\tilde{\Omega}}_h} \tilde{a}_{ij} \frac{\partial \tilde{v}}{\partial x_j} \frac{\partial \tilde{\varphi}_g}{\partial x_i} dx = \int_{\tilde{\tilde{\Omega}}_h} \tilde{g} \tilde{v} dx \quad (\text{IV.64})$$

Hypothesis (\mathcal{H}) and assumptions on the extended coefficients $\tilde{\mathbf{a}}$ and \tilde{f} enable us to conclude that the problem $(\tilde{\mathcal{P}}_h^*)$ admits a unique solution $\tilde{\varphi}_g \in H^2(\tilde{\tilde{\Omega}}_h) \cap H_0^1(\tilde{\tilde{\Omega}}_h)$.

The dual problem $(\tilde{\mathcal{P}}_h^*)$ is supposed to be regular, that implies

$$\|\tilde{\varphi}_g\|_{H^2(\tilde{\tilde{\Omega}}_h)} \leq C^* \|\tilde{g}\|_{L^2(\tilde{\tilde{\Omega}}_h)} \quad (\text{IV.65})$$

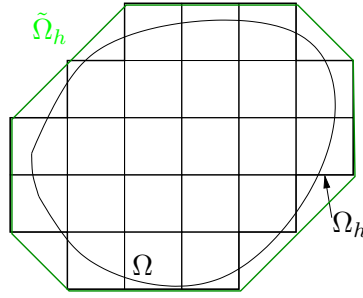


Figure IV.6: Convex hull $\tilde{\Omega}_h$ of $\Omega \cup \Omega_h$

Remark. Let us remark that the constant $C^* = C^*(\tilde{\Omega}_h)$ of inequality (IV.65) depends only on the diameter of $\tilde{\Omega}_h$ (see [Gri85]) such that

$$C^*(\tilde{\Omega}_h)^2 \leq 1 + K(\tilde{\Omega}_h)^2 + K(\tilde{\Omega}_h)^4$$

where $K(\tilde{\Omega}_h)$ is the constant of the Poincaré inequality (see e.g. [Neč67]) which depends only on the diameter of $\tilde{\Omega}_h$. Since the diameter of $\tilde{\Omega}_h$ tends to the diameter of Ω when h tends to 0, this constant C^* may be bounded independently of h .

Let \hat{u} et \hat{u}_h be the functions of $H_0^1(\tilde{\Omega}_h)$ defined:

$$\hat{u} = \begin{cases} u & \text{in } \Omega \\ 0 & \text{in } \tilde{\Omega}_h \setminus \Omega \end{cases}, \quad \hat{u}_h = \begin{cases} u_h & \text{in } \Omega_h \\ 0 & \text{in } \tilde{\Omega}_h \setminus \Omega_h \end{cases}$$

Then the function $\hat{u} - \hat{u}_h$ vanishes on $\tilde{\Omega}_h \setminus (\Omega \cup \Omega_h)$. Introducing $\hat{u} - \hat{u}_h$ as test function in the dual problem $(\tilde{\mathcal{P}}_h^*)$ yields

$$\sum_{i,j=1}^2 \int_{\Omega \cup \Omega_h} \tilde{a}_{ij} \frac{\partial(\hat{u} - \hat{u}_h)}{\partial x_j} \frac{\partial \tilde{\varphi}_g}{\partial x_i} dx = \int_{\Omega \cup \Omega_h} \tilde{g}(\hat{u} - \hat{u}_h) dx. \tag{IV.66}$$

Let $\Omega_h^{int} = \{\cup K; K \subset (\Omega \cap \Omega_h)\}$ be the interior domain to $(\Omega \cap \Omega_h)$ of boundary Γ_h^{int} (cf. Fig. IV.7).

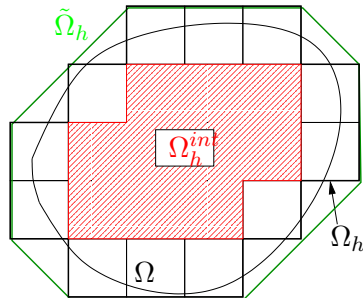


Figure IV.7: Definition of the domain $\Omega_h^{int} \subset (\Omega \cap \Omega_h)$

By definition of Ω_h^{int} and of $\tilde{\Omega}_h$, the following property holds

$$\forall x \in \Gamma_h^{int} \cap \partial K, \quad \text{dist}(x, \partial \tilde{\Omega}_h) \leq Ch_K \tag{IV.67}$$

Let $\Pi_h^{0,int}$ be the Q_1 interpolation operator Π_h^0 introduced in Eqs. (IV.32-IV.33) defined on Ω_h^{int} :

$$\forall K \in \mathcal{T}_h, K \subset \Omega_h^{int}, \quad \Pi_h^{0,int} v|_K = \sum_{i=1}^4 \tilde{v}(a_i) q_i,$$

with

$$\tilde{v}(a_i) = \begin{cases} 0 & \text{if } a_i \in \Gamma_h^{int}, \\ v(a_i) & \text{otherwise.} \end{cases}$$

Let us still named $\Pi_h^{0,int} \tilde{\varphi}_g$ the extension by 0 on $\tilde{\Omega}_h \setminus \Omega_h^{int}$ of the function $\Pi_h^{0,int} \tilde{\varphi}_g$, then:

$$\begin{aligned} \sum_{i,j=1}^2 \int_{\Omega \cup \Omega_h} \tilde{a}_{ij} \frac{\partial(\hat{u} - \hat{u}_h)}{\partial x_j} \frac{\partial \Pi_h^{0,int} \tilde{\varphi}_g}{\partial x_i} dx &= \sum_{i,j=1}^2 \int_{\Omega_h^{int}} a_{ij} \frac{\partial u}{\partial x_j} \frac{\partial \Pi_h^{0,int} \tilde{\varphi}_g}{\partial x_i} dx \\ &\quad - \sum_{i,j=1}^2 \int_{\Omega_h^{int}} a_{ij} \frac{\partial u_h}{\partial x_j} \frac{\partial \Pi_h^{0,int} \tilde{\varphi}_g}{\partial x_i} dx \end{aligned} \quad (\text{IV.68})$$

The first term of the right hand side (IV.68) is transformed using the Green formula on Ω_h^{int} with $\Pi_h^{0,int} \tilde{\varphi}_g|_{\Gamma_h^{int}} = 0$, while the second term is transformed using the variational problem (\mathcal{P}_h) -Eq.(IV.54) with $\Pi_h^{0,int} \tilde{\varphi}_g|_{\Omega_h} \in V_h$. We finally obtain

$$\sum_{i,j=1}^2 \int_{\Omega \cup \Omega_h} \tilde{a}_{ij} \frac{\partial(\hat{u} - \hat{u}_h)}{\partial x_j} \frac{\partial \Pi_h^{0,int} \tilde{\varphi}_g}{\partial x_i} dx = 0. \quad (\text{IV.69})$$

Hence,

$$\sum_{i,j=1}^2 \int_{\Omega \cup \Omega_h} \tilde{a}_{ij} \frac{\partial(\hat{u} - \hat{u}_h)}{\partial x_j} \frac{\partial(\tilde{\varphi}_g - \Pi_h^{0,int} \tilde{\varphi}_g)}{\partial x_i} dx = \int_{\Omega \cup \Omega_h} \tilde{g}(\hat{u} - \hat{u}_h) dx. \quad (\text{IV.70})$$

As usual, we have

$$\|\hat{u} - \hat{u}_h\|_{L^2(\tilde{\Omega}_h)} = \sup_{\substack{g \in L^2(\tilde{\Omega}_h) \\ g \neq 0}} \frac{\int_{\tilde{\Omega}_h} \tilde{g}(\hat{u} - \hat{u}_h) dx}{\|\tilde{g}\|_{L^2(\tilde{\Omega}_h)}}.$$

The function $(\hat{u} - \hat{u}_h)$ vanishing on $\tilde{\Omega}_h \setminus (\Omega \cup \Omega_h)$, we obtain

$$\|\hat{u} - \hat{u}_h\|_{L^2(\Omega \cup \Omega_h)} = \sup_{\substack{g \in L^2(\tilde{\Omega}_h) \\ g \neq 0}} \frac{\int_{\Omega \cup \Omega_h} \tilde{g}(\hat{u} - \hat{u}_h) dx}{\|\tilde{g}\|_{L^2(\tilde{\Omega}_h)}}. \quad (\text{IV.71})$$

Thanks to the properties of $\tilde{\mathbf{a}}$, Eq. (IV.70) yields

$$\int_{\Omega \cup \Omega_h} \tilde{g}(\hat{u} - \hat{u}_h) \leq C |\hat{u} - \hat{u}_h|_{H^1(\Omega \cup \Omega_h)} |\tilde{\varphi}_g - \Pi_h^{0,int} \tilde{\varphi}_g|_{H^1(\Omega \cup \Omega_h)}. \quad (\text{IV.72})$$

The first term of the right hand side of (IV.72) is bounded thanks to the triangular inequality, inequalities (IV.59-IV.60), the extension property IV.53 and the H^1 error estimate (IV.56)

$$\begin{aligned} |\hat{u} - \hat{u}_h|_{H^1(\Omega \cup \Omega_h)} &\leq |\hat{u} - \tilde{u}|_{H^1(\Omega \cup \Omega_h)} + |\tilde{u} - \hat{u}_h|_{H^1(\Omega \cup \Omega_h)}, \\ &\leq |\tilde{u}|_{H^1(\Omega_h \setminus \Omega)} + |\tilde{u} - u_h|_{H^1(\Omega_h)} + |\tilde{u}|_{H^1(\Omega \setminus \Omega_h)}, \\ &\leq Ch^{1/2}(\|u\|_{2,\Omega} + h^{1/2}\|\hat{f} - \tilde{f}\|_{0,\Omega_h}). \end{aligned} \quad (\text{IV.73})$$

Concerning the second term of Eq. (IV.72), we have:

$$\begin{aligned} |\tilde{\varphi}_g - \Pi_h^{0,int} \tilde{\varphi}_g|_{H^1(\Omega \cup \Omega_h)} &\leq |\tilde{\varphi}_g - \Pi_h^{0,int} \tilde{\varphi}_g|_{H^1(\tilde{\Omega}_h)}, \\ &\leq |\tilde{\varphi}_g - \Pi_h^{0,int} \tilde{\varphi}_g|_{H^1(\Omega_h^{int})} + |\tilde{\varphi}_g - \Pi_h^{0,int} \tilde{\varphi}_g|_{H^1(\tilde{\Omega}_h \setminus \Omega_h^{int})}. \end{aligned}$$

By definition of Ω_h^{int} and $\tilde{\Omega}_h$, inequality (IV.67) and estimation of the error convergence in the semi-conforming case easily yield

$$\forall \tilde{\varphi}_g \in H_0^1(\tilde{\Omega}_h), \quad |\tilde{\varphi}_g - \Pi_h^{0,int} \tilde{\varphi}_g|_{H^1(\Omega_h^{int})} \leq Ch^{1/2} \|\tilde{\varphi}_g\|_{H^2(\tilde{\Omega}_h)}.$$

As previously, by the same proof as in Lemma IV.4, the following bound is obtained

$$\begin{aligned} |\tilde{\varphi}_g - \Pi_h^{0,int} \tilde{\varphi}_g|_{H^1(\tilde{\Omega}_h \setminus \Omega_h^{int})} &= |\tilde{\varphi}_g|_{H^1(\tilde{\Omega}_h \setminus \Omega_h^{int})}, \\ &\leq Ch^{1/2} \|\tilde{\varphi}_g\|_{H^2(\tilde{\Omega}_h)}. \end{aligned}$$

Hence,

$$|\tilde{\varphi}_g - \Pi_h^{0,int} \tilde{\varphi}_g|_{H^1(\Omega \cup \Omega_h)} \leq Ch^{1/2} \|\tilde{\varphi}_g\|_{H^2(\tilde{\Omega}_h)}. \quad (\text{IV.74})$$

Substituting inequalities (IV.73) and (IV.74) into inequality (IV.72) and using the regularity of the dual problem ($\tilde{\mathcal{P}}_h^*$) lead to

$$\boxed{\|\hat{u} - \hat{u}_h\|_{L^2(\Omega \cup \Omega_h)} \leq Ch(\|u\|_{H^2(\Omega)} + h^{1/2}\|\hat{f} - \tilde{f}\|_{L^2(\Omega_h)})} \quad (\text{IV.75})$$

The triangular inequality

$$\|\tilde{u} - u_h\|_{L^2(\Omega_h)} \leq \|\tilde{u} - \hat{u}\|_{L^2(\Omega_h)} + \|\hat{u} - u_h\|_{L^2(\Omega_h)},$$

combined with the generalized Poincaré inequality (IV.30) and the extension theorem (IV.52) conclude the proof. \square

IV.3 Robin problem

IV.3.1 Definition of the problem

We assume the same assumptions on the domain Ω as in section IV.2.1 and the hypothesis (\mathcal{H}). The Robin problem under study writes

$$\begin{cases} -\operatorname{div}(\mathbf{a}\nabla u) &= f & \text{in } \Omega, \\ -(\mathbf{a}\nabla u) \cdot \mathbf{n} &= \alpha u + g & \text{on } \Gamma = \partial\Omega, \end{cases} \quad (\text{IV.76})$$

where \mathbf{n} is the outward unit normal vector on Γ and $0 \leq \alpha \in W^{1,\infty}(\Gamma)$ and $g \in H^{1/2}(\Gamma)$.

Remark. To obtain a solution $u \in H^1(\Omega)$, the assumptions $0 \leq \alpha \in L^\infty(\Gamma)$ and $g \in L^2(\Gamma)$ are sufficient. However to estimate the convergence of the discretization error, the solution must be in $H^2(\Omega)$ and then α and g are assumed to belong to $W^{1,\infty}(\Gamma)$ and $H^{1/2}(\Gamma)$ respectively.

Then, the variational formulation (\mathcal{P}) of (IV.76) is

$$(\mathcal{P}) \quad \text{find } u \in V = H^1(\Omega) \text{ such that } a(u, v) = L(v) \forall v \in V, \quad (\text{IV.77})$$

where

$$\begin{cases} a(u, v) = \sum_{i,j=1}^d \int_{\Omega} a_{ij} \frac{\partial u}{\partial x_j} \frac{\partial v}{\partial x_i} dx + \int_{\Gamma} \alpha u v ds, \\ L(v) = \int_{\Omega} f v dx - \int_{\Gamma} g v ds. \end{cases} \quad (\text{IV.78})$$

Under the hypothesis (\mathcal{H}), with the usual techniques, we prove the continuity of the bilinear form $a(\cdot, \cdot)$ on $V \times V$ and the V -ellipticity. Moreover, the linear form $L(\cdot)$ is continuous on V . Lax-Milgram's theorem enables us to conclude that the solution $u \in V$ to the problem (\mathcal{P}) exists and is unique.

Remark. A Neumann condition is obtained setting $\alpha = 0$ in the problem (IV.76). In this case, an additional compatibility condition is required for the solution u to exist. Then, we usually suppose that the non unique solution belongs to the space of the functions with a zero mean over Ω .

IV.3.2 Nonconforming Q_1 finite element mesh

We assume that the domain $\Omega \in \mathbb{R}^2$ is convex. A finite element discretization with Q_1 rectangular elements is used. The same notations as in section IV.2.2.a are used. For a Robin (or Neumann) problem, the approximation space V_h is defined by

$$V_h = \{v \in C^0(\bar{\Omega}_h); \forall K \in \mathcal{T}_h, v|_K \in Q_1(K)\} \subset H^1(\Omega_h), \quad (\text{IV.79})$$

The space V and V_h are equipped with the H^1 Sobolev norm (on Ω and Ω_h respectively).

We use a nonconforming mesh of Ω (see definition IV.3 - section IV.2.2.c) with the same assumptions as in section IV.2.2.c.

Let $\tilde{\alpha}$ and \tilde{g} denote the lifts in Ω of α and g respectively. Then, we have $0 \leq \tilde{\alpha} \in W^{1,\infty}(\Omega)$ and $\tilde{g} \in H^1(\Omega)$. We still denote by $0 \leq \tilde{\alpha} \in W^{1,\infty}(\tilde{\Omega})$ and $\tilde{g} \in H^1(\tilde{\Omega})$ extensions of these lifts over $\tilde{\Omega}$. The variational problem (\mathcal{P}_h) on Ω_h follows: find $u_h \in V_h$ such that

$$(\mathcal{P}_h) \quad \forall v_h \in V_h, \quad \sum_{i,j=1}^2 \int_{\Omega_h} \tilde{a}_{ij} \frac{\partial u_h}{\partial x_j} \frac{\partial v_h}{\partial x_i} dx + \int_{\Gamma_h} \frac{\tilde{\alpha}}{\epsilon_h} u_h v_h ds = \int_{\Omega_h} \tilde{f} v_h dx - \int_{\Gamma_h} \frac{\tilde{g}}{\epsilon_h} v_h ds, \quad (\text{IV.80})$$

where $\tilde{\mathbf{a}}$ (resp. \tilde{f}) is an extension of \mathbf{a} (resp. f) in $L^\infty(\tilde{\Omega})$ (resp. $L^2(\tilde{\Omega})$). The correction parameter $\epsilon_h > 0$ is piecewise constant on Γ_h and will be precise later. Moreover $\tilde{\mathbf{a}}$ verifies the ellipticity assumptions on $\tilde{\Omega}$. Then, the solution $u_h \in V_h$ of the discrete problem (\mathcal{P}_h) exists and is unique.

Lemma IV.7. *There exists a constant $C > 0$ such that*

$$\|\tilde{u} - u_h\|_{H^1(\Omega_h)} \leq C \left(\inf_{v_h \in V_h} \|\tilde{u} - v_h\|_{H^1(\Omega_h)} + \sup_{w_h \in V_h} \frac{\left| \sum_{i,j=1}^2 \int_{\Omega_h} \tilde{a}_{ij} \frac{\partial \tilde{u}}{\partial x_j} \frac{\partial w_h}{\partial x_i} dx - \int_{\Omega_h} \tilde{f} w_h dx + \int_{\Gamma_h} \frac{\tilde{\alpha} \tilde{u} + \tilde{g}}{\epsilon_h} w_h ds \right|}{\|w_h\|_{H^1(\Omega_h)}} \right). \quad (\text{IV.81})$$

Proof. The proof is the same as for Lemma IV.5. \square

Theorem IV.8 (Error estimate with a Q_1 nonconforming mesh - Robin case).

Let Ω and $\tilde{\Omega}$ be two regular convex open bounded domains such that $\Omega \subset \tilde{\Omega}$. Let u be the solution to the Robin problem (\mathcal{P}) (see Eq. (IV.77)) and u_h be the solution to the problem (\mathcal{P}_h) (see Eq. (IV.80)). The solution u is supposed to belong to $H^2(\Omega)$. Thus, there exists an extension $\tilde{u} \in H^2(\tilde{\Omega})$ of u such that $\|\tilde{u}\|_{H^2(\tilde{\Omega})} \leq C(\Omega)\|u\|_{H^2(\Omega)}$. For any regular family $(\mathcal{T}_h)_h$ of Q_1 nonconforming meshes to Ω such that

$$\Omega_h \subset \tilde{\Omega} \quad \text{and} \quad \text{meas}((\Omega \cup \Omega_h) \setminus (\Omega \cap \Omega_h)) = \mathcal{O}(h),$$

there exist a constant C such that

$$\|\tilde{u} - u_h\|_{H^1(\Omega_h)} \leq Ch^{1/2}(\|u\|_{H^2(\Omega)} + \|f\|_{L^2(\Omega)} + \|\tilde{\alpha}\|_{W^{1,\infty}(\Omega)}\|u\|_{H^1(\Omega)} + \|\tilde{g}\|_{H^1(\Omega)}) \quad (\text{IV.82})$$

Proof. To obtain an estimation of $\|\tilde{u} - u_h\|_{H^1(\Omega_h)}$ we will estimate each of the right hand term of (IV.81).

• **Boundedness of** $\inf_{v_h \in V_h} \|\tilde{u} - v_h\|_{H^1(\Omega_h)}$

If Π_h denotes the Lagrange Q_1 -interpolation operator over (\mathcal{T}_h) , then the usual interpolation property and the extension theorem (IV.52) lead to

$$\inf_{v_h \in V_h} \|\tilde{u} - v_h\|_{H^1(\Omega_h)} \leq \|\tilde{u} - \Pi_h \tilde{u}\|_{H^1(\Omega_h)} \leq Ch\|u\|_{H^2(\Omega)}$$

Now, we want to estimate the second term of the right hand side of (IV.81). Let

$$D_h(\tilde{u}, w_h) = \sum_{i,j=1}^2 \int_{\Omega_h} \tilde{a}_{ij} \frac{\partial \tilde{u}}{\partial x_j} \frac{\partial w_h}{\partial x_i} dx - \int_{\Omega_h} \tilde{f} w_h dx + \int_{\Gamma_h} \frac{\tilde{\alpha} \tilde{u} + \tilde{g}}{\epsilon_h} w_h ds.$$

• **Boundedness of** $\sup_{w_h \in V_h} \frac{|D_h(\tilde{u}, w_h)|}{\|w_h\|_{H^1(\Omega_h)}}$

Assume that the extension $\tilde{\mathbf{a}}$ of \mathbf{a} belongs to $W^{1,\infty}(\tilde{\Omega})$, then

$$\hat{f} = -\text{div}(\tilde{\mathbf{a}}\nabla\tilde{u}) \in L^2(\tilde{\Omega}). \quad (\text{IV.83})$$

Integrating by part Eq. (IV.83) on Ω_h with $w_h \in V_h$ as test function gives

$$\sum_{i,j=1}^2 \int_{\Omega_h} \tilde{a}_{ij} \frac{\partial \tilde{u}}{\partial x_j} \frac{\partial w_h}{\partial x_i} dx + \int_{\Gamma_h} \varphi(\tilde{u}) w_h ds = \int_{\Omega_h} \hat{f} w_h dx,$$

where $\varphi(\tilde{u}) = -\tilde{\mathbf{a}}\nabla\tilde{u} \cdot \mathbf{n} = \sum_{i,j=1}^2 \tilde{a}_{ij} \frac{\partial \tilde{u}}{\partial x_j} n_i$, \mathbf{n} being the outward unit normal vector on Γ_h .

Hence,

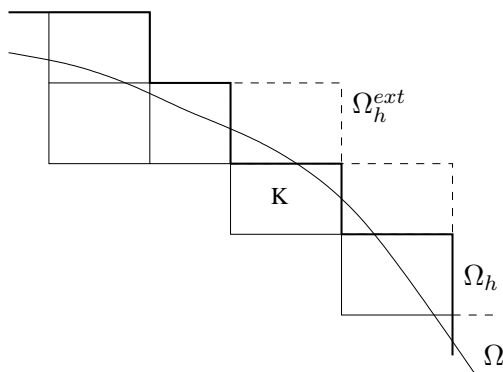
$$D_h(\tilde{u}, w_h) = \int_{\Gamma_h} \frac{\tilde{\alpha} \tilde{u} + \tilde{g}}{\epsilon_h} w_h ds - \int_{\Gamma_h} \varphi(\tilde{u}) w_h ds + \int_{\Omega_h \setminus \Omega} (\hat{f} - \tilde{f}) w_h dx.$$

Let \mathcal{T}_h^{ext} denote an external structured regular nonconforming mesh of Ω composed by Q_1 finite elements such that

$$\mathcal{T}_h^{ext} = \{\cup K; K|_{\Omega_h} \in \mathcal{T}_h\}$$

and

$$\overline{\Omega}_h^{ext} = \bigcup_{K \in \mathcal{T}_h^{ext}} K, \quad \Omega \subset \Omega_h^{ext}.$$

Figure IV.8: Definition of the external nonconforming mesh of Ω .

The extension domain $\tilde{\Omega}$ is now chosen such that

$$\forall h, \quad \Omega_h^{ext} \subset \tilde{\Omega}.$$

Among the external nonconforming meshes of Ω , the mesh \mathcal{T}_h^{ext} is such that the domain Ω_h^{ext} is the smallest possible (see Fig. IV.8).

Let $\omega_{h,\Gamma} = \{\cup K, K \in \mathcal{T}_h^{ext}, K \cap \Gamma \neq \emptyset\}$ be the union of the finite elements crossed by Γ . For each $K \subset \omega_{h,\Gamma}$, $K \in \mathcal{T}_h^{ext}$, we define the open set \mathcal{O}_K by

$$\mathcal{O}_K = \begin{cases} K \cap (\Omega_h \setminus \Omega) & \text{if } K \in \mathcal{T}_h, \\ K \cap (\Omega \setminus \Omega_h) & \text{otherwise.} \end{cases} \quad (\text{IV.84})$$

There exists an extension $w_h \in H^1(\Omega_h^{ext})$ of $w_h \in V_h$ over Ω_h^{ext} such that

$$\|w_h\|_{H^1(\Omega_h^{ext})} \leq C \|w_h\|_{H^1(\Omega_h)} \quad (\text{IV.85})$$

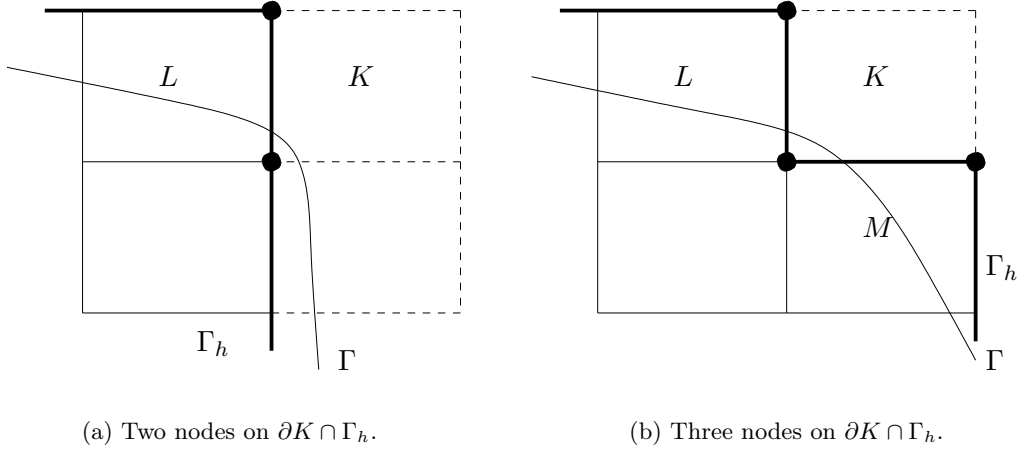
Remark. This extension can be a discrete extension $w_h \in Q_1$ over Ω_h^{ext} . For each $K \in \mathcal{T}_h^{ext}$, $K \in \Omega_h^{ext} \setminus \Omega_h$, this extension is constructed as follows:

- if only two nodes of K belong to $\partial K \cap \Gamma_h$ (see Fig. IV.9(a)), $w_h|_K$ is chosen to be the symmetric with respect to $\partial K \cap \Gamma_h$ of $w_h|_L$, where L is the cell in Ω_h , $L \in \mathcal{N}(K)$, sharing the same nodes than K on Γ_h . Then:

$$\|w_h\|_{H^1(K)} = \|w_h\|_{H^1(L)}.$$

- if three nodes of K belong to $\partial K \cap \Gamma_h$ (see Fig. IV.9(b)), the value of w_h on the fourth node is calculated in order to minimize $\|w_h\|_{H^1(K)}$. Let L and M be the cells of Ω_h having each one two nodes on $\partial K \cap \Gamma_h$, then

$$\|w_h\|_{H^1(K)} \leq C (\|w_h\|_{H^1(L)} + \|w_h\|_{H^1(M)}).$$

Figure IV.9: Configuration of the nodes of a cell $K \in \Omega_h^{ext} \setminus \Omega_h$.

The term $\int_{\Gamma_h} \varphi(\tilde{u}) w_h ds$ is transformed by integrating by part Eq. (IV.83) on each open \mathcal{O}_K , $K \subset \omega_{h,\Gamma}$. Then by summing over the elements $K \subset \omega_{h,\Gamma}$ we obtain

$$\begin{aligned} \int_{\Gamma_h} \varphi(\tilde{u}) w_h ds &= \int_{\Gamma} (\alpha u + g) w_h ds + \int_{\Omega_h \setminus \Omega} \hat{f} w_h dx - \int_{\Omega \setminus \Omega_h} f w_h dx \\ &\quad - \sum_{i,j=1}^2 \int_{\Omega_h \setminus \Omega} \tilde{a}_{ij} \frac{\partial \tilde{u}}{\partial x_j} \frac{\partial w_h}{\partial x_i} dx + \sum_{i,j=1}^2 \int_{\Omega \setminus \Omega_h} a_{ij} \frac{\partial u}{\partial x_j} \frac{\partial w_h}{\partial x_i} dx. \end{aligned}$$

We finally have

$$\begin{aligned} D_h(\tilde{u}, w_h) &= \int_{\Gamma_h} \frac{\tilde{\alpha} \tilde{u} + \tilde{g}}{\epsilon_h} w_h ds - \int_{\Gamma} (\alpha u + g) w_h ds - \int_{\Omega_h \setminus \Omega} \tilde{f} w_h dx + \int_{\Omega \setminus \Omega_h} f w_h dx \\ &\quad + \sum_{i,j=1}^2 \int_{\Omega_h \setminus \Omega} \tilde{a}_{ij} \frac{\partial \tilde{u}}{\partial x_j} \frac{\partial w_h}{\partial x_i} dx - \sum_{i,j=1}^2 \int_{\Omega \setminus \Omega_h} a_{ij} \frac{\partial u}{\partial x_j} \frac{\partial w_h}{\partial x_i} dx. \end{aligned}$$

The properties of $\tilde{\mathbf{a}}$, estimations (IV.59-IV.60), and the analogue to (IV.27) in the nonconforming case, yield

$$\begin{aligned} |D_h(\tilde{u}, w_h)| &\leq \left| \int_{\Gamma_h} \frac{\tilde{\alpha} \tilde{u} + \tilde{g}}{\epsilon_h} w_h ds - \int_{\Gamma} (\alpha u + g) w_h ds \right| \\ &\quad + Ch^{1/2} (\|u\|_{H^2(\tilde{\Omega})} + \|\tilde{f}\|_{L^2(\Omega_h \setminus \Omega)} + \|f\|_{L^2(\Omega \setminus \Omega_h)}) \|w_h\|_{H^1(\Omega_h^{ext})}. \end{aligned}$$

Using extension properties, we can write

$$|D_h(\tilde{u}, w_h)| \leq \left| \int_{\Gamma_h} \frac{\tilde{\alpha} \tilde{u} + \tilde{g}}{\epsilon_h} w_h ds - \int_{\Gamma} (\alpha u + g) w_h ds \right| + Ch^{1/2} (\|u\|_{H^2(\Omega)} + \|f\|_{L^2(\Omega)}) \|w_h\|_{H^1(\Omega_h)}. \quad (\text{IV.86})$$

Then we have to estimate $\int_{\Gamma_h} \frac{\tilde{\alpha} \tilde{u} + \tilde{g}}{\epsilon_h} w_h ds - \int_{\Gamma} (\alpha u + g) w_h ds$.

We have to define the correction parameter ϵ_h in order to keep at least the $\mathcal{O}(h^{1/2})$ accuracy. First, let introduce the following additional notations on \mathcal{T}_h^{ext} . Let \mathcal{E} be the family of edges of the elements of \mathcal{T}_h^{ext} . Then, $\sigma = K|L \in \mathcal{E}$ denote the edge between two distinct elements K and L of \mathcal{T}_h^{ext} : $\bar{\sigma} = \partial K \cap \partial L$ has a non zero Lebesgue measure in \mathbb{R} . The set of neighbors of K is denoted by $\mathcal{N}(K)$, that is $\mathcal{N}(K) = \{L \in \mathcal{T}_h^{ext}; \exists \sigma \in \mathcal{E}, \bar{\sigma} = \partial K \cap \partial L\}$.

For all $K \subset \omega_{h,\Gamma}$, we denote by $\hat{\mathcal{E}}_K = \{\sigma \in \mathcal{E}; \sigma \subset \Gamma_h, \sigma \in \partial K \cap \partial \Omega_h^{ext} \text{ or } \sigma = K|L \text{ with either } L \not\subset \Omega_h \text{ or } L \not\subset \omega_{h,\Gamma}\}$ the set of sides lying on Γ_h associated to K . Otherwise, for $K \not\subset \omega_{h,\Gamma}$, $\hat{\mathcal{E}}_K = \emptyset$. Moreover, we denote by

$$\Gamma_{h,K} = \bigcup_{\sigma \in \hat{\mathcal{E}}_K} \bar{\sigma}$$

the part of Γ_h associated to the element K (see Fig. IV.10).

Some cells $K \not\subset \omega_{h,\Gamma}$ may have $\hat{\mathcal{E}}_K = \emptyset$ (for example if any side of K belongs to Γ_h), then the part Γ_K of Γ included in this kind of cells may be not considered in the calculation of ϵ_h . In order to take account of the entire measure of the original interface Γ , for the cells $K \subset \omega_{h,\Gamma}$ such that $\hat{\mathcal{E}}_K = \emptyset$, we associated K to one of its neighbor $K' \in \mathcal{N}(K)$ such that $\hat{\mathcal{E}}_{K'} \neq \emptyset$. The choice of the neighbor K' (called in the sequel “chosen” neighbor) can be made by different ways, for example arbitrarily among all the neighbors $L \in \mathcal{N}(K)$ such that $\hat{\mathcal{E}}_L \neq \emptyset$. Another choice is detailed in [RAB06]. For all $K \subset \omega_{h,\Gamma}$ such that $\hat{\mathcal{E}}_K \neq \emptyset$, let $\mathcal{C}(K) = \{L \in \mathcal{T}_h^{ext}; L \in \mathcal{N}(K), L \subset \omega_{h,\Gamma}, I(N) = \emptyset, K \text{ is the “chosen” neighbor of } L\}$ be the set of cells of which K is the “chosen” neighbor.

Then, we define $\hat{\Gamma}_K$ (see Fig. IV.10) such that :

$$\hat{\Gamma}_K = \Gamma_K + \sum_{L \in \mathcal{C}(K)} \Gamma_L \quad (\text{IV.87})$$

where $\Gamma_K = \Gamma \cap \partial K$.

The local correction ϵ_K introduced in [RAB06], which is the value of ϵ_h over each element $K \subset \omega_{h,\Gamma}$, reads

$$\forall K \subset \omega_{h,\Gamma} \text{ such that } \hat{\mathcal{E}}_K \neq \emptyset, \quad \epsilon_K = \frac{\text{meas}(\Gamma_{h,K})}{\text{meas}(\hat{\Gamma}_K)}. \quad (\text{IV.88})$$

And

$$\forall \sigma \subset \Gamma_h, \sigma \in \hat{\mathcal{E}}_K, \quad \epsilon_\sigma = \epsilon_K, \quad (\text{IV.89})$$

which defines the piecewise constant function ϵ_h on Γ_h .

By definition of ϵ_K , for each $K \subset \omega_{h,\Gamma}$ such that $\hat{\mathcal{E}}_K \neq \emptyset$, for any constant C we have:

$$\frac{1}{\epsilon_K} \int_{\Gamma_{h,K}} C ds - \int_{\hat{\Gamma}_K} C ds = 0$$

Let $\overline{w_h}$ and $\overline{(\tilde{\alpha}\tilde{u} + \tilde{g})}$ be the mean values over K of w_h and $(\tilde{\alpha}\tilde{u} + \tilde{g})$ respectively, then we get

$$\begin{aligned} \int_{\Gamma_{h,K}} \frac{\tilde{\alpha}\tilde{u} + \tilde{g}}{\epsilon_h} w_h ds - \int_{\hat{\Gamma}_K} (\alpha u + g) w_h ds &= \frac{1}{\epsilon_K} \int_{\Gamma_{h,K}} [(\tilde{\alpha}\tilde{u} + \tilde{g}) w_h - \overline{(\tilde{\alpha}\tilde{u} + \tilde{g})} \overline{w_h}] ds \\ &- \int_{\hat{\Gamma}_K} [(\alpha u + g) w_h - \overline{(\tilde{\alpha}\tilde{u} + \tilde{g})} \overline{w_h}] ds. \end{aligned} \quad (\text{IV.90})$$

Assume that $\hat{\mathcal{O}}_K = \mathcal{O}_K \cup (\bigcup_{L \in \mathcal{C}(K)} \mathcal{O}_L)$ (see Fig. IV.10). By the same reasoning as in the proof of Lemma IV.4, we can obtain the following estimate:

There exists a constant C such that $\forall K \subset \omega_{h,\Gamma}, \hat{\mathcal{E}}_K \neq \emptyset$

$$\begin{aligned} \int_{\hat{\Gamma}_K} [(\alpha u + g) w_h - \overline{(\tilde{\alpha}\tilde{u} + \tilde{g})} \overline{w_h}] ds &\leq C \left(\int_{\Gamma_{h,K}} [(\tilde{\alpha}\tilde{u} + \tilde{g}) w_h - \overline{(\tilde{\alpha}\tilde{u} + \tilde{g})} \overline{w_h}] ds \right. \\ &+ \|\tilde{\alpha}\tilde{u} + \tilde{g}\|_{H^1(\hat{\mathcal{O}}_K)} \|w_h\|_{L^2(\hat{\mathcal{O}}_K)} \\ &\left. + \|\tilde{\alpha}\tilde{u} + \tilde{g}\|_{L^2(\hat{\mathcal{O}}_K)} \|w_h\|_{H^1(\hat{\mathcal{O}}_K)} \right). \end{aligned} \quad (\text{IV.91})$$

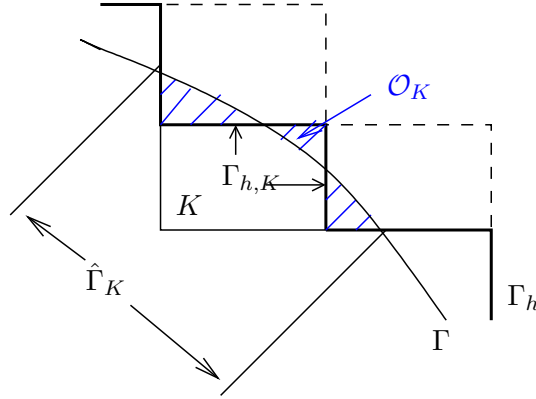


Figure IV.10: Definition of $\Gamma_{h,K}$, $\hat{\Gamma}_K$ and \mathcal{O}_K .

As $\frac{1}{\epsilon_K} \leq C$, we obtain

$$\begin{aligned} \frac{1}{\epsilon_K} \int_{\Gamma_{h,K}} (\tilde{\alpha}\tilde{u} + \tilde{g}) w_h ds - \int_{\hat{\Gamma}_K} (\alpha u + g) w_h ds &\leq C \left(\int_{\Gamma_{h,K}} [(\tilde{\alpha}\tilde{u} + \tilde{g}) w_h - \overline{(\tilde{\alpha}\tilde{u} + \tilde{g})} \overline{w_h}] ds \right. \\ &+ \|\tilde{\alpha}\tilde{u} + \tilde{g}\|_{H^1(\hat{\mathcal{O}}_K)} \|w_h\|_{L^2(\hat{\mathcal{O}}_K)} \\ &\left. + \|\tilde{\alpha}\tilde{u} + \tilde{g}\|_{L^2(\hat{\mathcal{O}}_K)} \|w_h\|_{H^1(\hat{\mathcal{O}}_K)} \right). \end{aligned} \quad (\text{IV.92})$$

Considering the first term of the right hand side of (IV.92), the Cauchy-Schwarz inequality gives

$$\begin{aligned}
\int_{\Gamma_{h,K}} [(\tilde{\alpha} \tilde{u} + \tilde{g}) w_h - \overline{(\tilde{\alpha} \tilde{u} + \tilde{g})} \cdot \overline{w_h}] ds &= \int_{\Gamma_{h,K}} [(\tilde{\alpha} \tilde{u} + \tilde{g}) w_h - (\tilde{\alpha} \tilde{u} + \tilde{g}) \overline{w_h} + (\tilde{\alpha} \tilde{u} + \tilde{g}) \overline{w_h} - \overline{(\tilde{\alpha} \tilde{u} + \tilde{g})} \cdot \overline{w_h}] ds, \\
&= \int_{\Gamma_{h,K}} (\tilde{\alpha} \tilde{u} + \tilde{g}) (w_h - \overline{w_h}) + \int_{\Gamma_{h,K}} [(\tilde{\alpha} \tilde{u} + \tilde{g}) - \overline{(\tilde{\alpha} \tilde{u} + \tilde{g})}] \overline{w_h} ds, \\
&\leq \sum_{\sigma \in \hat{\mathcal{E}}_K} (\|\tilde{\alpha} \tilde{u} + \tilde{g}\|_{L^2(\sigma)} \|w_h - \overline{w_h}\|_{L^2(\sigma)} + \\
&\quad \|(\tilde{\alpha} \tilde{u} + \tilde{g}) - \overline{(\tilde{\alpha} \tilde{u} + \tilde{g})}\|_{L^2(\sigma)} \|\overline{w_h}\|_{L^2(\sigma)}).
\end{aligned}$$

On each edge $\sigma \in \hat{\mathcal{E}}_K$, the L^2 norm of $(w_h - \overline{w_h})$ is estimated by the trace inequality (IV.24) of Lemma IV.3 on the rectangle K :

$$\|w_h - \overline{w_h}\|_{L^2(\sigma)} \leq Ch_K^{-1/2} (\|w_h - \overline{w_h}\|_{L^2(K)} + h_K \|w_h\|_{H^1(K)}).$$

Since $\overline{w_h} = \frac{1}{\text{meas}(K)} \int_K w_h dx$, the Poincaré-Wirtinger inequality (see e.g. [Bre00]) enables us to conclude that

$$\|w_h - \overline{w_h}\|_{L^2(\sigma)} \leq Ch_K^{1/2} \|w_h\|_{H^1(K)}. \quad (\text{IV.93})$$

By the same arguments, we have

$$\|(\tilde{\alpha} \tilde{u} + \tilde{g}) - \overline{(\tilde{\alpha} \tilde{u} + \tilde{g})}\|_{L^2(\sigma)} \leq Ch_K^{1/2} \|\tilde{\alpha} \tilde{u} + \tilde{g}\|_{H^1(K)}. \quad (\text{IV.94})$$

Moreover, on each cell $K \subset \omega_{h,\Gamma}$, $\hat{\mathcal{E}}_K \neq \emptyset$, by definition of the mean value (which is a projection on the L^2 space):

$$\forall \sigma \in \hat{\mathcal{E}}_K, \quad \|\overline{w_h}\|_{L^2(\sigma)} \leq Ch_K^{-1/2} \|\overline{w_h}\|_{L^2(K)} \leq Ch_K^{-1/2} \|w_h\|_{L^2(K)}$$

Combining all the previous inequality lead to

$$\begin{aligned}
\int_{\Gamma_{h,K}} [(\tilde{\alpha} \tilde{u} + \tilde{g}) w_h - \overline{(\tilde{\alpha} \tilde{u} + \tilde{g})} \cdot \overline{w_h}] ds &\leq C (h_K^{1/2} \|\tilde{\alpha} \tilde{u} + \tilde{g}\|_{L^2(\Gamma_{h,K})} \|w_h\|_{H^1(K)} \\
&\quad + \|\tilde{\alpha} \tilde{u} + \tilde{g}\|_{H^1(K)} \|w_h\|_{L^2(K)}).
\end{aligned}$$

On each $K \subset \omega_{h,\Gamma}$, $\hat{\mathcal{E}}_K \neq \emptyset$, we have

$$\begin{aligned}
\frac{1}{\epsilon_K} \int_{\Gamma_{h,K}} (\tilde{\alpha} \tilde{u} + \tilde{g}) w_h ds - \int_{\hat{\Gamma}_K} (\alpha u + g) w_h ds &\leq C (h_K^{1/2} \|\tilde{\alpha} \tilde{u} + \tilde{g}\|_{L^2(\Gamma_{h,K})} \|w_h\|_{H^1(K)} \\
&\quad + \|\tilde{\alpha} \tilde{u} + \tilde{g}\|_{H^1(K)} \|w_h\|_{L^2(K)} \\
&\quad + \|\tilde{\alpha} \tilde{u} + \tilde{g}\|_{H^1(\hat{\mathcal{O}}_K)} \|w_h\|_{L^2(\hat{\mathcal{O}}_K)} \\
&\quad + \|\tilde{\alpha} \tilde{u} + \tilde{g}\|_{L^2(\hat{\mathcal{O}}_K)} \|w_h\|_{H^1(\hat{\mathcal{O}}_K)}).
\end{aligned} \quad (\text{IV.95})$$

Summing over all the $K \subset \omega_{h,\Gamma}$, $\hat{\mathcal{E}}_K \neq \emptyset$:

$$\begin{aligned}
\int_{\Gamma_h} \frac{\tilde{\alpha} \tilde{u} + \tilde{g}}{\epsilon_h} w_h ds - \int_{\Gamma} (\alpha u + g) ds &\leq C (h^{1/2} \|\tilde{\alpha} \tilde{u} + \tilde{g}\|_{L^2(\Gamma_h)} \|w_h\|_{H^1(\omega_{h,\Gamma})} \\
&\quad + \|\tilde{\alpha} \tilde{u} + \tilde{g}\|_{H^1(\omega_{h,\Gamma})} \|w_h\|_{L^2(\omega_{h,\Gamma})} \\
&\quad + \|\tilde{\alpha} \tilde{u} + \tilde{g}\|_{L^2(\omega_{h,\Gamma})} \|w_h\|_{H^1(\omega_{h,\Gamma})}).
\end{aligned} \quad (\text{IV.96})$$

Then, as in the proof of Lemma IV.4-Eq. (IV.27), we have the following estimates $\forall v \in H^1(\Omega_h^{ext})$

$$\begin{aligned} \|v\|_{L^2(\Omega \setminus \Omega_h)} &\leq Ch^{1/2} \|v\|_{H^1(\Omega)}, \\ \|v\|_{L^2(\Omega_h^{ext} \setminus \Omega)} &\leq Ch^{1/2} \|v\|_{H^1(\Omega_h^{ext})}. \end{aligned}$$

Hence,

$$\forall v \in H^1(\Omega_h^{ext}), \quad \|v\|_{L^2(\omega_{h,\Gamma})} \leq Ch^{1/2} \|v\|_{H^1(\Omega_h^{ext})}. \quad (\text{IV.97})$$

Finally,

$$\int_{\Gamma_h} \frac{\tilde{\alpha} \tilde{u} + \tilde{g}}{\epsilon_h} w_h ds - \int_{\Gamma} (\alpha u + g) ds \leq Ch^{1/2} \|\tilde{\alpha} \tilde{u} + \tilde{g}\|_{H^1(\Omega_h^{ext})} \|w_h\|_{H^1(\Omega_h^{ext})}. \quad (\text{IV.98})$$

Then the extension properties conclude the proof. \square

Remark (Remark 1). *For the Robin problem, the L^2 norm error estimate in $\mathcal{O}(h)$ still surely holds as well as for the Dirichlet problem in Theorem IV.6. However, some technical issues have to be overcome to apply the Aubin-Nitsche trick. This is beyond the scope of the present work. But the numerical results in Section IV.4.3 do confirm the first-order convergence for the L^2 norm.*

Remark (Remark 2). *From Eq. (IV.86) and by the same arguments as in the previous proof, we clearly see that the choice of a global parameter $\epsilon_h = \frac{\text{meas}(\Gamma_h)}{\text{meas}(\Gamma)}$ do not remain the $\mathcal{O}(h^{1/2})$ accuracy for the H^1 -norm. The error convergence with respect to the mesh step h is lost.*

IV.4 Numerical experiments

IV.4.1 Fictitious domain approach

In order to validate the previous theoretical estimates, we present some numerical results obtained with the fictitious domain method with spread interface introduced by Ramière *et al.* [RAB07]. A diffusion problem in the unit disk is under study. For symmetry reasons, we consider this problem on a quarter of the unit disk Ω (see Fig. IV.11(a)). In the fictitious domain approach, the domain Ω is immersed into the unit square $\Omega_f =]0, 1[\times]0, 1[$ (see Fig. IV.11(b)) on which a uniform Cartesian mesh is defined.

The fictitious domain Ω_f is meshed by uniform square cells K with a grid step varying from $h = \frac{1}{4}$ to $h = \frac{1}{256}$. This defines two kinds of nonconforming meshes: the exterior approximate domain Ω_h^{ext} (see Fig. IV.12(a)) such that $\Omega \subset \Omega_h$ or the cut approximate domain Ω_h^{cut} (see Fig. IV.12(b)), the boundary of which may cross the original immersed interface. Thus, the resulting approximate domains Ω_h are such that: $|\text{meas}(\Omega_h) - \text{meas}(\Omega)| = \mathcal{O}(h)$.

Let $e_h = \tilde{u} - u_h$ denote the error between the extended analytic solution and the approximate solution in Ω_h . The following results focus on the H^1 seminorm and the L^2 norm of e_h in Ω_h . Numerically speaking, these norms are evaluated by summing the integrals over each cell $K \in \mathcal{T}_h$. In order to avoid any phenomenon of superconvergence, each cell integral is evaluated by a Gauss-Legendre quadrature formula which is exact for a Q_5 function (see for example [Cia78]).

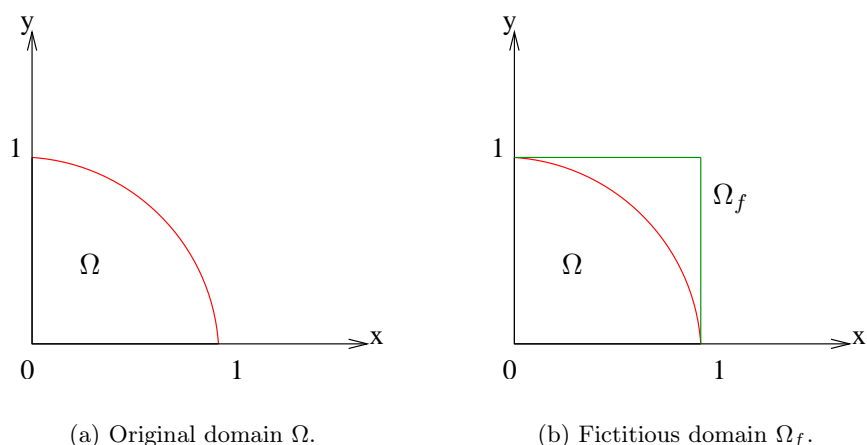
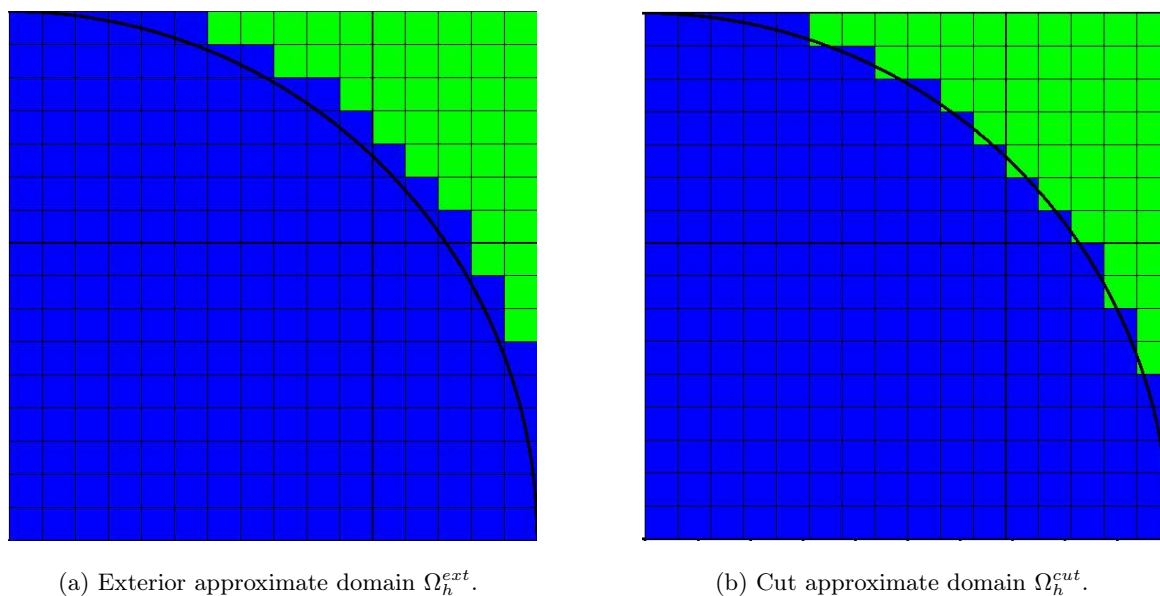


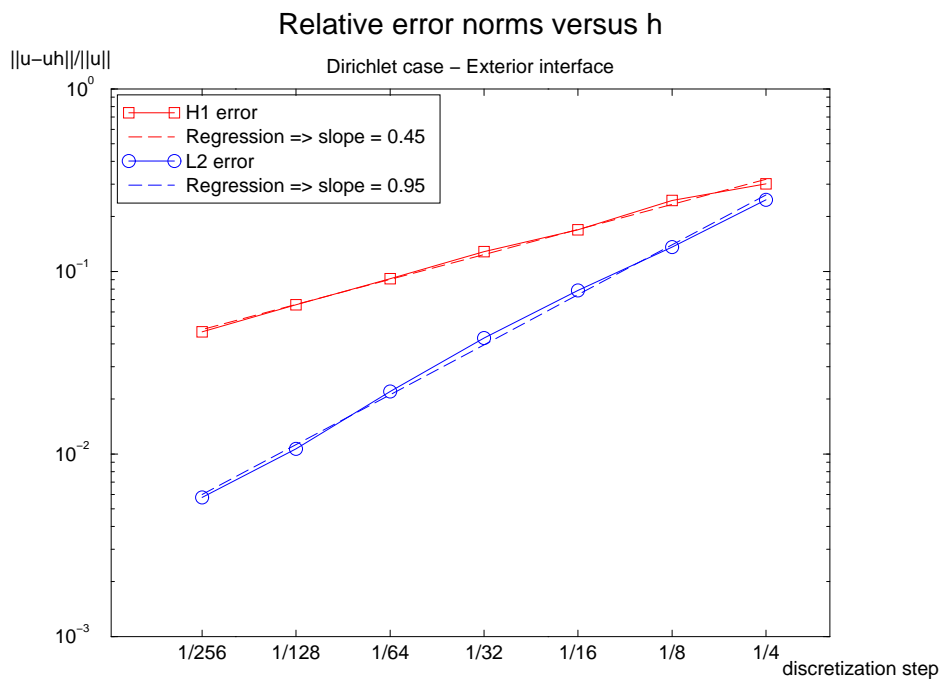
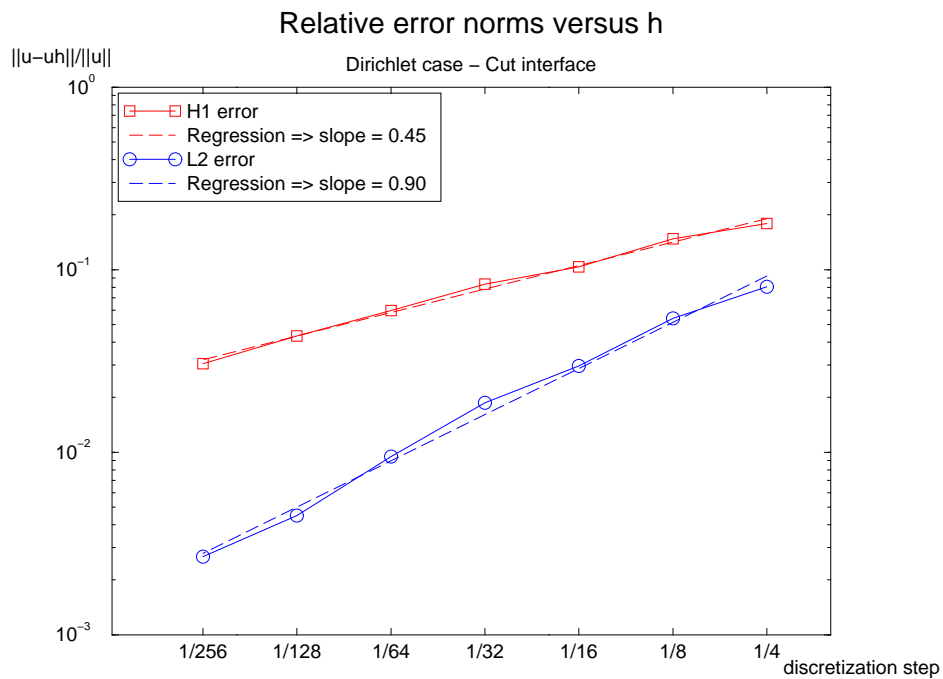
Figure IV.11: Immersion of the unit disk into the unit square.

Figure IV.12: Nonconforming meshes and approximate domains Ω_h .

IV.4.2 Dirichlet case

We consider an original homogeneous Dirichlet diffusion problem $-\Delta u = 4$ with the analytical solution $u = 1 - (x^2 + y^2)$ in Ω . In the fictitious domain approach, a penalization of the exterior fictitious domain (see [RAB07]) is performed in order to impose the Dirichlet boundary conditions on Γ_h . The curves of the errors in the H^1 seminorm and the L^2 norm are represented in Figure IV.13.

The numerical results are in agreement with the estimates obtained in Section IV.2. Indeed, for the two nonconforming meshes of Ω , the error varies like $\mathcal{O}(h^{1/2})$ for the H^1 norm and like $\mathcal{O}(h)$ for the L^2 norm. As expected, the choice of the cut approximate boundary yields smaller errors than the exterior approximate boundary.

(a) Exterior approximate domain Ω_h^{ext} .(b) Cut approximate domain Ω_h^{cut} .Figure IV.13: Convergence of the discretization error with h for the Dirichlet problem with a fictitious domain approach.

IV.4.3 Robin case

We consider a Robin diffusion problem $-\Delta u = 16(x^2 + y^2)$ with the condition $-\nabla u \cdot \mathbf{n} = u + 3$ on the circle. The analytical solution of this problem is $u = 1 - (x^2 + y^2)^2$ in Ω .

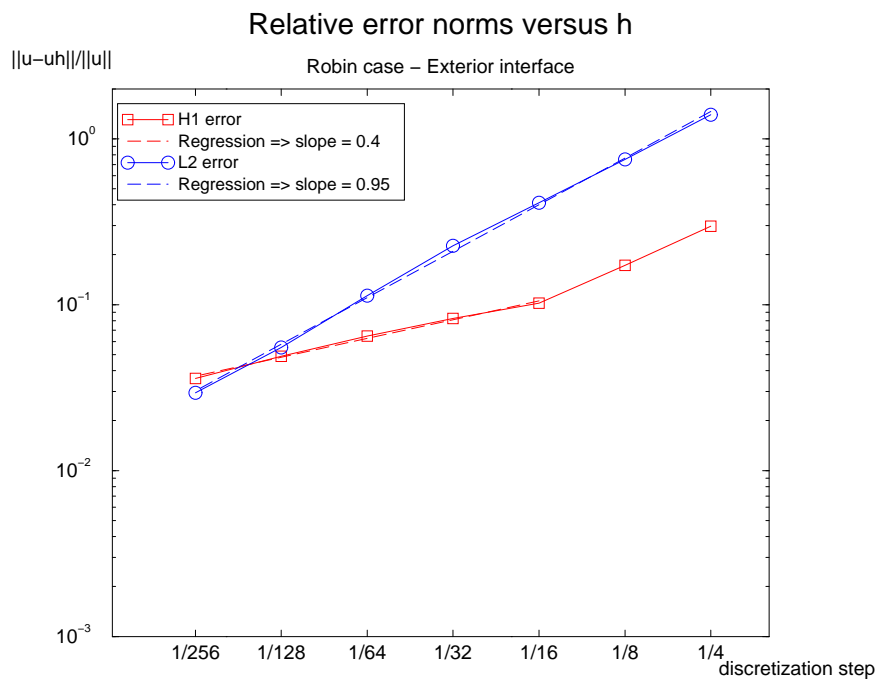
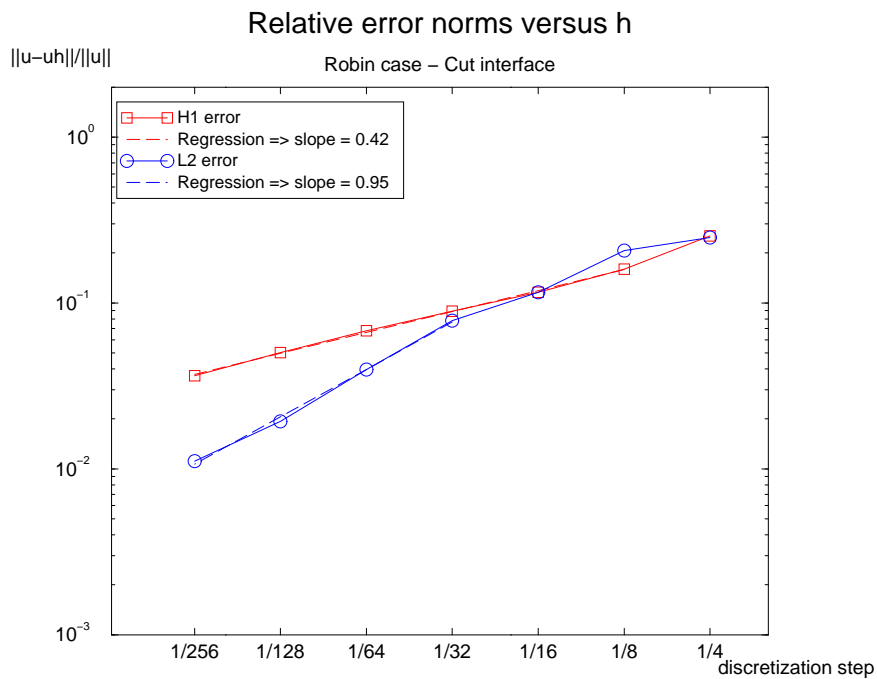
Figure IV.14 illustrates the order of convergence for the two kinds of nonconforming meshes Ω_h^{ext} and Ω_h^{cut} . As expected, the method accuracy is in $\mathcal{O}(h^{1/2})$ for the H^1 norm. We can observe that we also still obtain an accuracy in $\mathcal{O}(h)$ for the L^2 norm as for the Dirichlet case.

In a fictitious domain approach, with standard Q_1 finite elements over the fictitious domain Ω_f , neither a jump of solution nor a jump of the flux is allowed on the immersed approximate interface Γ_h . Then, we can not impose directly the Robin boundary condition on Γ_h . Then, in the fictitious domain method with spread interface of [RAB07], a volume correction coefficient ϵ_K is calculated on each cell $K \subset \omega_{h,\Gamma}$ to impose the flux on Γ as a source term carried by the spread interface $\omega_{h,\Gamma}$. This volume correction can be seen as a volume extension of the surface correction ϵ_σ (see Eq. (IV.89)) analyzed here. Then, we have:

$$\forall K \subset \omega_{h,\Gamma}, \quad \epsilon_K = \frac{\text{meas}(K)}{\text{meas}(\Gamma_K)}.$$

In Figure IV.15, we can observe that the fictitious domain approach with a volume correction parameter leads to the same rates of convergence as for a surface correction term: the error varies like $\mathcal{O}(h^{1/2})$ for the H^1 norm and like $\mathcal{O}(h)$ for the L^2 norm.

Remark. *Another fictitious domain approach which deals with a thin approximate interface and immersed jumps has been recently introduced and tested in [Ang05, ALR05, RAB06]. The approximate interface lies on sides of control volumes and a cell-centered finite volume scheme is derived to compute this approach. Then, for a Robin B.C., the surface correction ϵ_K analyzed here is applied on the approximate interface. The numerical results in [ALR05, RAB06] confirm the first order accuracy of the error for the L^2 norm.*

(a) Exterior approximate domain Ω_h^{ext} .(b) Cut approximate domain Ω_h^{cut} .Figure IV.14: Convergence of the discretization error with h for the Robin problem with a nonconforming mesh.

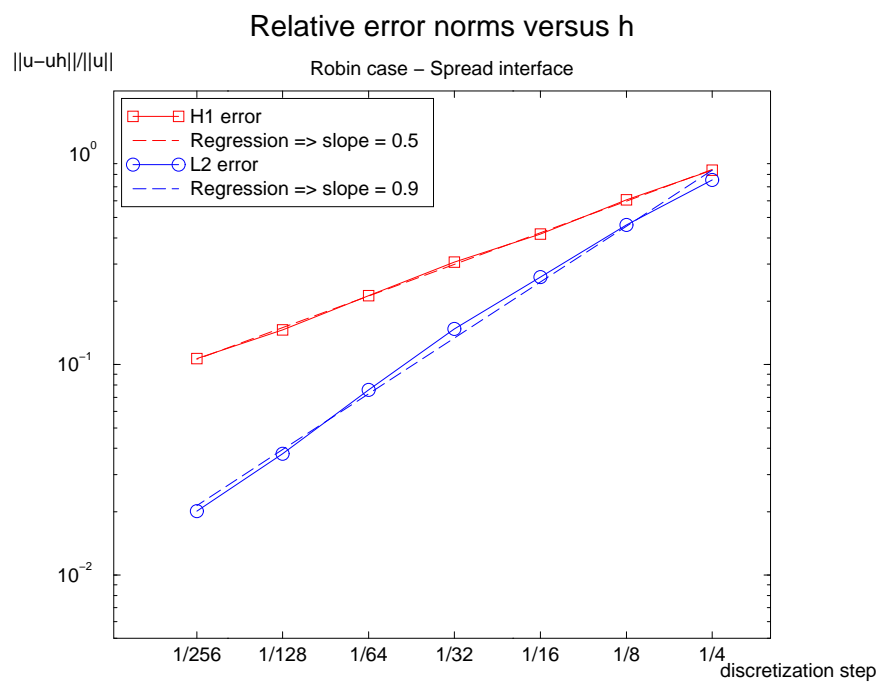


Figure IV.15: Convergence of the discretization error with h for the Robin problem which a fictitious domain approach.

Chapitre V

Application industrielle

Sommaire

V.1	Contexte industriel	141
V.2	Le cas test	143
V.2.1	Clotaire <i>Benchmark</i>	143
V.2.2	Problème étudié	144
V.3	Approche par domaine fictif avec interface diffuse	146
V.3.1	Caractérisation géométrique de la frontière immergée	146
V.3.2	Traitement des conditions aux limites immergées	146
V.3.3	Correction de la porosité	147
V.3.4	Conditions aux limites sur le domaine fictif	149
V.4	Résolution numérique	150
V.4.1	Schéma en temps	150
V.4.2	Méthode d'éléments finis Q_1	150
V.4.3	Les maillages	150
V.4.4	Interpolation des champs de vitesses massiques et de pressions	151
V.4.5	Solveur	151
V.5	Résultats	152
V.5.1	Critères physiques	152
V.5.2	Convergence et temps de calcul	153
V.5.3	Précisions des simulations	153
V.6	Résultats complémentaires	161
V.6.1	Calcul avec 7 200 cellules	161
V.6.2	Calcul avec 460 800 cellules	163

V.1 Contexte industriel

Notre étude s'inscrit dans le cadre de l'étude des générateurs de vapeur (GV) des centrales thermiques nucléaires de type REP (réacteur à eau pressurisée), ou en anglais PWR (pressurized water reactor). Le schéma de principe du fonctionnement d'une centrale nucléaire de type REP est donné sur la figure V.1. Le GV est un échangeur de chaleur assurant la production de vapeur actionnant les turbines d'une centrale électrique.

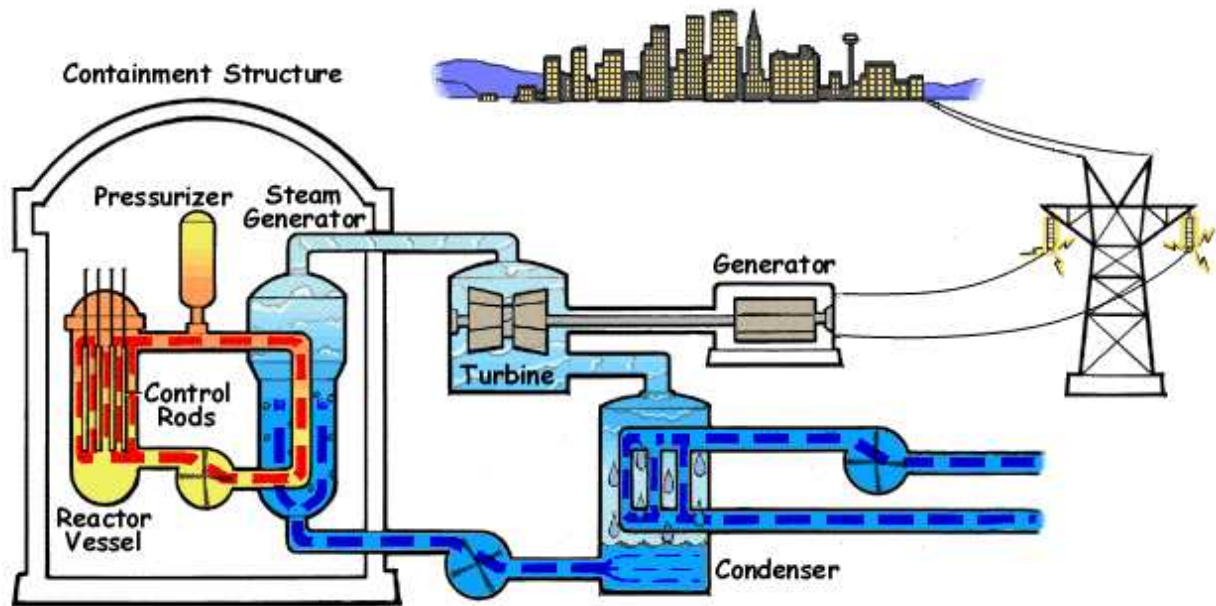


FIG. V.1 – Schéma de principe d'une centrale nucléaire à réacteur à eau pressurisée (REP).

L'énergie libérée lors de la réaction en chaîne de fission dans le cœur du réacteur est transférée sous forme de chaleur à l'eau qui circule autour des barreaux combustibles. Cette eau joue le rôle de fluide caloporteur en transportant la chaleur du combustible hors du cœur du réacteur. C'est le **circuit primaire**.

L'eau du circuit primaire sort du cœur de réacteur à une température de l'ordre de $300\text{ }^{\circ}\text{C}$. Ce caloporteur est ensuite utilisé pour chauffer de l'eau non contaminée dans le générateur de vapeur sans entrer en contact direct avec elle. Cette eau non irradiée est portée à ébullition pour produire de la vapeur qui va entraîner ensuite une turbine couplée à un alternateur produisant de l'électricité. A la sortie de la turbine, la vapeur se recondense en eau dans un condenseur refroidi par l'eau d'une rivière ou par un aéroréfrigérant. L'eau condensée réalimente le GV. C'est le **circuit secondaire**. L'évaporateur du générateur de vapeur est un cylindre de 10 m de haut et 3 m de diamètre, il contient 2 500 à 3 000 tubes de 1 cm de diamètre. Le principe de fonctionnement du GV est représenté sur la figure V.2 à l'aide d'une vue en coupe.

- L'eau du circuit primaire sous pression (155 bar, $320\text{ }^{\circ}\text{C}$) et chauffée au contact du cœur du réacteur, pénètre par la partie basse du générateur de vapeur, appelée boîte à eau primaire. Elle circule ensuite à l'intérieur de milliers de tubes en forme de U renversé et échange sa chaleur avec le fluide secondaire qui circule à l'extérieur des tubes. L'enveloppe du circuit primaire constitue la deuxième barrière de confinement, la première étant la gaine métallique autour du combustible. L'étanchéité entre les deux circuits doit donc être totale, ce qui explique pourquoi ces tubes sont particulièrement surveillés. De nombreuses études concernant leur intégrité sont menées.

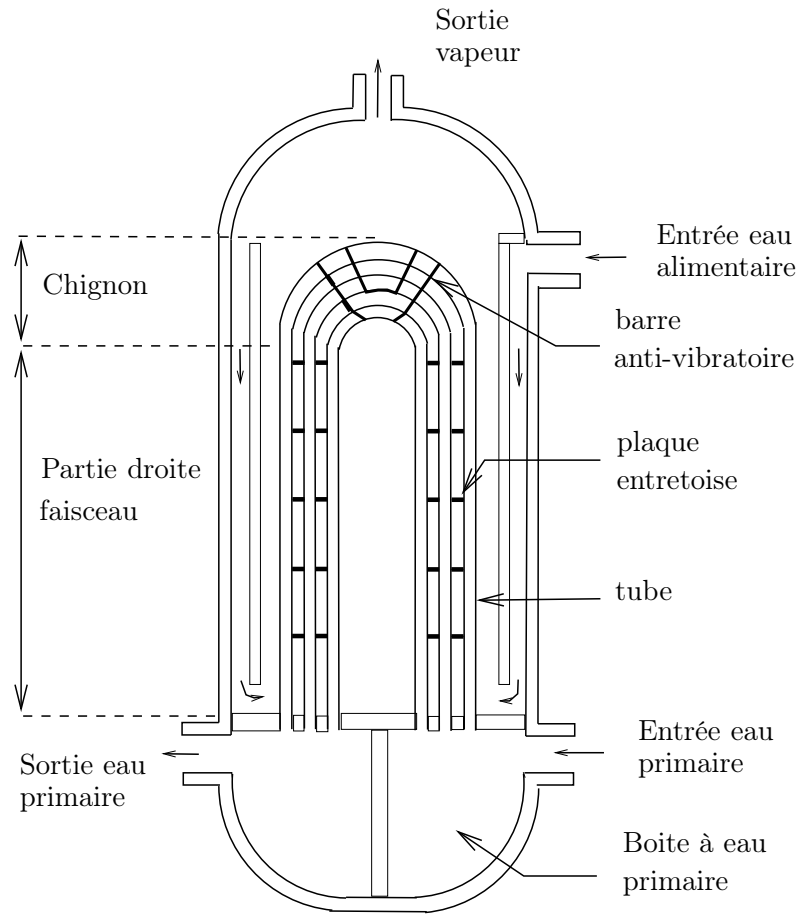


FIG. V.2 – Schéma de principe d'un GV.

- L'eau du circuit secondaire (60 bar, 230 ° C), s'échauffe au contact du faisceau de tubes et se vaporise pour donner un mélange diphasique (eau-vapeur) à 280 ° C. Le taux de présence de la phase gazeuse atteint 80 % dans la partie haute du faisceau de tubes, zone des cintres appelée chignon.

Un écoulement diphasique est considéré comme divisé en domaines monophasiques séparés par des interfaces se déplaçant dans le domaine d'étude. On peut établir pour chaque domaine monophasique des équations différentielles traduisant les équations de conservation classiques. Des conditions aux interfaces, reliant des grandeurs locales appartenant à chaque phase de part et d'autre de l'interface, caractérisent également l'écoulement diphasique. En théorie, il est alors possible de décrire le comportement d'un écoulement diphasique grâce à des variables locales instantanées. Cette formulation conduit à un problème où les frontières sont multiples et dont les positions sont inconnues. La résolution de ce problème nécessite des capacités informatiques importantes, aujourd'hui hors de portée pour une application industrielle.

Dans un GV, les fluides se trouvent environnés par des solides. Le procédé utilisé pour tenir compte de ces structures solides ainsi que de l'écoulement diphasique entre les tubes est une technique de moyenne spatiale appelée "homogénéisation". Ce procédé consiste à moyenner les équations bilans locales instantanées de chaque phase sur un volume élémentaire, appelée cellule d'homogénéisation (cf. figure V.3) dont la longueur caractéristique est le pas entre deux tubes du GV.

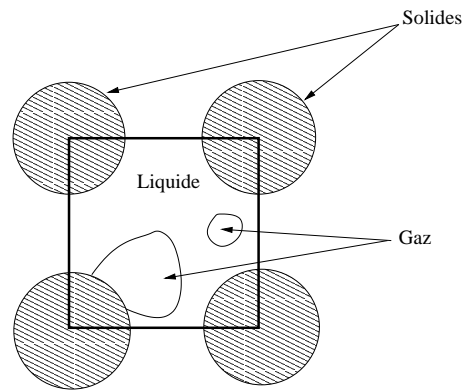


FIG. V.3 – Cellule d’homogénéisation.

Le principe d’homogénéisation permet de remplacer les équations locales par des équations semi-locales portant sur des grandeurs moyennées sur un continuum solide-fluide équivalent appelé **milieu poreux**. Ces nouvelles équations se caractérisent par l’introduction :

- d’une porosité et d’un taux de présencephasique,
- de termes sources (frottements, échange thermique, diffusion turbulente, dérive) qu’il faut modéliser de façon empirique.

Ces équations moyennées spatialement sont également moyennées temporellement sur un pas de temps caractéristique.

Les opérateurs de moyenne induisent une perte d’information au niveau de la description locale instantanée. Ils lissent les détails de la structure de l’écoulement (fluctuations dont le temps caractéristique est plus petit que la période d’intégration temporelle, hétérogénéités spatiales dont les longueurs caractéristiques sont plus petites que la longueur caractéristique de la cellule d’homogénéisation). Toutefois, certaines informations perdues (géométrie des interfaces, vitesses, gradients de température dans chaque phase...) jouent un rôle important. Ces informations réapparaissent dans les lois de fermeture qui modélisent les termes inconnus nouveaux. Un système d’équations bilans homogénéisées avec des lois de fermetures est donc établi et résolu [RB04].

V.2 Le cas test

V.2.1 Clotaire *Benchmark*

L’objectif de ce chapitre est de résoudre, par la méthode de domaine fictif avec interface diffuse introduite au chapitre II et dans [RAB07], le bilan d’énergie sur une maquette 3D d’un générateur de vapeur, Clotaire *Benchmark* [CB88]. Cette maquette Clotaire a permis de qualifier le logiciel Génépi [GO96, GBG⁺89] de simulation des écoulements diphasiques dans les GV, développé au CEA (Commissariat à l’Energie Atomique). Nous pourrions ainsi comparer les résultats obtenus avec l’approche par domaine fictif à ceux obtenus à l’aide des méthodes numériques utilisées jusqu’à présent et faisant intervenir des maillages adaptés à la géométrie du domaine.

L’évaporateur de Clotaire est modélisé par un demi-cylindre de 0,313 m rayon et de 9,1688 m de haut, accolé à un parallélépipède de 0,012 m de profondeur, voir figure V.4 et figure V.6 pour une coupe horizontale (plan (xy)). Cette maquette possède la même hauteur qu’un GV réel et contient 184 tubes.

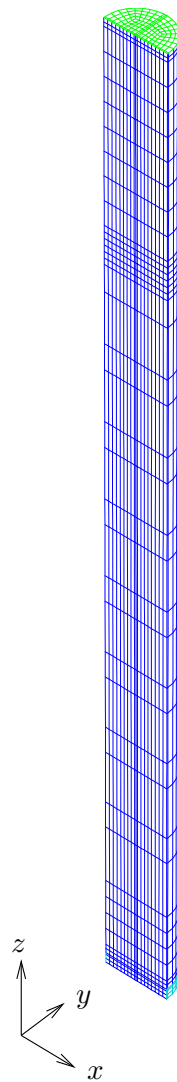


FIG. V.4 – Maillage adapté de la maquette Clotaire.

Le fluide secondaire entre par une fenêtre de $9,7 \cdot 10^{-2}$ m entre l'enveloppe de l'évaporateur et la plaque où sont encastrés les tubes. La fenêtre d'entrée est donc située près de la base du cylindre (couleur bleue ciel sur la figure V.4). Le fluide primaire circulant dans des tubes en forme de U renversé, on distingue une branche dite chaude (qui est la partie du U renversé située du côté de l'entrée du fluide primaire, ici sur la droite du demi-cylindre) et une branche dite froide (partie du tube en U renversé située du côté de la sortie du fluide primaire, ici sur la gauche du demi-cylindre).

V.2.2 Problème étudié

Le bilan d'énergie à résoudre sur la maquette Clotaire est une équation de convection-diffusion traduisant la conservation de l'enthalpie du fluide secondaire. Cette équation portant sur l'enthalpie

spécifique du mélange H est obtenue par homogénéisation (voir section V.1 et [RB04]) :

$$\beta\rho\partial_t H + \beta\mathbf{G}\cdot\nabla H - \operatorname{div}(\beta\chi_T\nabla H) = \beta Q - \operatorname{div}(\beta x(1-x)\rho\mathcal{L}\mathbf{V}_R), \quad (\text{V.1})$$

avec

- β : porosité ($\equiv \omega_m/\omega$),
- ω : volume de la cellule d'homogénéisation (m^3),
- ω_m : volume occupé par le mélange (liquide + gaz) dans la cellule d'homogénéisation (m^3),
- ρ : densité ($kg.m^{-3}$),
- H : enthalpie du mélange ($KJ.kg^{-1}$),
- \mathbf{G} : vitesse massique ($\equiv \rho\mathbf{V}$),
- \mathbf{V} : vitesse du mélange ($m.s^{-1}$),
- χ_T : coefficient de diffusion turbulente pour le bilan d'énergie ($kg.m^{-1}.s^{-1}$),
- Q : terme source ($W.m^{-3}$),
- \mathbf{V}_R : vitesse relative (vitesse du gaz moins vitesse du liquide, $m.s^{-1}$),
- \mathcal{L} : chaleur latente de vaporisation ($J.kg^{-1}$),
- x : titre ($\equiv \frac{H - H_{ls}}{\mathcal{L}}$),
- H_{ls} : enthalpie liquide à saturation ($KJ.kg^{-1}$),
- P : pression (Pa).

Le terme $\operatorname{div}(\beta x(1-x)\rho\mathcal{L}\mathbf{V}_R)$ est appelé terme de dérive.

Cette équation peut être mise sous forme conservative en utilisant l'équation de conservation de la masse du mélange :

$$\beta\partial_t\rho + \operatorname{div}(\beta\mathbf{G}) = 0. \quad (\text{V.2})$$

On obtient alors une équation sous forme conservative équivalente à (V.1) :

$$\beta\partial_t(\rho H) + \operatorname{div}(\beta\mathbf{G}H) - \operatorname{div}(\beta\chi_T\nabla H) = \beta Q - \operatorname{div}(\beta x(1-x)\rho\mathcal{L}\mathbf{V}_R). \quad (\text{V.3})$$

Pour notre cas test, la pression P et la vitesse massique \mathbf{G} sont des données du problème. Les variables ρ et x sont fonction de H et P . Le coefficient χ_T est proportionnel à $a|\mathbf{G}|L$ où a est la constante de Schlichting [Sch68], L une grandeur typique d'un vortex et $|\cdot|$ la norme Euclidienne. La vitesse relative \mathbf{V}_R est donnée par le modèle de drift-flux de Lellouche-Zolotar [LZ82]. Le terme source Q est lié à la résolution de l'équation de conservation de l'énergie du fluide primaire. L'évaluation de ce terme implique d'autres corrélations physiques faisant intervenir en particulier H et \mathbf{G} .

Les conditions aux limites pour la résolution de l'équation d'enthalpie (V.1) (ou Eq.(V.3)) sont :

- enthalpie spécifique du mélange sur la fenêtre d'entrée côté branche chaude $H = 119,3 KJ.kg^{-1}$ (condition de Dirichlet),
- enthalpie spécifique du mélange sur la fenêtre d'entrée côté branche froide $H = 118,5 KJ.kg^{-1}$ (condition de Dirichlet),
- flux d'enthalpie nul ailleurs que sur la fenêtre d'entrée $\nabla H \cdot \mathbf{n} = 0$ (condition de Neumann homogène) où \mathbf{n} est la normale extérieure unitaire.

Les conditions initiales sont données par un profil d'enthalpie linéaire de $118,5 KJ.kg^{-1}$ sur la base du cylindre à $140 KJ.kg^{-1}$ à la sortie de l'échangeur.

Le critère d'obtention du régime stationnaire recherché est $\frac{\|H^{n+1} - H^n\|_{L^2}}{\|H^n\|_{L^2}\Delta t} \leq 10^{-5} s^{-1}$, où Δt représente pas de temps.

V.3 Approche par domaine fictif avec interface diffuse

Nous avons choisi de valider la méthode de domaine fictif avec interface diffuse introduite au chapitre II sur le cas test Clotaire *Benchmark*. Cette méthode est bien adaptée pour une résolution à l'aide d'éléments finis de Lagrange \mathcal{Q}_1 , ce qui nous permet d'utiliser le code élément fini 3D Génépi [GO96, GBG⁺89] existant. De plus, des nombreuses simulations de Clotaire ont été faites dans le cas d'une discrétisation sur des maillages adaptés à la frontière du domaine physique et une résolution avec des éléments finis. La comparaison entre la méthode de domaine fictif et l'approche "traditionnelle" avec maillage adapté sera donc possible.

V.3.1 Caractérisation géométrique de la frontière immergée

Dans une approche par domaine fictif, le domaine d'étude physique correspondant à la maquette Clotaire est immergé dans un domaine fictif parallélépipédique de section rectangulaire (cf. figures V.5 et V.6).

La frontière immergée approchée est l'union des mailles traversées par la frontière immergée réelle de forme cylindrique. L'intersection de la frontière immergée réelle avec chaque cellule du maillage structuré est calculée analytiquement. Pour chaque cellule traversée, on dispose également de la proportion de volume du domaine physique inclus dans chaque cellule du maillage, notée γ_e . Le maillage du domaine fictif est partitionné en 3 : les cellules strictement internes au domaine physique, celles traversées par la frontière (frontière diffuse) et celles strictement externes. Le rapport du nombre de cellules dans le domaine externe divisé par le nombre total de cellules est proportionnel au rapport des mesures entre le domaine externe et le domaine fictif. Ce rapport est de l'ordre de 15% : cela correspond au surcoût du calcul dû à la résolution sur le domaine fictif.

V.3.2 Traitement des conditions aux limites immergées

Les éléments de l'interface diffuse situés au niveau de la fenêtre d'entrée sont pénalisés pour imposer une condition de **Dirichlet** immergée. La fenêtre d'entrée est discrétisée par l'union des mailles de l'interface diffuse dont la hauteur de la fenêtre d'entrée réelle dépasse au moins la moitié de la hauteur de la maille. Le nombre de couche d'éléments concernés par la pénalisation est donné par la formule :

$$n = \text{Int}\left(\frac{l_e}{h_z} + \frac{1}{2}\right), \quad (\text{V.4})$$

où l_e est la hauteur de la fenêtre d'entrée, h_z le pas de discrétisation selon l'axe z (vertical) et $\text{Int}(f)$ est la fonction de seuillage entier : n est l'entier le plus grand tel que $n \leq \text{abs}(f)$.

L'étude faite dans le chapitre II et dans [RAB07] montre que dans le cas de noeuds de discrétisation situés au sommets des cellules du maillage et pour un coefficient de pénalisation η suffisamment petit, la solution obtenue avec une pénalisation L^2 est la même que celle obtenue avec une pénalisation H^1 . Nous choisissons donc de n'effectuer qu'une pénalisation L^2 afin d'avoir une matrice mieux conditionnée et ainsi résoudre plus rapidement le système linéaire obtenu. Un terme caractéristique d'un échange thermique est rajouté dans l'équation (V.1) sur les mailles de la fenêtre d'entrée approchée :

$$\frac{1}{\eta}(H - H_D). \quad (\text{V.5})$$

Le champ de valeurs H_D est illustré sur la figure V.7 : on impose l'enthalpie spécifique $H_D = 119.3 \text{ KJ.kg}^{-1}$ sur les mailles de la fenêtre d'entrée situées du côté de la branche chaude et $H_D = 118.5 \text{ KJ.kg}^{-1}$ du côté de la branche froide.

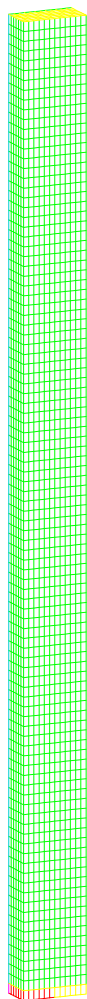


FIG. V.5 – Maillage du domaine fictif.

En ce qui concerne le traitement de la condition aux limites immergée de **Neumann homogène**, il suffit d'imposer un flux nul sur le domaine extérieur. Il n'y a donc pas de saut de flux à travers l'interface immergée et aucun paramètre de correction géométrique de surface n'est requis. Les coefficients de l'équation ainsi que le terme source sont pris nuls dans le domaine externe.

V.3.3 Correction de la porosité

La présence du domaine externe est également prise en compte au niveau du champ de porosité, en calculant un coefficient de porosité par éléments (β_e). Le domaine extérieur est considéré comme un obstacle à l'écoulement.

$$\beta_e = 1 - \tau_e(1 - \beta_0) - (1 - \gamma_e), \quad (\text{V.6})$$

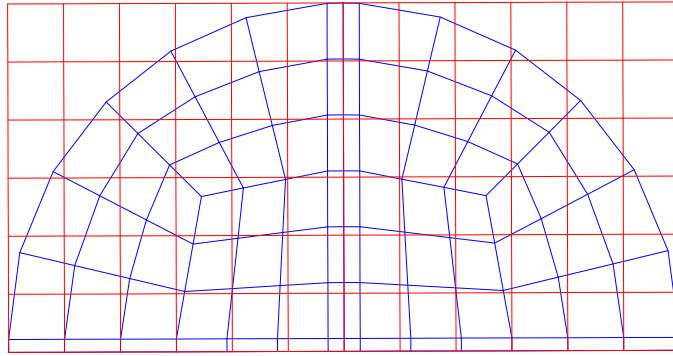


FIG. V.6 – Coupes d'un maillage adapté au domaine physique et d'un maillage cartésien du domaine fictif.

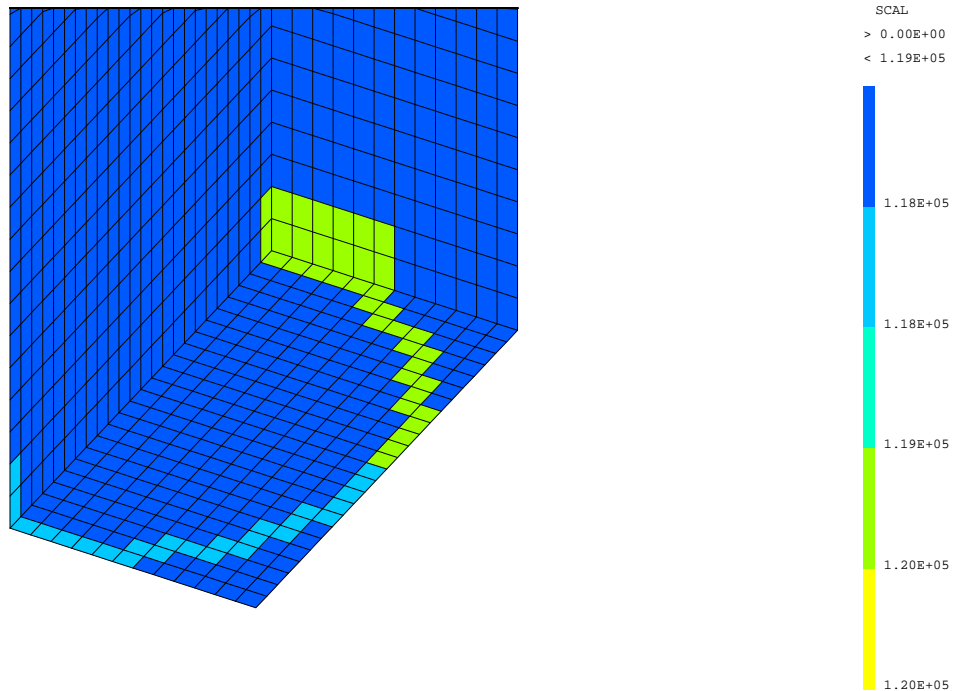


FIG. V.7 – Détail d'un champ de valeurs Dirichlet H_D imposées par pénalisation aux éléments de la frontière immergée diffuse.

où β_0 est la porosité caractéristique dans le faisceau de tubes (environ 0.6 pour Clotaire) et τ_e le taux de présence du faisceau de tubes par élément ($\equiv \omega_s/\omega$ avec ω_s le volume occupé par le *domaine faisceau* dans la cellule d'homogénéisation (m^3)). On rappelle que γ_e est le taux de présence du domaine physique dans chaque élément du maillage.

L'expression $1 - \tau_e(1 - \beta_0)$ correspond à la définition standard de la porosité. Elle est donc diminuée de la proportion de volume occupé par le domaine externe (obstacle). La figure V.8 présente une section du champ de porosités ainsi modifié. On distingue nettement l'espace compris entre le faisceau de tubes et l'enveloppe de l'évaporateur (valeurs supérieures à 0,7, en rouge sur le dessin).

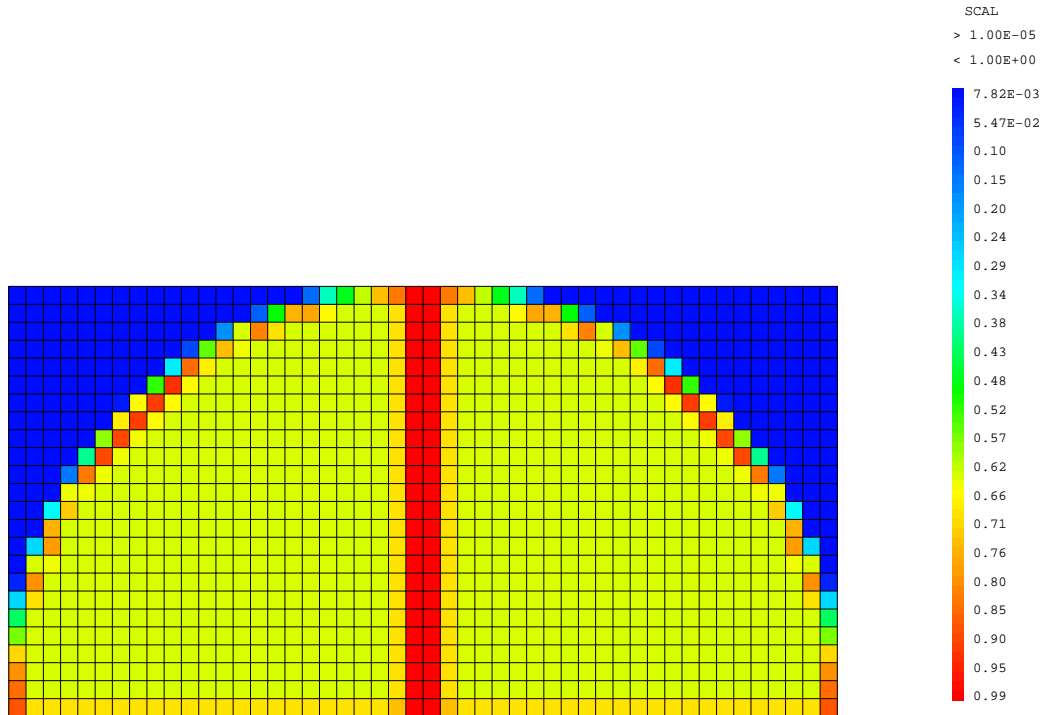


FIG. V.8 – Coupe du champ de porosités aux éléments pour le maillage du domaine fictif.

Afin de ne pas avoir un coefficient de porosité identiquement nul (*i.e.* domaine totalement solide), on impose $\beta_e = 10^{-5}$ sur les mailles du domaine extérieur.

V.3.4 Conditions aux limites sur le domaine fictif

Des conditions de Neumann homogène sont imposées sur les côtés communs de l'enveloppe de Clotaire et du domaine fictif (en base et sortie du cylindre et sur le parallélépipède de Clotaire accolé au demi-cylindre). En ce qui concerne les frontières du domaine fictif dont l'intersection avec les frontières du domaine physique est nulle, des conditions de Dirichlet sont imposées sur les faces de l'enveloppe du domaine fictif situées à la même hauteur que la fenêtre d'entrée approchée. Les valeurs imposées sont égales aux conditions aux limites immergées : $H_D = 119,3 \text{ KJ.kg}^{-1}$ du côté de la branche chaude (couleur rouge sur la figure V.5) et $H_D = 118,5 \text{ KJ.kg}^{-1}$ pour celles côté branche froide (couleur jaune sur la figure V.5). Sur le reste du domaine des conditions de Neumann homogène sont imposées. Le problème résolu sur le domaine fictif est donc une équation de convection-diffusion avec **conditions aux limites mixtes**.

V.4 Résolution numérique

V.4.1 Schéma en temps

Un schéma de Crank-Nicholson (cf. [RT92] par exemple), qui est d'ordre 2 en temps, est utilisé pour discrétiser temporellement l'équation d'enthalpie (V.1). Les termes du membre de droite de cette équation, non linéaires en H , sont explicités. Le schéma de Crank-Nicholson n'est donc appliqué que sur les termes linéaires. Les termes du second membre étant explicites, une condition reliant le pas de temps Δt au pas d'espace h (maximum des diamètres des cellules du maillage) assure la stabilité du schéma de discrétisation en temps. Le terme de dérive étant proche d'un terme de convection, cette condition de stabilité est une condition de CFL avec un coefficient de 2,5 (ce coefficient a été obtenu par des tests numériques précédemment effectués sur le logiciel Génépi).

V.4.2 Méthode d'éléments finis \mathcal{Q}_1

Pour la résolution numérique, une méthode d'éléments finis \mathcal{Q}_1 (cf. [Cia78] par exemple) est utilisée pour résoudre l'équation d'enthalpie (V.1). Le terme de diffusion est alors complété par un terme supplémentaire, dit de correction BTD (*balancing tensor diffusivity* [GCLU84]), qui s'écrit :

$$\operatorname{div}\left(\beta \frac{f}{\rho} (\mathbf{G} \otimes \mathbf{G}) \nabla H\right), \quad (\text{V.7})$$

où $f = 3\Delta t/2$ et \otimes représente le produit tensoriel entre deux vecteurs $[\mathbf{A} \otimes \mathbf{B}]_{ij} = A_i B_j$.

Le but du terme de correction BTD est d'éviter les oscillations liées à la discrétisation centrée du terme de convection.

Les coefficients ρ , \mathbf{G} et χ_T sont pris constants par élément, ainsi que P et le terme source Q . La porosité β est prise aux noeuds (par une moyenne pondérée sur les éléments partageant ce noeud), ainsi que \mathbf{V}_R et $x(1-x)\mathcal{L}$.

V.4.3 Les maillages

Jusqu'à présent, la simulation de la maquette Clotaire se faisait à l'aide d'un maillage adapté du type de celui présenté sur la figure V.4. Ne disposant pas de solution analytique, nous considérons comme solution de référence le champ d'enthalpies calculé avec un maillage adapté comportant 143 360 cellules.

Trois maillages structurés cartésiens du domaine fictif à l'aide de cellules parallélépipédiques rectangles uniformes sont considérés. Ces maillages contiennent respectivement 7 200, 57 600 et 460 800 cellules. Le pas d'espace est divisé par deux dans chaque direction d'un maillage sur l'autre : ces maillages sont donc emboîtés les uns dans les autres. Dans la section horizontale (plan (xy)) du domaine fictif (cf. figure V.6), le pas est d'environ $5,3 \cdot 10^{-2}$ m pour le maillage le plus grossier. Axialement (selon la direction verticale), il vaut environ $9,2 \cdot 10^{-2}$ m. Le pas caractéristique de la discrétisation est pris comme la diagonale des cellules du maillages, soit $1,2 \cdot 10^{-1}$ m pour le maillage grossier à 7 200 cellules. Ce pas est divisé par 2 pour le maillage à 57 600 cellules et par 4 pour celui à 460 800 cellules (environ $3 \cdot 10^{-2}$ m).

L'approximation de la fenêtre d'entrée contient 1, 2 ou 4 couches d'éléments pour les maillages à 7 200, 57 600 et 460 800 cellules respectivement.

V.4.4 Interpolation des champs de vitesses massiques et de pressions

Les champs de vitesses massiques et de pressions sont obtenus à partir d'un calcul sur un maillage adapté dit de référence (143 360 cellules). On ne possède donc pas d'expression analytique de ces champs. Sur les noeuds (respectivement barycentres) du domaine fictif strictement internes au domaine physique, le champ de vitesses massiques (respectivement pressions) est interpolé. Une interpolation tri-linéaire est utilisée pour les vitesses massiques et une restriction canonique est appliquée pour la pression.

Sur les noeuds ou les barycentres situés à l'extérieur du domaine physique mais appartenant à des mailles de l'interface diffuse, les champs obtenus précédemment sur la partie du domaine fictif intérieure au domaine physique sont étendus. Un processus de moyenne permet d'affecter des valeurs aux noeuds ou barycentres externes. De cette façon, tous les noeuds ou barycentres des cellules de l'interface diffuse ont des vitesses et pressions non nulles, voir par exemple la figure V.9.

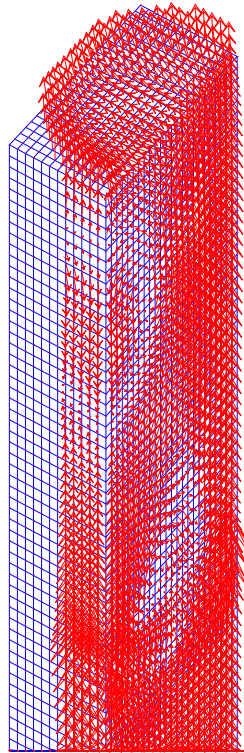


FIG. V.9 – Champ de vitesses massiques de référence interpolé sur le maillage du domaine fictif.

V.4.5 Solveur

Les systèmes linéaires obtenus sont *lissés* (résolution inexacte) à chaque pas de temps avec la méthode itérative CGS [Son89] préconditionnée ILLU [Mei83] (voir aussi Annexe B). Les itérations sont arrêtées si le résidu est réduit d'un facteur 10^7 ou si le nombre d'itérations est supérieur à 20.

V.5 Résultats

Les résultats obtenus en domaine fictif (maillages structurés à 7 200, 57 600 et 460 800 cellules) sont comparés à ceux obtenus avec le maillage adapté de référence (143 360 cellules). Rappelons que, pour cette dernière simulation, H , P et \mathbf{G} sont simultanément calculés.

V.5.1 Critères physiques

D'un point de vue physique, on peut apprécier les résultats des simulations en se basant sur les indicateurs suivants :

- la puissance échangée entre le fluide primaire et le fluide secondaire,
- la distribution des isovalues de l'enthalpie du mélange pour des sections situées aux élévations de 0,05 m (fenêtre d'entrée), 5 m (à mi-hauteur de la maquette, dans le faisceau de tubes) et 8 m (plénum, au dessus des tubes),
- le profil de l'enthalpie le long de lignes verticales dont les positions correspondent à celles de petits, moyens et grands cintres (tubes en U renversé dont le rayon des cintres est plus ou moins important au niveau du "chignon"), voir figure V.10.

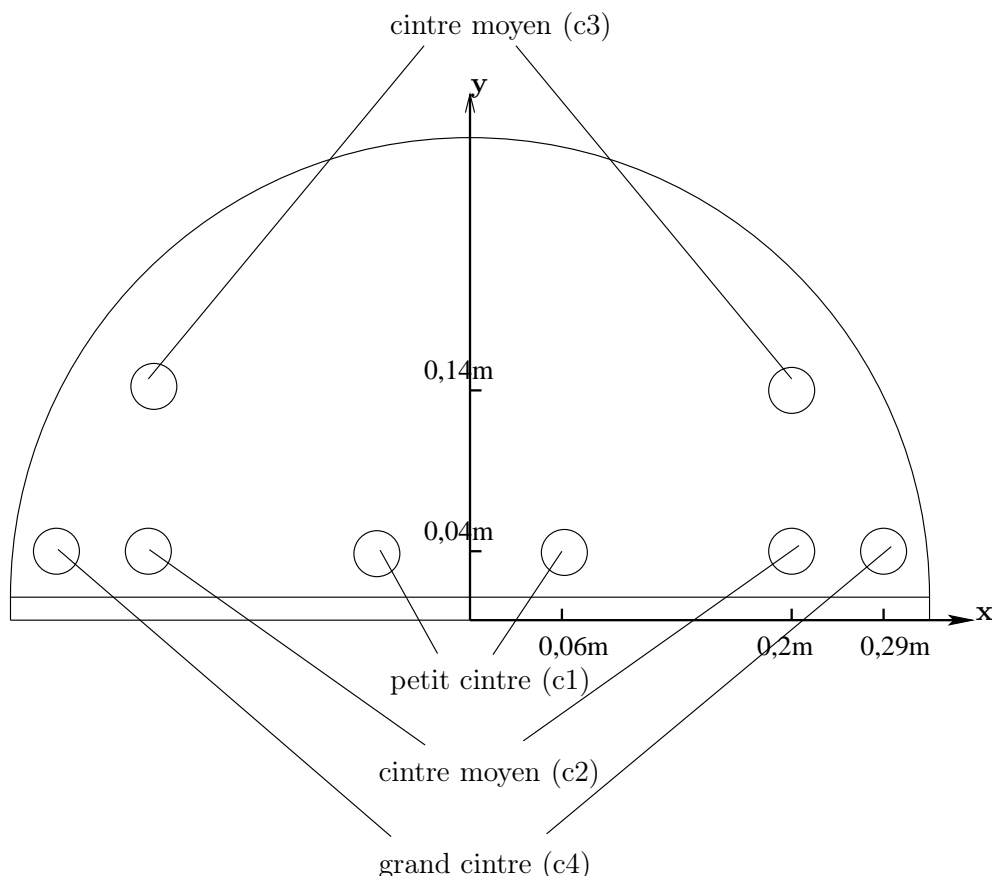


FIG. V.10 – Définition des petits, moyens et grands cintres à l'aide d'une coupe horizontale de la maquette.

V.5.2 Convergence et temps de calcul

Compte tenu de l'ordre de grandeur des autres coefficients de l'équation, le coefficient de pénalisation η est choisi égal à 10^{-5} . Des simulations ont été réalisées sans problème avec des valeurs de $\eta = 10^{-9}$, les valeurs d'enthalpie obtenues sont sensiblement les mêmes mais la convergence vers le régime stationnaire est plus lente (matrice du système mal conditionnée).

Dans la table V.1 sont reportés les temps de calculs et nombre de pas de temps effectués pour chaque maillage du domaine fictif. A titre de comparaison, les mêmes informations sont données pour le cas d'un calcul de la distribution de l'enthalpie avec un maillage adapté de 5 330 cellules, à vitesses massiques et pressions données (comme pour la résolution en domaine fictif). Bien que le nombre de cellules de ce maillage soit proche de celui du maillage grossier du domaine fictif (7 200 cellules), le nombre de pas de temps est presque triplé. Ceci est dû au fait que le maillage adapté possède d'importantes hétérogénéités entre les dimensions des cellules du maillage de façon à être le mieux adapté possible aux obstacles singuliers. Par exemple, l'épaisseur de la couche d'éléments incluant la plaque de sortie (simulant la perte de charge des séparateurs/sécheurs) est de 4.10^{-2} m, à comparer à $9,2.10^{-2}$ m pour le maillage cartésien. Suivant la condition CFL, le pas de temps est plus petit dans le cas adapté. Une autre conséquence est le temps CPU du cas adapté est supérieur à celui du cas non adapté, malgré le surcoût lié au traitement des cellules situées hors du domaine physique (environ 15%). De plus, la précision de la solution obtenue dans le cas d'un maillage adapté avec 5 330 cellules est un peu moins bonne que celle obtenue à partir du maillage grossier du domaine fictif avec 7 200 cellules. Rappelons que le code de calcul utilisé est le même dans tous les cas et ne tire aucun avantage de la structuration cartésienne du maillage (en termes de calcul et de stockage des matrices élémentaires ou de solveurs rapides par exemple). On peut donc présumer qu'une simulation à l'aide d'un code basé sur des maillages cartésiens permettrait d'obtenir des résultats en temps de calcul et en coût de stockage encore meilleurs.

Nb cellules	Nb pas de temps	Temps CPU (s)
5 330 (mail. adapt.)	1270	175,96
7 200	441	95,83
57 600	1080	1564,71
460 800	2719	34977,91

TAB. V.1 – Convergences des calculs avec une méthode de domaine fictif.

V.5.3 Précisions des simulations

La table V.2 permet d'apprécier la précision de l'estimation de la puissance échangée entre le fluide primaire et le fluide secondaire avec la méthode de domaine fictif avec interface diffuse.

Nb cellules	Puissance échangée (MW)	Erreur relative
143 360 (mail. adapt.)	1,48873	-
7 200	1,49054	$1,1.10^{-3}$
57 600	1,48851	$1,5.10^{-4}$
460 800	1,48763	$7,4.10^{-4}$

TAB. V.2 – Puissance échangée entre le fluide primaire et le fluide secondaire pour les calculs avec une méthode de domaine fictif.

Nous allons présenter les résultats les plus significatifs des simulations, des compléments étant donnés dans la section suivante. Des isovaleurs de H en différentes hauteurs de la maquette (cf. section V.5.1) sont portées sur les figures V.11 à V.13. Ces figures présentent en parallèle les isovaleurs obtenues pour le cas de référence adapté (en haut) et pour la méthode de domaine fictif sur le maillage à 57 600 cellules (en bas).

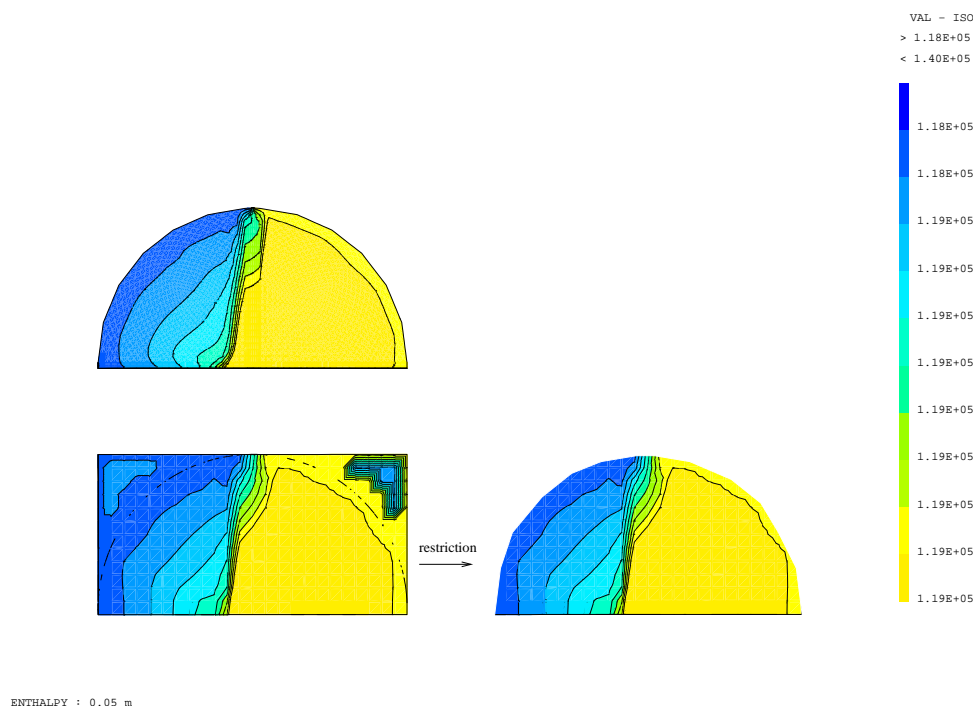


FIG. V.11 – Isovaleurs de l'enthalpie sur une section située à une hauteur de 0,05 m (fenêtre d'entrée) : maillage de référence adapté (en haut) et maillage cartésien à 57 600 cellules (en bas).

Les résultats permettent de constater des performances de la méthode de domaine fictif mise en œuvre. En particulier, les lignes d'isovaleurs sont bien perpendiculaires à la surface immergée. Toutefois, on constate une sur-évaluation de la valeur de l'enthalpie en haut du plénum en branche froide (cf. figure V.13). Une discrétisation spatiale plus importante (460 800 cellules) conduit à une meilleure prédiction de l'enthalpie à cet endroit, cf. figure V.24 en section V.6.2.

Ceci souligne l'intérêt et la nécessité de combiner des méthodes de raffinements locaux de maillage aux méthodes de domaine fictif. Cependant nous n'avons pas procédé à cette amélioration ici car la mise en place d'une méthode de raffinement de maillage aurait été trop coûteuse sur un code ne tenant pas compte des propriétés des maillages structurés cartésiens. Le but des simulations présentées dans ce chapitre était de valider l'approche domaine fictif sur un cas industriel, la combinaison avec le raffinement de maillage ne posant aucune problème au niveau de la modélisation. Les isovaleurs de l'enthalpie obtenues pour le maillage grossier (7 200 cellules) et fin (460 800 cellules) du domaine fictif sont présentés dans la section suivante (section V.6).

Les profils de l'enthalpie suivant différentes lignes verticales font l'objet des figures V.14 à V.17. Les solutions obtenues avec l'ensemble des maillages cartésiens sont comparées à la solution de référence. Pour réaliser ces profils, 769 points d'interpolation tri-linéaire ont été utilisés. La notation '+' ou '-' sur les figures suivantes est relative au signe de la coordonnée de x . Dans notre cas, quand x est positif on est en branche chaude et quand x est négatif, on est en branche froide.

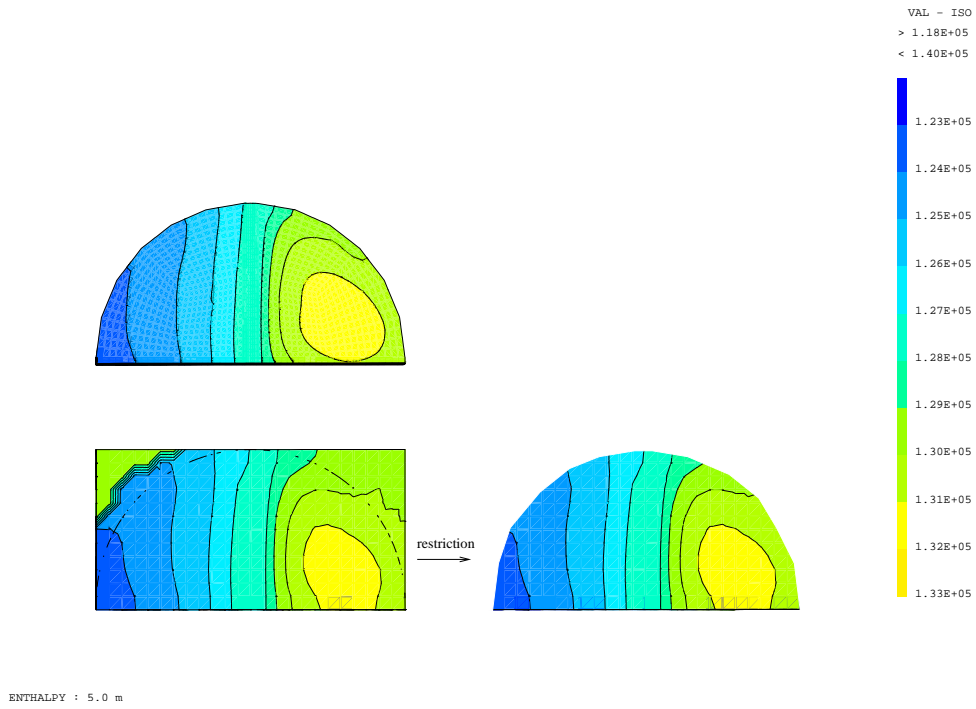


FIG. V.12 – Isovaleurs de l’enthalpie sur une section située à une hauteur de 5 m (mi-hauteur) : maillage de référence adapté (en haut) et maillage cartésien à 57 600 cellules (en bas).

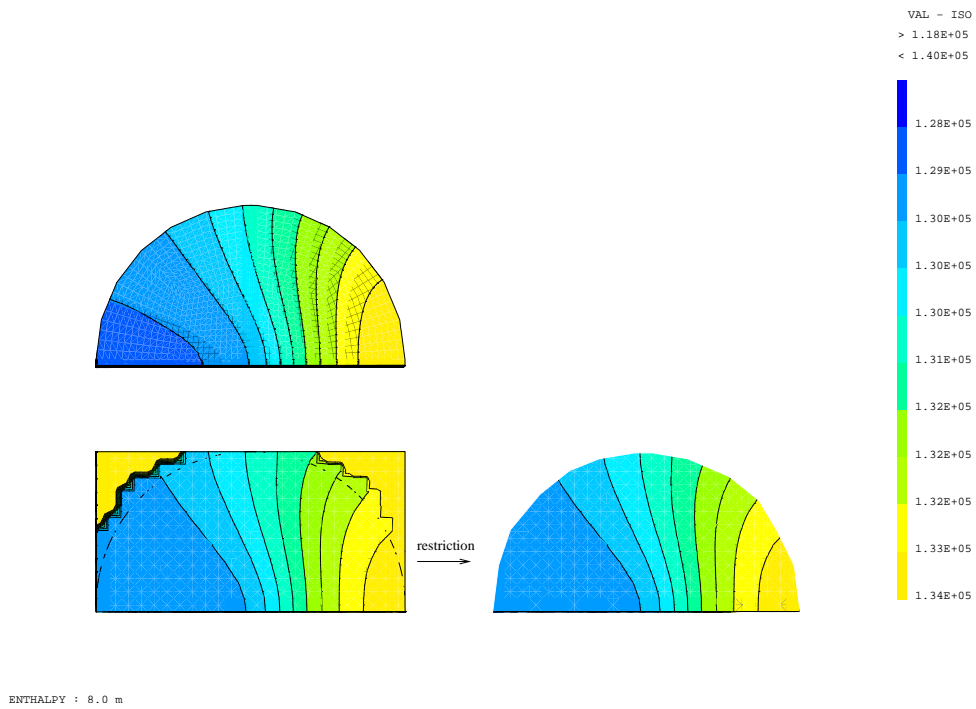


FIG. V.13 – Isovaleurs de l’enthalpie sur une section située à une hauteur de 8 m (plénium) : maillage de référence adapté (en haut) et maillage cartésien à 57 600 cellules (en bas).

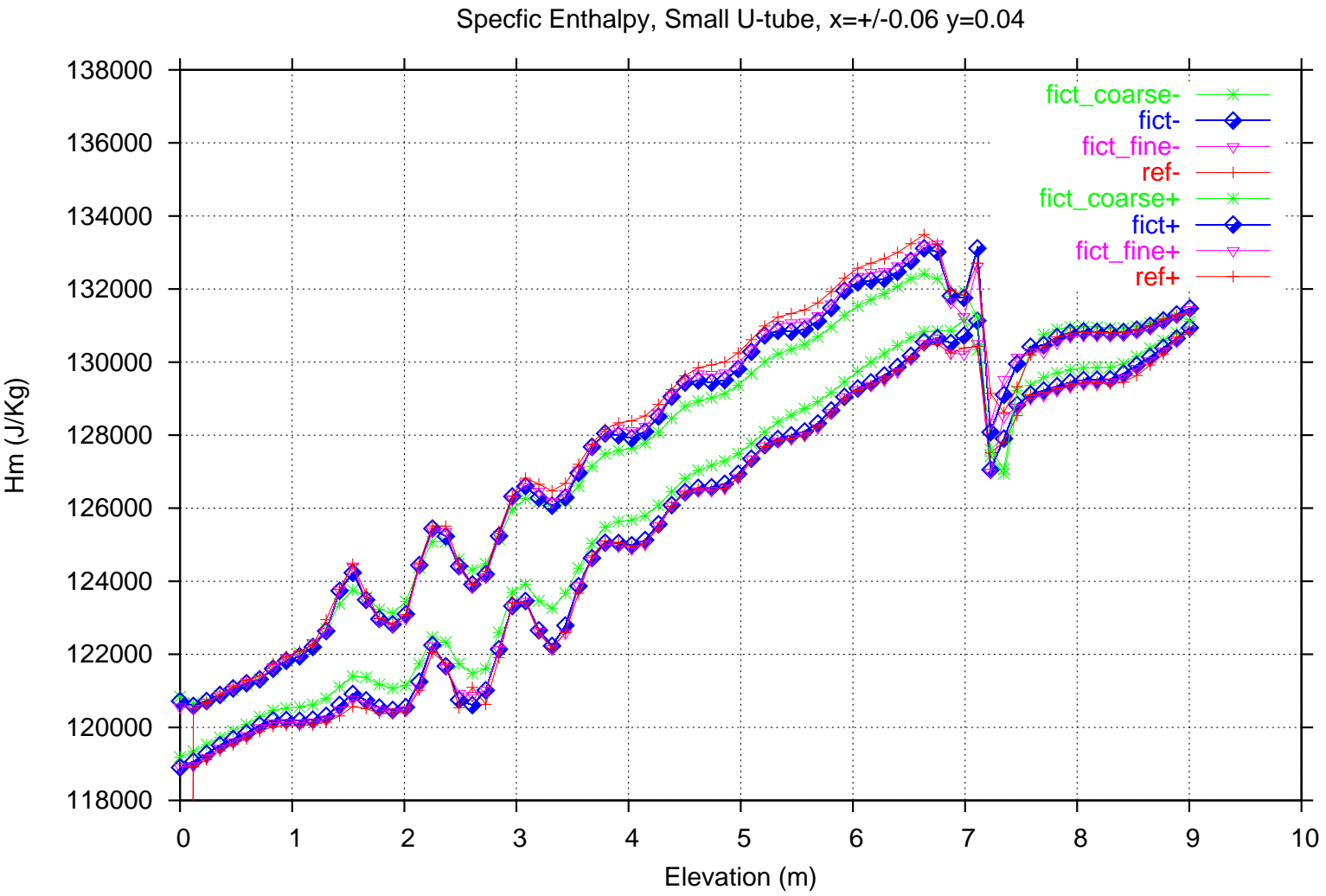


FIG. V.14 – Profils de l'enthalpie spécifique à la position d'un petit cintre (c1) : maillages cartésiens à 7 200 ($fict_{coarse}$), 57 600 ($fict$) et 460 800 ($fict_{fine}$) cellules et cas de référence (ref). La notation $+$ ou $-$ est relative au signe de la coordonnée x

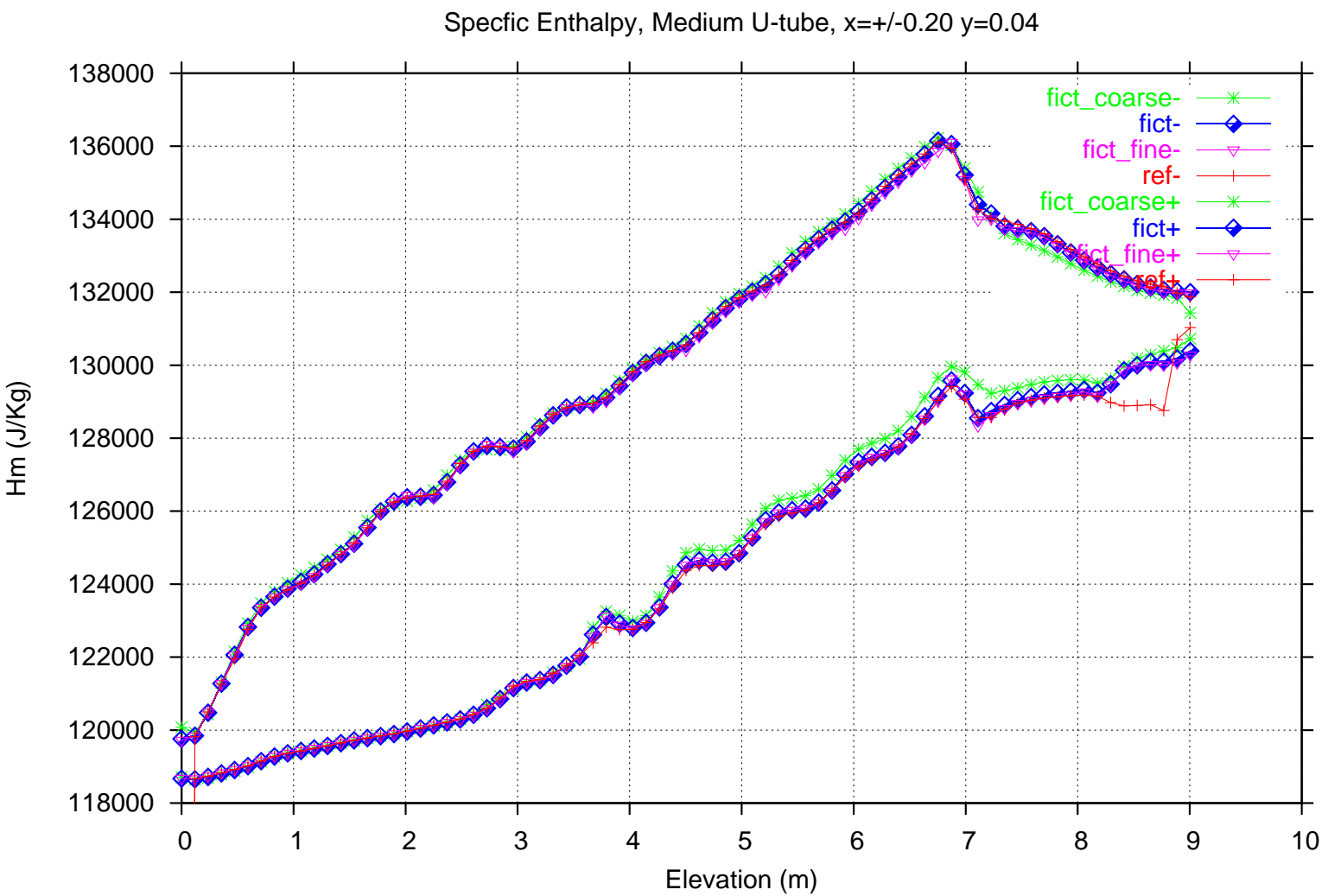


FIG. V.15 – Profils de l'enthalpie spécifique à la position d'un cintre moyen (c2) : maillages cartésiens à 7 200 (fict_coarse), 57 600 (fict) et 460 800 (fict_fine) cellules et cas de référence (ref). La notation '+' ou '-' est relative au signe de la coordonnée x

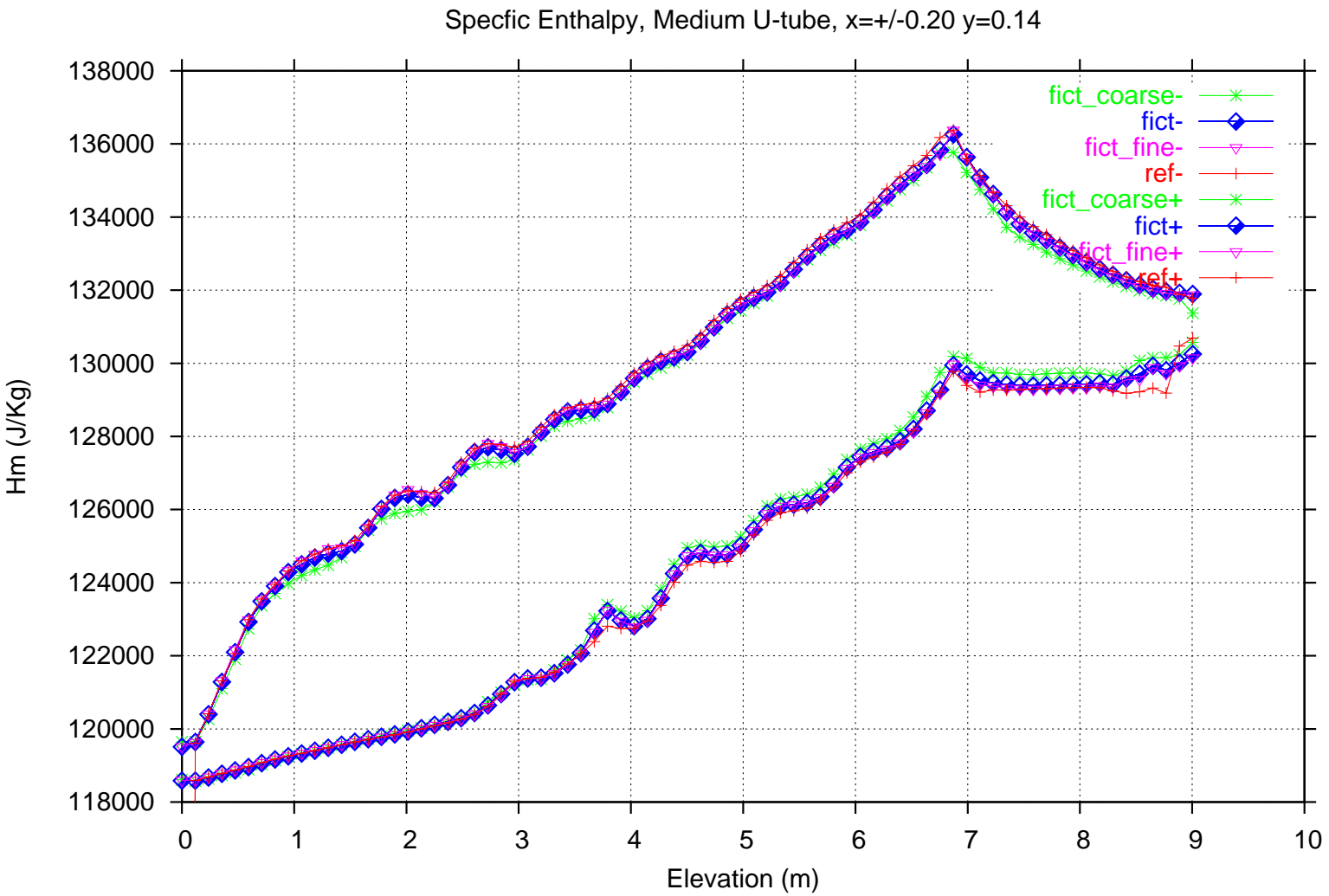


FIG. V.16 – Profils de l'enthalpie spécifique à la position d'un cintre moyen (c3) : maillages cartésiens à 7 200 (fict_coarse), 57 600 (fict) et 460 800 (fict_fine) cellules et cas de référence (ref). La notation '+' ou '-' est relative au signe de la coordonnée x

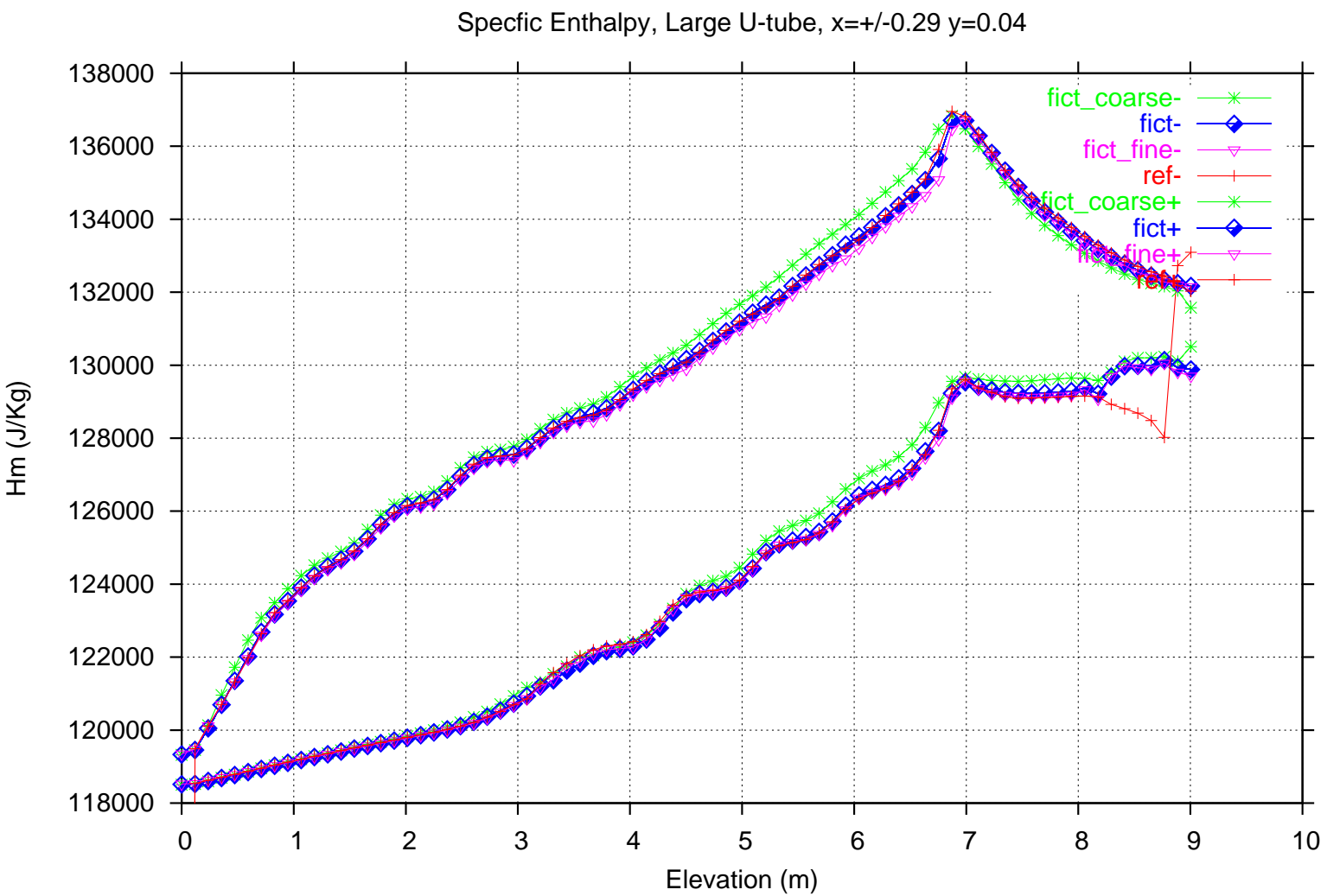


FIG. V.17 – Profils de l'enthalpie spécifique à la position d'un grand cintre (c4) : maillages cartésiens à 7 200 (fict_coarse), 57 600 (fict) et 460 800 (fict_fine) cellules et cas de référence (ref). La notation '-' ou '+' est relative au signe de la coordonnée x

Les profils de l'enthalpie obtenus avec une méthode de domaine fictif avec interface diffuse sont très satisfaisants. En effet, les profils obtenus sont très proches des profils de référence, et la méthode de domaine fictif converge en maillage car plus le maillage du domaine fictif est fin, plus la solution obtenue est proche (voire confondue) avec la solution de référence. Remarquons que dans le cas d'un grand cintre (c4) (figure V.17), un artefact numérique est visible au niveau de la solution obtenue avec le maillage adapté de référence au niveau du plénum en branche froide. En effet, l'enthalpie diminue puis augmente fortement, au lieu d'augmenter de façon monotone en se rapprochant de la branche chaude. Si on regarde de plus près la construction du maillage adapté, on s'aperçoit que cet artefact se produit dans une zone où l'écoulement est fortement perturbé (tourbillons) et où la différence de hauteur entre des cellules voisines du maillage est de l'ordre d'un facteur 10 (les cellules sont très fines près de la plaque de sortie). La résolution numérique atteint ses limites à cet endroit. Ce phénomène apparaît aussi légèrement dans les profils de référence sur le cintre moyen (c2). Dans ce cas, les résultats obtenus en domaine fictif sont plus précis car ils n'utilisent que des maillages uniformes.

Quantitativement, les erreurs entre les valeurs de références et celles obtenues par la méthode de domaine fictif sont calculées avec une norme L^2 discrète :

$$\|e_h\|_{L^2} = \frac{\left(\sum_{l=1,N} (H(l) - H_{ref}(l))^2 \right)^{0.5}}{\left(\sum_{l=1,N} (H_{ref}(l))^2 \right)^{0.5}} \quad (V.8)$$

où N est le nombre de points d'interpolation sur les lignes. Comme indiqué sur la figure V.18, l'erreur diminue avec le pas de maillage. La solution obtenue avec la méthode de domaine fictif converge vers la solution approchée de référence : l'erreur relative atteint un plateau à partir du maillage à 57 600 cellules. Les artefacts numériques sur la solution de référence (cf. profils de l'enthalpie figure V.17 et figure V.15) entâchent le calcul de l'erreur pour le grand cintre en branche froide (c4-) ainsi que pour le cintre moyen c2 en branche froide (c2-). On peut remarquer qu'en branche chaude pour ces mêmes cintres, le maillage moyen du domaine fictif (57 600 cellules) semble donner de meilleurs résultats que le maillage fin (460 800 cellules). Ici encore il se peut que ce soit la solution obtenue avec l'approche domaine fictif qui soit plus proche de la solution réelle que la solution sur le maillage adapté de référence. Dans tous les cas, l'erreur relative est inférieure à $5 \cdot 10^{-3}$. Ce niveau de précision est tout à fait correct pour la réalisation de simulations industrielles d'un composant nucléaire, pour lesquelles les incertitudes liées aux modélisations physiques sont bien plus grandes que celles liées aux résolutions numériques.

Tous les résultats obtenus concluent à la précision et à la performance de la méthode de domaine fictif avec interface diffuse introduite au chapitre II et mise en œuvre dans le cas industriel d'une maquette de générateur de vapeur. La validation de l'approche avec interface fine et sauts immergés introduite au chapitre III et dans [RAB06] nécessite un travail informatique supplémentaire. Il faut détacher le module de résolution numérique (à l'aide de volumes finis avec saut de flux et de solution) du reste du calcul (donnant la pression, vitesse massique et terme source). Ce travail va être effectué au CEA dans un avenir proche.

“L'outil” domaine fictif à présent disponible est un premier pas vers la simulation plus précise des interactions fluide/structure au niveau des obstacles (tubes du faisceau) ou des surfaces libres à l'extérieur de l'enveloppe de l'évaporateur... L'équation bilan de quantité de mouvement doit alors être rajoutée aux équations résolues.

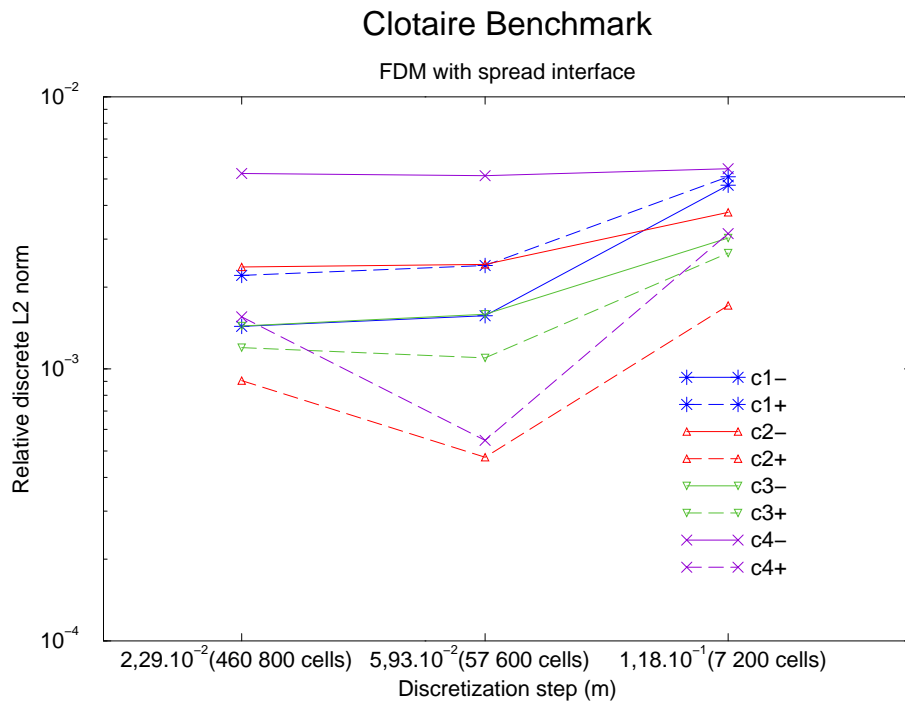


FIG. V.18 – Erreur relative de l'enthalpie spécifique en norme L^2 discrète en fonction de la diagonale de la cellule. La notation '+' ou '-' est relative au signe de la coordonnée x .

V.6 Résultats complémentaires

V.6.1 Calcul avec 7 200 cellules

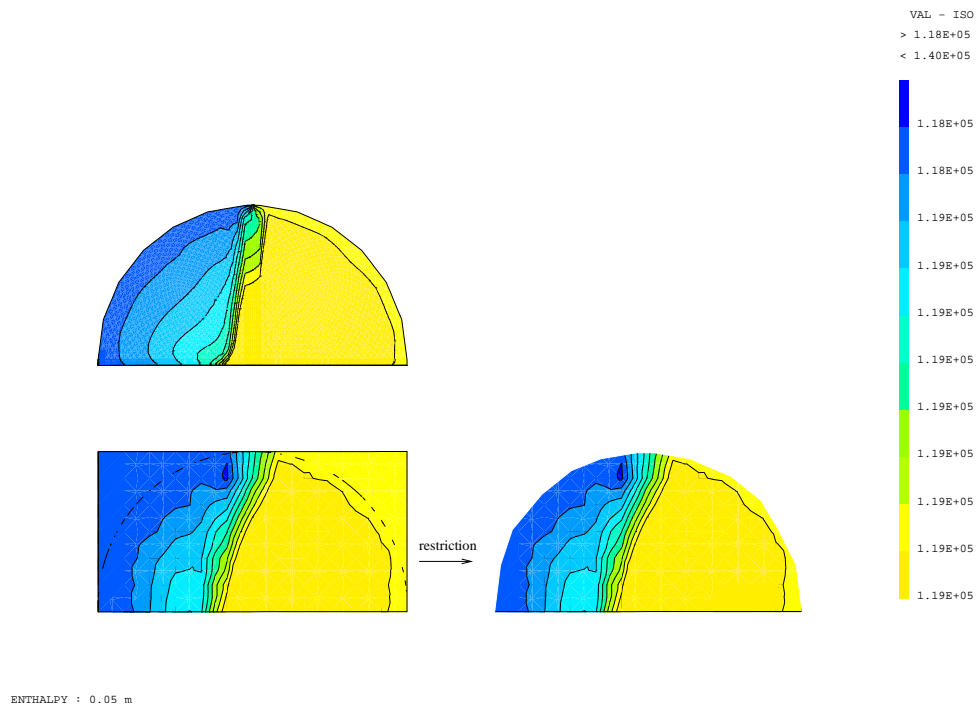


FIG. V.19 – Isovaleurs de l'enthalpie sur une section située à une hauteur de 0,05 m (fenêtre d'entrée) : maillage de référence adapté (en haut) et maillage cartésien à 7 200 cellules (en bas).

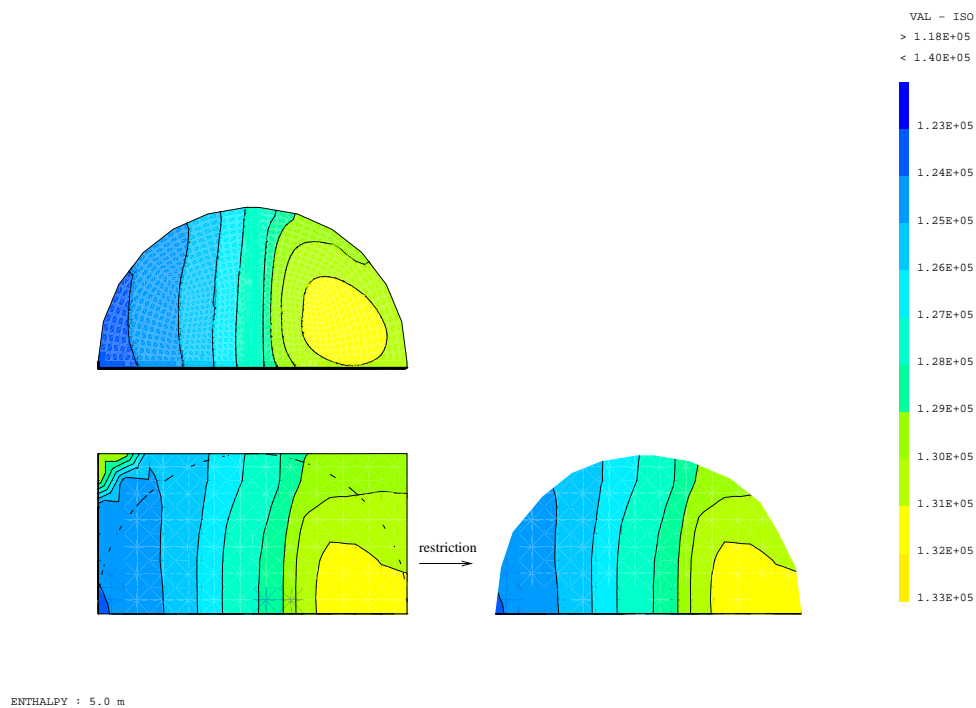


FIG. V.20 – Isovaleurs de l'enthalpie sur une section située à une hauteur de 5 m (mi-hauteur) : maillage de référence adapté (en haut) et maillage cartésien à 7 200 cellules (en bas).

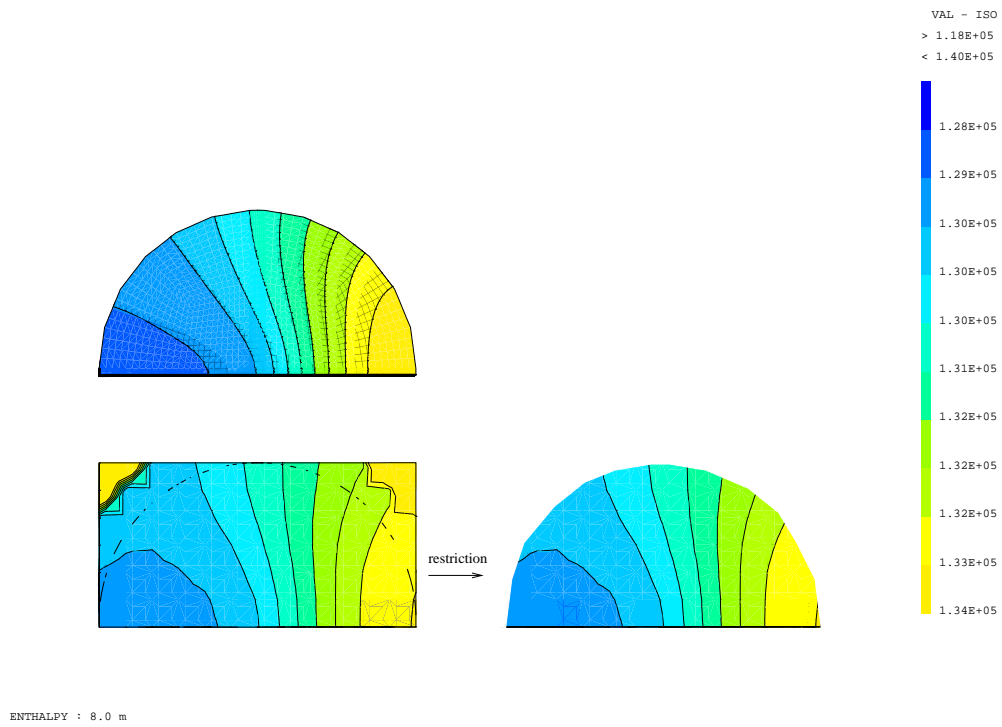


FIG. V.21 – Isovaleurs de l'enthalpie sur une section située à une hauteur de 8 m (plénum) : maillage de référence adapté (en haut) et maillage cartésien à 7 200 cellules (en bas).

V.6.2 Calcul avec 460 800 cellules

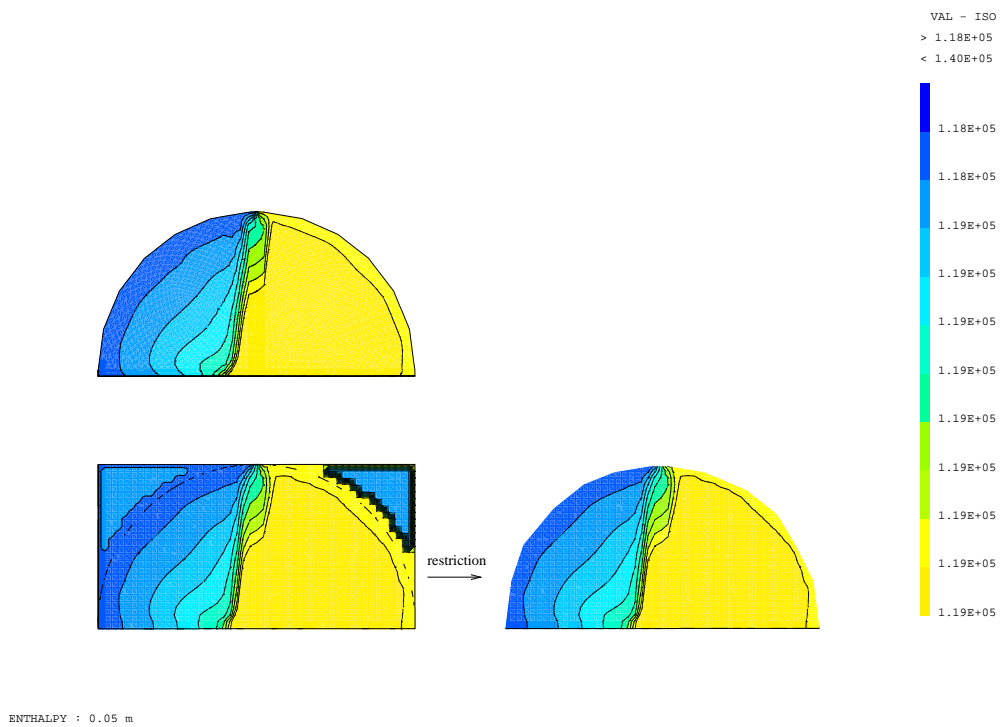


FIG. V.22 – Isovaleurs de l'enthalpie sur une section située à une hauteur de 0,05 m (fenêtre d'entrée) : maillage de référence adapté (en haut) et maillage cartésien à 460 800 cellules (en bas).

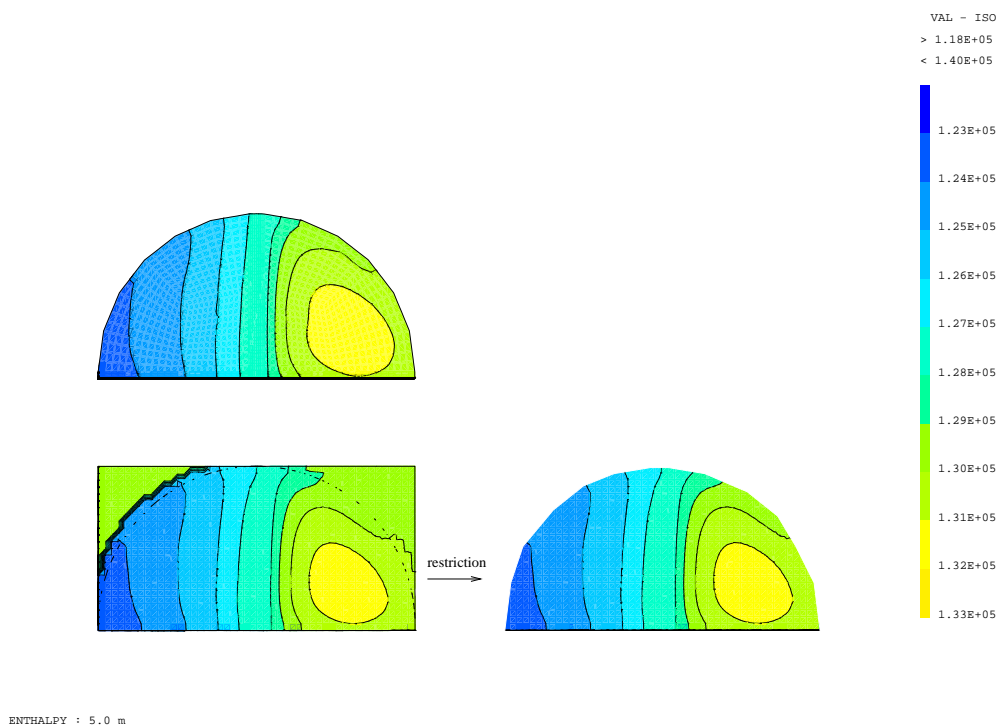


FIG. V.23 – Isovaleurs de l'enthalpie sur une section située à une hauteur de 5 m (mi-hauteur) : maillage de référence adapté (en haut) et maillage cartésien à 460 800 cellules (en bas).

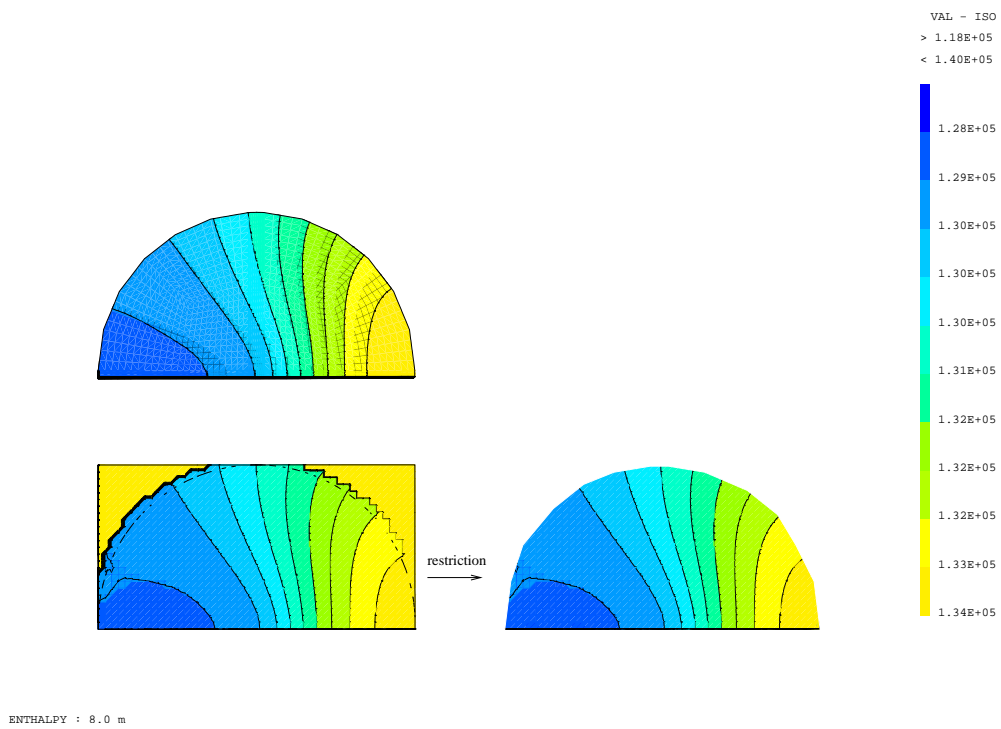


FIG. V.24 – Isovaleurs de l'enthalpie sur une section située à une hauteur de 8 m (plénium) : maillage de référence adapté (en haut) et maillage cartésien à 460 800 cellules (en bas).

Conclusion

Deux méthodes de domaine fictif ont été étudiées pour résoudre des problèmes elliptiques avec conditions aux limites générales immergées. Ces méthodes sont construites à partir d'une même idée consistant à n'utiliser qu'un unique maillage du domaine fictif de calcul : un maillage cartésien, non localement modifié, permettant ainsi l'utilisation de solveurs rapides. Aucune inconnue supplémentaire n'est introduite près de la frontière immergée. La frontière immergée approchée, sur laquelle sont imposées les conditions aux limites immergées, est alors définie à partir du maillage cartésien du domaine de calcul. La première méthode repose sur une modélisation diffuse de la frontière immergée dans le domaine fictif alors que la deuxième méthode s'appuie sur une représentation de cette frontière immergée par une hypersurface. Pour chacune de ces modélisations, toutes les conditions aux limites générales immergées sont traitées à travers une seule formulation générique du problème fictif. Le schéma numérique utilisé n'est donc pas modifié localement. Ces méthodes de domaine fictif présentent l'avantage d'être facilement implémentables et d'avoir un bon rapport entre la précision de la solution approchée obtenue et le temps de calcul. La structure cartésienne du maillage rend naturelle la combinaison de ces méthodes avec des algorithmes de raffinement local de maillage multi-niveaux. Deux algorithmes de raffinement sont implémentés : un algorithme déjà existant basé sur la restriction de la solution est combiné avec la méthode à interface diffuse, tandis qu'un algorithme de restriction de flux avec patches locaux est adapté pour la méthode à interface fine. Cette combinaison des méthodes de domaine fictif avec des algorithmes de raffinement local de maillage autour de la frontière immergée permet d'améliorer la précision de la solution pour un coût de calcul additionnel peu élevé. Ces deux méthodes ont été validées sur des exemples académiques avec des méthodes de discrétisation de type éléments finis \mathcal{Q}_1 et volumes finis centrés. L'approche à interface diffuse a été aussi testée avec succès sur un cas test industriel. Enfin, une analyse de convergence permet de confirmer que l'ordre de convergence en maillage de ces méthodes est contrôlé par l'erreur d'approximation de la frontière immergée. Ainsi ces méthodes sont du premier ordre en norme L^2 .

Parmi les perspectives à court terme de ce travail, l'approche de type interface diffuse pourrait être aussi combinée avec un algorithme de raffinement de maillage avec des patches locaux sur chaque niveau de raffinement. Le même solveur structuré serait ainsi utilisé de façon récursive comme dans l'approche avec interface fine. L'approche avec interface fine est très attractive pour des applications industrielles car l'introduction de conditions de transmissions sur cette interface permet de s'isoler de la solution sur le domaine fictif extérieur. Ainsi il serait intéressant de pouvoir tester cette approche dans un cas industriel. La combinaison de cette méthode avec un raffinement de maillage basé sur des patches locaux entraîne un recouvrement de ces patches. Des itérations de décomposition de domaine sont alors réalisées pour lisser la solution. Dans le cas d'une équation de diffusion pure (pas de terme de convection), ces itérations ne sont pas nécessaires pour une interface fine dite "extérieure", c'est à dire définissant un domaine physique approché incluant strictement le domaine physique réel. Pour d'autres types de modélisation de la frontière immergée, un rassemblement de certains patches locaux permettrait aussi d'éviter les itérations de lissage et ainsi

gagner en temps de calcul. Enfin, l'ordre de convergence de ces méthodes pourrait être amélioré, notamment en rajoutant des inconnues sur la frontière immergée, mais il semble alors que nous nous éloignerions de la philosophie des méthodes de domaine fictif introduites dans cette thèse...

Parmi les perspectives à plus long terme ouvertes par les performances des méthodes de domaine fictif mises en œuvre ici, une alternative aux algorithmes de raffinement local de maillage multi-niveaux serait de résoudre le problème défini sur le domaine fictif avec des méthodes de multirésolution (basées sur une analyse de type ondelettes) bien adaptées aux maillages cartésiens. Par ailleurs, le cas de frontières mobiles et/ou déformables ne semble poser aucun problème de modélisation supplémentaire. Ce type de problèmes reste cependant à être testé, notamment dans le cas de frontières déformables où il faut alors combiner l'approche domaine fictif à des approches de suivi d'interface. Il s'avère ensuite naturel de passer à l'étude d'un problème de Stokes, puis aux équations de Navier-Stokes. Afin de pouvoir facilement combiner ces méthodes de domaine fictif avec des algorithmes de raffinement de maillage, une discrétisation des équations avec des inconnues colocalisées serait souhaitable. Récemment, de nombreuses approches ont été proposées dans ce cadre, notamment en volumes finis. L'utilisation de telles approches dans le cadre domaine fictif semble être très prometteuse. La modélisation complète de phénomènes physiques complexes (interactions fluide/structure, écoulements diphasiques...) par les méthodes de domaine fictif introduites ici serait alors à portée de main.

ANNEXES

Annexe A

L'élément fini Q_1

Sommaire

A.1	Eléments finis de Lagrange	173
A.2	Eléments finis parallélotopes	174
A.3	L'élément fini Q_1	175

Nous allons ici présenter brièvement les caractéristiques principales de l'élément fini \mathbb{Q}_1 dans \mathbb{R}^2 . La généralisation à \mathbb{R}^n se déduisant directement des propriétés dans \mathbb{R}^2 . Nous rappelons tout d'abord la notion générale d'élément fini de Lagrange avant de s'intéresser à l'élément fini "n-parallélotope" et plus particulièrement à l'élément fini appelé \mathbb{Q}_1 . Plus pour de détails, le lecteur pourra se référer à [RT92].

A.1 Eléments finis de Lagrange

Soient :

- (i) K une partie compacte de \mathbb{R}^n , connexe et d'intérieur non vide,
- (ii) $\Sigma = \{a_j\}_{j=1}^N$ un ensemble fini de N points distincts de K ,
- (iii) P un espace vectoriel de dimension finie de fonctions de $K \rightarrow \mathbb{R}$.

Définition A.1. L'ensemble Σ est dit P -unisolvant si et seulement si, étant donnés N scalaires réels quelconques $\{\alpha_j\}_{1 \leq j \leq N}$, il existe une unique fonction $p \in P$ telle que :

$$p(a_j) = \alpha_j, \quad 1 \leq j \leq N.$$

Définition A.2. Lorsque l'ensemble Σ est P -unisolvant, le triplet (K, P, Σ) est appelé élément fini de Lagrange.

Etant donné un élément fini de Lagrange (K, P, Σ) , il existe donc pour tout entier i , $1 \leq i \leq N$, une fonction p_i et une seule telle que

$$p_i(a_j) = \delta_{ij}, \quad 1 \leq j \leq N \tag{A.1}$$

où δ est le symbole de Kronecker, $\delta_{ij} = \begin{cases} 0 & \text{si } j \neq i \\ 1 & \text{si } j = i \end{cases}$.

Plus généralement, pour tout $v : K \rightarrow \mathbb{R}$, il existe une unique fonction $p \in P$ interpolant v sur Σ , c'est-à-dire vérifiant

$$p(a_j) = v(a_j), \quad 1 \leq j \leq N. \tag{A.2}$$

En effet, il suffit de prendre $p = \sum_{i=1}^N v(a_i)p_i$.

Définition A.3. Etant donné un élément fini de Lagrange (K, P, Σ) , les N fonctions $\{p_i\}_{1 \leq i \leq N}$ définies par (A.1) sont appelées fonctions de base (ou fonctions de forme). On appelle opérateur de P -interpolation de Lagrange sur Σ l'opérateur Π qui à toute fonction v définie sur K associe la fonction Πv définie par

$$\Pi v = \sum_{i=1}^N v(a_i)p_i, \tag{A.3}$$

et Πv est dit le P -interpolé de Lagrange de v sur Σ .

On va à présent pouvoir générer une famille d'éléments finis à partir d'un élément fini de Lagrange de référence $(\hat{K}, \hat{P}, \hat{\Sigma})$. Soit F une application de \hat{K} dans \mathbb{R}^n , on suppose que

$$K = F(\hat{K}) \tag{A.4}$$

est une partie compacte de \mathbb{R}^n , connexe et d'intérieur non vide.

Théorème A.1. *On suppose que l'application F est injective. Soit $(\hat{K}, \hat{P}, \hat{\Sigma})$ un élément fini de Lagrange, alors le triplet (K, P, Σ) défini par*

$$K = F(\hat{K}) \quad (\text{A.5})$$

$$P = \{p : K \rightarrow \mathbb{R}; p \circ F \in \hat{P}\} \quad (\text{A.6})$$

$$\Sigma = F(\hat{\Sigma}) \quad (\text{A.7})$$

est un élément fini de Lagrange.

REMARQUE. *L'application F est une bijection de \hat{K} sur K (d'après l'injectivité de \hat{K} sur \mathbb{R} et (A.4)).*

Définition A.4. *Deux éléments finis de Lagrange $(\hat{K}, \hat{P}, \hat{\Sigma})$ et (K, P, Σ) sont dits équivalents s'il existe une bijection F de \hat{K} sur K vérifiant (A.6) et (A.7). De plus, lorsque la bijection F est une application affine les éléments finis sont dits affine-équivalents.*

REMARQUE. *Soient $\hat{p}_i, 1 \leq i \leq N$, les fonctions de base relatives à l'élément fini $(\hat{K}, \hat{P}, \hat{\Sigma})$ et $F^{-1} : K \rightarrow \hat{K}$ l'application réciproque de F de \hat{K} sur K (F^{-1} est aussi bijective). Soient $p_i, 1 \leq i \leq N$, les fonctions de K dans \mathbb{R} définies par*

$$p_i = \hat{p}_i \circ F^{-1}, \quad 1 \leq i \leq N. \quad (\text{A.8})$$

On a alors

$$p_i(a_j) = \hat{p}_i(F^{-1}(a_j)) = \hat{p}_i(\hat{a}_j) = \delta_{ij}, \quad 1 \leq j \leq N,$$

où $\hat{a}_j, 1 \leq j \leq N$, sont les N points distincts de l'ensemble $\hat{\Sigma}$.

Les fonctions p_i sont ainsi les fonctions de base relatives à l'élément fini (K, P, Σ) .

A.2 Éléments finis parallélotopes

On suppose à présent que l'élément géométrique K est un n -parallélotope de \mathbb{R}^n . Lorsque $n = 2$, on appellera K un parallélogramme.

Construisons un élément fini de référence $(\hat{K}, \hat{P}, \hat{\Sigma})$ à partir duquel seront déduits les éléments affine-équivalents.

On prend pour élément géométrique de référence \hat{K} l'hypercube unité $[0, 1]^n$ de \mathbb{R}^n . Pour tout entier $k \geq 0$, on désigne par \mathcal{Q}_k l'espace des polynômes de degré inférieur ou égal à k par rapport à chacune des variables :

$$q \in \mathcal{Q}_k \iff \begin{cases} q(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{i} \in [0, k]^n} \alpha_{\mathbf{i}} \mathbf{x}^{\mathbf{i}}, \\ \mathbf{x} = (x_1, \dots, x_n), \quad \mathbf{i} = (i_1, \dots, i_n), \quad 0 \leq i_s \leq k \quad \forall s \in [1, n], \\ \alpha_{\mathbf{i}} \in \mathbb{R} \end{cases} .$$

$$\dim(\mathcal{Q}_k) = (k + 1)^n.$$

On définit pour tout entier $k \geq 1$, l'ensemble $\hat{\Sigma}_k$ des points de \hat{K} :

$$\hat{\Sigma}_k = \left\{ \hat{\mathbf{x}} = (\hat{x}_i)_{1 \leq i \leq n}; \hat{x}_i \in \left\{ 0, \frac{1}{k}, \dots, \frac{k-1}{k}, 1 \right\}, 1 \leq i \leq n \right\}.$$

Pour $k = 0$, on pose

$$\hat{\Sigma}_0 = \left\{ \left(\frac{1}{2}, \dots, \frac{1}{2} \right) \in \mathbb{R}^n \right\}.$$

Théorème A.2. *Pour tout entier $k \geq 0$, le triplet $(\hat{K}, \mathcal{Q}_k, \hat{\Sigma}_k)$ est un élément fini de Lagrange. On l'appelle n -hypercube de type (k) .*

Définition A.5. *On appelle n -parallélotope de type (k) tout élément fini (K, P, Σ) affine-équivalent au n -hypercube unité de type (k) .*

A.3 L'élément fini \mathbb{Q}_1

Par soucis de simplicité, supposons à présent que $n = 2$. On s'intéresse à l'élément fini 2-parallélotope de type (1) suivant

- (i) K est un rectangle de côtés parallèles aux axe,
- (ii) $\Sigma = \{a_i\}_{1 \leq i \leq 4}$ est l'ensemble des sommets de K ,
- (iii) l'espace $P = \mathcal{Q}_1$.

Cet élément fini de Lagrange est alors appelé **élément fini \mathbb{Q}_1** .

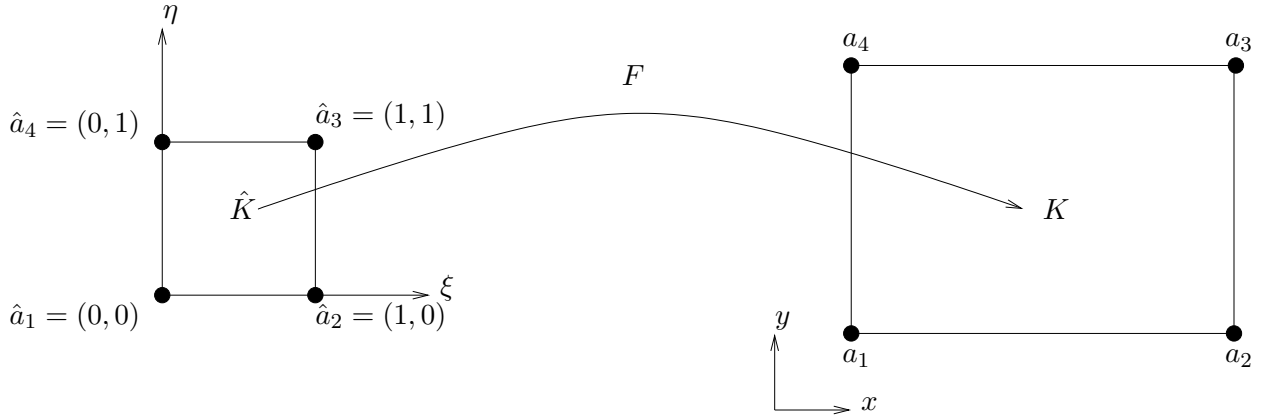


FIG. A.1 – Élément fini $\hat{\mathbb{Q}}_1$ de référence (à gauche) et élément fini \mathbb{Q}_1 affine-équivalent (à droite).

Explicitons à présent les fonctions de base de l'élément fini de référence $\hat{\mathbb{Q}}_1 = (\hat{K}, \mathcal{Q}_1, \hat{\Sigma}_1)$. Si on note (ξ, η) le système de coordonnées locales relatif à l'élément fini de référence $\hat{\mathbb{Q}}_1$, les fonctions de base $(\hat{q}_i)_{1 \leq i \leq 4}$ s'écrivent :

$$\hat{q}_1(\xi, \eta) = (1 - \xi)(1 - \eta). \quad (\text{A.9})$$

$$\hat{q}_2(\xi, \eta) = \xi(1 - \eta). \quad (\text{A.10})$$

$$\hat{q}_3(\xi, \eta) = \xi \eta. \quad (\text{A.11})$$

$$\hat{q}_4(\xi, \eta) = (1 - \xi) \eta. \quad (\text{A.12})$$

Soit (x, y) le système de coordonnées locales relatif à un élément fini \mathbb{Q}_1 et (x_i, y_i) les coordonnées des points a_i , $1 \leq i \leq 4$. La transformation affine

$$F : (\xi, \eta) \in \hat{K} = [0, 1] \times [0, 1] \rightarrow (x, y) \in K = [x_1, x_2] \times [y_1, y_4],$$

qui permet de passer de l'élément fini de référence $\hat{\mathbb{Q}}_1$ à un élément \mathbb{Q}_1 est donnée par :

$$(x, y) = F(\xi, \eta) = ((x_2 - x_1)\xi + x_1, (y_4 - y_1)\eta + y_1) \quad (\text{A.13})$$

Les fonctions de base $(q_i)_{1 \leq i \leq 4}$ d'un élément fini \mathbb{Q}_1 sont alors définies par :

$$q_i = \hat{q}_i \circ F^{-1}$$

D'où

$$q_1(x, y) = \left(1 - \frac{x - x_1}{x_2 - x_1}\right) \left(1 - \frac{y - y_1}{y_4 - y_1}\right) \quad (\text{A.14})$$

$$q_2(x, y) = \left(\frac{x - x_1}{x_2 - x_1}\right) \left(1 - \frac{y - y_1}{y_4 - y_1}\right) \quad (\text{A.15})$$

$$q_3(x, y) = \left(\frac{x - x_1}{x_2 - x_1}\right) \left(\frac{y - y_1}{y_4 - y_1}\right) \quad (\text{A.16})$$

$$q_4(x, y) = \left(1 - \frac{x - x_1}{x_2 - x_1}\right) \left(\frac{y - y_1}{y_4 - y_1}\right) \quad (\text{A.17})$$

Annexe B

Méthodes de descente basées sur les espaces de Krylov pour la résolution de systèmes linéaires

Sommaire

B.1	Méthodes de résolution de systèmes linéaires	179
B.2	Préconditionnement	179
B.2.1	Principe	179
B.2.2	Préconditionneur à droite et à gauche	180
B.2.3	Exemples de preconditionneurs	180
B.2.3.a	Préconditionneur diagonal	180
B.2.3.b	Factorisations LU incomplètes	180
B.3	Méthodes de projection sur des espaces de Krylov	181
B.3.1	Méthode du gradient conjugué (CG)	182
B.3.1.a	Principe	182
B.3.1.b	Algorithme du gradient conjugué preconditionné	183
B.3.2	Les méthodes de gradient pour des matrices non symétriques	183
B.3.2.a	Le double gradient conjugué (BiCG)	183
B.3.2.b	Le gradient conjugué square (CGS)	184
B.3.2.c	Le gradient conjugué stabilisé (Bi-CGSTAB)	185

B.1 Méthodes de résolution de systèmes linéaires

On s'intéresse à la résolution dans \mathbb{R}^n du système linéaire

$$Ax = b \quad (\text{B.1})$$

où A est une matrice dans $\mathbb{R}^{n \times n}$ et $b \in \mathbb{R}^n$. Ces systèmes linéaires résultent principalement de la discrétisation (et linéarisation) des équations aux dérivées partielles (E.D.P.). Il existe deux types de méthodes numériques pour résoudre le système linéaire (B.1) :

- Les méthodes directes : ces méthodes visent à ramener la résolution d'un système linéaire $Ax = b$ à celle d'un système qui possède une matrice plus "simple" (matrice diagonale ou triangulaire) ou une matrice aux propriétés intéressantes (matrice orthogonale telle que $A^\top = A^{-1}$, ou matrice facilement inversible). Parmi ces méthodes on trouve principalement les méthodes de Gauss, de Cholesky et de Householder.

Les solveurs directs présentent l'avantage d'être robustes mais ils sont très coûteux en terme de stockage et de temps CPU.

- Les méthodes itératives : ces méthodes consistent à décomposer la matrice A du système linéaire (B.1) en $A = M - N$ de telle façon que M soit inversible. Le système linéaire (B.1) devient alors

$$x = M^{-1}Nx + M^{-1}b,$$

qui définit une équation de point fixe. Les méthodes itératives calculent par récurrence la suite de vecteur $\{x_k\}$, à partir d'un vecteur x_0 choisi arbitrairement, à l'aide de la relation suivante :

$$x_{k+1} = M^{-1}Nx_k + M^{-1}b. \quad (\text{B.2})$$

Il faut alors trouver la décomposition de A telle que $x_k \rightarrow \bar{x}$ où \bar{x} est la solution du système linéaire (B.1). Une condition nécessaire et suffisante pour que les méthodes itératives convergent est que le rayon spectral (*i.e.* le maximum des valeurs absolues des valeurs propres) de la matrice $M^{-1}N$ soit strictement plus petit que 1.

Les principales méthodes itératives sont la méthode de Jacobi, la méthode de Gauss-Seidel ainsi que les méthodes de descente (ou de projection).

Les solveurs itératifs exigent moins de stockage et souvent moins d'opérations que les solveurs directs. Cependant dans certaines applications, les méthodes itératives ne convergent pas ou la convergence est lente. Dans ce cas un préconditionneur est nécessaire.

B.2 Préconditionnement

B.2.1 Principe

La convergence des méthodes itératives dépend des propriétés spectrales de la matrice du système linéaire. Un mauvais conditionnement¹ de la matrice peut même empêcher ces méthodes de converger. On utilise donc des techniques de préconditionnement afin de transformer le système linéaire en un autre système possédant la même solution mais des propriétés spectrales plus favorables. Le principe est de remplacer la résolution du système $Ax = b$ par celle du système

$$C^{-1}Ax = C^{-1}b.$$

La matrice C^{-1} est appelé **préconditionneur** et est choisie avec l'objectif que le conditionnement de la matrice $C^{-1}A$ soit meilleur que celui de la matrice A . En théorie le meilleur choix est donc

¹Le conditionnement d'une matrice A est défini par rapport à la norme matricielle induite par $\text{cond}_p(A) = \|A\|_p \|A^{-1}\|_p$

$C^{-1} = A^{-1}$. En pratique, on devra trouver C^{-1} le plus proche de A^{-1} sans que les calculs de C^{-1} ne soient trop coûteux et de sorte que le système préconditionné soit facile à résoudre.

B.2.2 Préconditionneur à droite et à gauche

En pratique, il n'est pas nécessaire de former la matrice $C^{-1}A$ explicitement, ceci peut être trop coûteux, et il est possible de perdre la structure creuse de la matrice A . Une autre manière de préconditionner la matrice A est de diviser le preconditionneur C en $C = C_1C_2$. Le système à étudier est alors le suivant :

$$C_1^{-1}AC_2^{-1}y = C_1^{-1}b, \quad \text{où } x = C_2^{-1}y.$$

Les matrices C_1 et C_2 sont appelées respectivement preconditionneur à gauche et preconditionneur à droite. La séparation ("splitting") de C peut être évitée dans la résolution du système linéaire. En étudiant les étapes de chaque méthode, il est souvent possible d'introduire une étape supplémentaire dans l'algorithme permettant d'appliquer le preconditionneur dans sa totalité

$$\text{résoudre } u \text{ tel que } Cu = v.$$

Le choix du preconditionneur dépend de la méthode itérative et des caractéristiques du problème. Un preconditionnement bien adapté au problème et à la méthode de résolution peut considérablement améliorer la vitesse de convergence de l'algorithme.

B.2.3 Exemples de preconditionneurs

Il existe de nombreuses manières pour choisir C . Nous présentons ici succinctement que les deux preconditionneurs utilisés pour résoudre nos systèmes linéaires.

B.2.3.a Préconditionneur diagonal

Le plus simple preconditionneur est le preconditionneur diagonal. Il est rapide à calculer et très bien adapté pour des matrices symétriques définies positives. Dans ce cas, on a

$$C = \text{diag}(A).$$

Dans la plupart des autres cas, ce preconditionnement n'améliore pas de façon substantielle le taux de convergence.

B.2.3.b Factorisations LU incomplètes

Une autre idée de preconditionnement est d'utiliser la factorisation LU de la matrice A . En effet, la résolution de systèmes triangulaires coûte peu. Malheureusement, cette factorisation mène généralement à un remplissage important même pour de grandes matrices creuses A . Pour éviter cela, de nombreuses méthodes de preconditionnement sont basées sur une factorisation LU incomplète de A .

Principe

On appelle factorisation incomplète une factorisation au cours de laquelle on ne calcule pas tous les éléments de L et de U . On peut décomposer A en

$$A = LU + E.$$

où L est une matrice triangulaire inférieure, U est une matrice triangulaire supérieure et E une matrice de déviation souvent peu dense qui possède des zéros aux endroits où l'on veut que la factorisation soit exacte.

En général, les éléments non nuls de L et U ignorés sont situés aux endroits où la matrice originale A possédaient des éléments nuls. Pour réaliser cette factorisation incomplète, on utilise un algorithme dérivé de l'algorithme de Gauss pour la factorisation LU .

Le préconditionneur est alors donné sous la forme $C = LU$. L'efficacité du preconditionneur dépend de la manière dont C^{-1} approche A^{-1} .

Méthode ILLU (“incomplete line LU factorisation”) [Mei83, Son89]

Ce préconditionnement peut être appliqué à des matrices tridiagonales par blocs. Ceci est souvent le cas si A provient de la discrétisation d'équations aux dérivées partielles elliptiques du second ordre. Soit

$$A = L + D + U,$$

où L est la partie triangulaire strictement inférieure issue de la matrice A , U est la partie triangulaire strictement supérieure et $D = \text{diag}(A)$. On a alors

$$A = (L + D)D^{-1}(U + D) + E,$$

où la matrice E est une matrice diagonale par blocs.

Le préconditionneur peut être choisi comme

$$C = (L + D)D^{-1}(U + D).$$

En pratique, on n'inverse ni $(L + D)$ ni $(U + D)$ mais on résout des systèmes triangulaires :

$$y = Cx \Leftrightarrow \begin{cases} (D + L)z = y, \\ (I + D^{-1}U)x = z. \end{cases} \quad \text{ou} \quad \begin{cases} (I + LD^{-1})z = y, \\ (D + U)x = z. \end{cases}$$

Seul le calcul de D^{-1} est effectué.

La factorisation ILLU présente l'avantage d'être bien adaptée aux problèmes de type convection-diffusion (cf. [Son89]).

REMARQUE. De nombreux autres preconditionneurs peuvent être considérés, notamment des preconditionneurs multi-niveaux (ou multi-échelles). L'idée principale de cette technique consiste à faire un changement de base de façon à exprimer la solution en fonction de bases hiérarchiques (voir [Hac85, BPX90] pour une introduction à cette thématique très intéressante).

B.3 Méthodes de projection sur des espaces de Krylov

Nous avons choisi de résoudre nos systèmes linéaires à l'aide de méthodes de projection sur des espaces de Krylov. Ces méthodes itératives consistent à trouver une direction de descente p_k , $p_k \in \mathbb{R}^n$ et un scalaire α_k tels que

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k,$$

où p_k est un vecteur de l'espace de Krylov $\mathcal{K}_k(A, r_0)$ engendré par A et $r_0 = b - Ax_0$ le vecteur résidu initial :

$$\mathcal{K}_k(A, r_0) = \langle r_0, Ar_0, \dots, A^{k-1}r_0 \rangle. \quad (\text{B.3})$$

Pour les méthodes de Krylov, on a la condition suivante

$$x_k \in x_0 + \mathcal{K}_k(A, r_0).$$

Il faut alors déterminer le couple (α_{k-1}, p_{k-1}) de façon à ce que x_k minimise la différence $e_k = x_k - x_{k-1}$ ou le résidu $r_k = b - Ax_k$.

B.3.1 Méthode du gradient conjugué (CG)

B.3.1.a Principe

La méthode du gradient conjugué [HS52] permet de résoudre de grands systèmes linéaires dont la matrice est **symétrique définie positive** ($A^\top = A$ et $x^\top Ax > 0$, pour tout vecteur $x \in \mathbb{R}^n$ non nul). Considérons la forme quadratique J sur \mathbb{R}^n définie par

$$J(x) = \frac{1}{2}x^\top Ax - b^\top x$$

Si \bar{x} est la solution exacte de (B.1) alors,

$$\nabla J(\bar{x}) = \mathbf{0}$$

Le principe du gradient conjugué consiste donc à minimiser la fonctionnelle J . A chaque itération, les directions successives de descente p_k ($p_k \neq 0$) et le paramètre α_k sont choisis de sorte que $J(x_{k+1}) < J(x_k)$ (voir algorithme B.1).

Chaque itéré x_k minimise la norme Euclidienne du résidu r_k sur l'espace $x_0 + \mathcal{K}_k(A, r_0)$. Une propriété intéressante de cet algorithme est que cette minimisation ne nécessite pas le stockage complet d'une base de l'espace de Krylov \mathcal{K}_k . En effet, l'algorithme B.1 montre que l'évaluation de x_k ne nécessite la connaissance que de 3 vecteurs : x_{k-1}, r_{k-1} et p_{k-1} .

Algorithme B.1 Algorithme du gradient conjugué (CG)

Initialisations $\begin{cases} x_0 \\ p_0 = r_0 = b - Ax_0 \end{cases}$
pour $k = 0, 1, \dots$ **faire**
 $\alpha_k = \frac{r_k^\top r_k}{p_k^\top A p_k}$
 $x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k$
 $r_{k+1} = r_k - \alpha_k A p_k$
 $\beta_{k+1} = \frac{r_{k+1}^\top r_{k+1}}{r_k^\top r_k}$
 $p_{k+1} = r_{k+1} + \beta_{k+1} p_k$
fin pour

Théorème B.1 (Théorème de Stiefel). *L'algorithme du gradient conjugué converge en au plus n itérations (où n est la dimension de l'espace \mathbb{R}^n).*

B.3.1.b Algorithme du gradient conjugué préconditionné

On ne peut pas appliquer directement l'algorithme du gradient conjugué à $C^{-1}A$ (cf. principe du préconditionnement section B.2) car il faut que $C^{-1}A$ soit symétrique, ce qui est faux en général même si C^{-1} est symétrique.

Si C^{-1} est symétrique définie positive, on peut définir $C^{-\frac{1}{2}}$ symétrique définie positive telle que $(C^{-\frac{1}{2}})^2 = C^{-1}$. Alors $C^{\frac{1}{2}}(C^{-1}A)C^{-\frac{1}{2}}$ est symétrique définie positive. De plus $C^{-1}A$ est semblable à $C^{\frac{1}{2}}(C^{-1}A)C^{-\frac{1}{2}}$. Donc au lieu d'étudier le système $C^{-1}Ax = C^{-1}b$, on considère le système équivalent

$$C^{\frac{1}{2}}(C^{-1}A)C^{-\frac{1}{2}}(C^{\frac{1}{2}}x) = C^{-\frac{1}{2}}b.$$

On pose $y = C^{\frac{1}{2}}x$, on doit alors trouver y tel que

$$C^{\frac{1}{2}}(C^{-1}A)C^{-\frac{1}{2}}y = C^{-\frac{1}{2}}b.$$

La méthode du gradient conjugué est appliquée à ce nouveau système de matrice $\tilde{A} = C^{\frac{1}{2}}(C^{-1}A)C^{-\frac{1}{2}}$. L'algorithme du gradient conjugué préconditionné (algorithme B.2) est alors obtenu en tenant compte des relations précédentes.

Algorithme B.2 Algorithme du gradient conjugué préconditionné

$$\text{Initialisations} \begin{cases} x_0 \\ r_0 = b - Ax_0 \\ \mathbf{C}p_0 = \mathbf{r}_0 \\ z_0 = p_0 \end{cases}$$

pour $k = 0, 1, \dots$ **faire**

$$\alpha_k = \frac{r_k^\top z_k}{p_k^\top Ap_k}$$

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k$$

$$r_{k+1} = r_k - \alpha_k Ap_k$$

$$\mathbf{C}z_{k+1} = \mathbf{r}_{k+1}$$

$$\beta_{k+1} = \frac{r_{k+1}^\top z_{k+1}}{r_k^\top z_k}$$

$$p_{k+1} = z_{k+1} + \beta_{k+1} p_k$$

fin pour

A chaque itération, il faut résoudre $Cz = r$. Il est donc nécessaire que cette résolution soit facile.

B.3.2 Les méthodes de gradient pour des matrices non symétriques

Il existe des généralisations des méthodes de descente de type gradient au cas de matrices non symétriques définies positives. Lorsque le système linéaire n'est plus symétrique, la minimisation de la norme du résidu sur $x_0 + \mathcal{K}_k(A, r_0)$ nécessite le stockage complet d'une base de l'espace de Krylov \mathcal{K}_k . L'algorithme GMRes ("Generalizes Minimal Residual") [SS86] garantit la propriété d'optimalité (minimisation de la norme euclidienne du résidu) grâce à la construction et à la conservation à chaque étape d'une base de \mathcal{K}_k . D'autres méthodes renoncent à la propriété d'optimalité mais utilisent des récursions simples pour calculer les itérés successifs. On va en présenter trois d'entre elles ici.

B.3.2.a Le double gradient conjugué (BiCG)

Le double gradient conjugué [Fle76] est une méthode dérivée de celle du gradient conjugué qui permet de traiter des systèmes linéaires dont la matrice A est **non symétrique**.

La méthode BiCG revient à résoudre à partir d'un système linéaire initial de la forme $Ax = b$ un système linéaire symétrique de rang $2n$ de la forme :

$$\begin{pmatrix} O & A^\top \\ A & 0 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} x \\ \tilde{x} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tilde{b} \\ b \end{pmatrix} \quad (\text{B.4})$$

où \tilde{b} est choisi arbitrairement.

Deux résidus sont donc générés, un résidu r à partir de l'équation $Ax = b$ et un autre noté \tilde{r} à partir de l'équation $A^\top \tilde{x} = \tilde{b}$. La relation d'itération sur r est la même que dans la méthode du gradient conjugué, et la relation d'itération sur \tilde{r} est une relation similaire sur A^\top au lieu de A . Deux suites de directions de descente leur sont associées (voir algorithme B.3). Cependant aucun critère de minimisation n'est introduit au cours des itérations contrairement au gradient conjugué.

Algorithme B.3 Algorithme du double gradient conjugué (BiCG)

$$\text{Initialisations} \begin{cases} x_0, \tilde{x}_0 \\ r_0 = b - Ax_0, \tilde{r}_0 = \tilde{b} - A^\top \tilde{x}_0 \\ p_0 = r_0, \tilde{p}_0 = \tilde{r}_0 \end{cases}$$

pour $k = 0, 1, \dots$ **faire**

$$\alpha_k = \frac{r_k^\top \tilde{r}_k}{p_k^\top A \tilde{p}_k}$$

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k$$

$$\tilde{x}_{k+1} = \tilde{x}_k + \alpha_k \tilde{p}_k$$

$$r_{k+1} = r_k - \alpha_k A p_k$$

$$\tilde{r}_{k+1} = \tilde{r}_k - \alpha_k A^\top \tilde{p}_k$$

$$\beta_{k+1} = \frac{r_{k+1}^\top \tilde{r}_{k+1}}{r_k^\top \tilde{r}_k}$$

$$p_{k+1} = r_{k+1} + \beta_{k+1} p_k$$

$$\tilde{p}_{k+1} = \tilde{r}_{k+1} + \beta_{k+1} \tilde{p}_k$$

fin pour

Cette méthode possède néanmoins des inconvénients. Le coût de calcul pour une itération est exactement le double du gradient conjugué et la rapidité de convergence est faible. De plus, la méthode ne converge pas toujours si le système est mal conditionné. La méthode explose si $r_k^\top \tilde{r}_k \simeq 0$ sans que $r_k \simeq 0$. Enfin dans certains cas, le produit $A^\top \tilde{p}_k$ n'est pas calculable, par exemple si la matrice A n'est pas donnée de manière explicite et que le produit matrice-vecteur est donné sous forme d'opérations. Nous allons détailler deux variantes (gradient conjugué square ou CGS, et double gradient conjugué stabilisé ou Bi-CGSTAB) qui améliorent l'efficacité du double gradient conjugué.

B.3.2.b Le gradient conjugué square (CGS)

La méthode du gradient conjugué square (Conjugate Gradient Squared Method [Son89]) est une modification du double gradient conjugué BiCG présentant l'avantage de ne pas avoir à évaluer le produit matrice-vecteur faisant intervenir la matrice A^\top . Elle est basée sur une représentation polynomiale du résidu r_k . Le principe général est le suivant : dans l'algorithme du BiCG (voir algorithme B.3), on peut exprimer r_k comme le produit de r_0 et d'un polynôme de degré k en A :

$$r_k = P_k(A)r_0$$

Le même polynôme satisfait $\tilde{r}_k = P_k(A^\top)\tilde{r}_0$. On obtient donc

$$\tilde{r}_k^\top r_k = (P_k(A^\top)\tilde{r}_0)^\top P_k(A)r_0 = \tilde{r}_0^\top P_k^2(A)r_0$$

Les pseudo-codes de la méthode CGS et CGS préconditionné sont donnés par les algorithmes B.4.

Algorithme B.4 Algorithmes du gradient conjugué square (CGS) (à gauche) et du gradient conjugué square (CGS) préconditionné (à droite)

<p>Initialisations $\left\{ \begin{array}{l} x_0 \\ r_0 = b - Ax_0, \tilde{r} = r_0, \\ u_0 = p_0 = r_0 \end{array} \right.$</p> <p>pour $k = 0, 1, \dots$ faire</p> <p style="padding-left: 20px;">$\alpha_k = \frac{\tilde{r}^\top r_k}{\tilde{r}^\top A p_k}$</p> <p style="padding-left: 20px;">$q_k = u_k - \alpha_k A p_k$</p> <p style="padding-left: 20px;">$r_{k+1} = r_k - \alpha_k A (u_k + q_k)$</p> <p style="padding-left: 20px;">$x_{k+1} = x_k + \alpha_k (u_k + q_k)$</p> <p style="padding-left: 20px;">$\beta_{k+1} = \frac{\tilde{r}^\top r_{k+1}}{\tilde{r}^\top r_k}$</p> <p style="padding-left: 20px;">$u_{k+1} = r_{k+1} + \beta_{k+1} q_k$</p> <p style="padding-left: 20px;">$p_{k+1} = u_{k+1} + \beta_{k+1} (q_k + \beta_{k+1} p_k)$</p> <p>fin pour</p>	<p>Initialisations $\left\{ \begin{array}{l} x_0 \\ r_0 = b - Ax_0, \tilde{r} = r_0, \\ u_0 = p_0 = r_0 \end{array} \right.$</p> <p>pour $k = 0, 1, \dots$ faire</p> <p style="padding-left: 20px;">Cy_k = p_k</p> <p style="padding-left: 20px;">$\alpha_k = \frac{\tilde{r}^\top r_k}{\tilde{r}^\top A y_k}$</p> <p style="padding-left: 20px;">$q_k = u_k - \alpha_k A y_k$</p> <p style="padding-left: 20px;">Cz_k = u_k + q_k</p> <p style="padding-left: 20px;">$r_{k+1} = r_k - \alpha_k A z_k$</p> <p style="padding-left: 20px;">$x_{k+1} = x_k + \alpha_k z_k$</p> <p style="padding-left: 20px;">$\beta_{k+1} = \frac{\tilde{r}^\top r_{k+1}}{\tilde{r}^\top r_k}$</p> <p style="padding-left: 20px;">$u_{k+1} = r_{k+1} + \beta_{k+1} q_k$</p> <p style="padding-left: 20px;">$p_{k+1} = u_{k+1} + \beta_{k+1} (q_k + \beta_{k+1} p_k)$</p> <p>fin pour</p>
--	--

La convergence de la méthode du CGS est deux fois plus rapide que celle du BiCG. De plus aucun calcul ne fait intervenir la matrice A^\top . Cependant, l'absence de la propriété de minimisation conduit à une convergence erratique de la norme Euclidienne du résidu, ce qui peut entraîner l'obtention d'une solution incorrecte.

B.3.2.c Le gradient conjugué stabilisé (Bi-CGSTAB)

La méthode du gradient conjugué stabilisé (BiConjugate Gradient Stabilized) développée par Van Der Vorst [Van92] est une autre variante du BiCG qui permet de stabiliser la convergence de la méthode CGS.

Le principe de cette méthode est basé sur la même approche polynômiale que CGS. Cependant au lieu d'implémenter la suite des $P_k(A)r_0$, la méthode Bi-CGSTAB considère la suite $Q_k(A)P_k(A)r_0$ où Q_k est un polynôme de degré k tenant compte de la direction de plus grande descente. Les pseudo-codes de la méthode Bi-CGSTAB et Bi-CGSTAB préconditionné sont donnés par les algorithmes B.5.

La méthode Bi-CGSTAB nécessite deux produits scalaires supplémentaires par rapport aux méthodes CGS et BiCG. Cependant, la solution du système linéaire est obtenue en moins d'itérations. La méthode Bi-CGSTAB converge donc à peu près à la même vitesse que celle du CGS. Comme pour tous les algorithmes précédents, le taux de convergence de Bi-CGSTAB dépend du conditionnement de la matrice du système linéaire. Le principal inconvénient de cette méthode est qu'aucune garantie théorique n'assure que l'algorithme ne va pas échouer avant l'obtention de la solution. Cependant, l'algorithme Bi-CGSTAB donne des résultats très satisfaisants dans le cas de systèmes linéaires importants découlant d'applications industrielles.

Algorithme B.5 Algorithmes du gradient conjugué stabilisé (Bi-CGSTAB) (à gauche) et du gradient conjugué stabilisé (Bi-CGSTAB) préconditionné (à droite)

Initialisations $\begin{cases} x_0 \\ r_0 = b - Ax_0, \tilde{r} = r_0, \\ p_0 = r_0 \end{cases}$

pour $k = 0, 1, \dots$ **faire**

$$\alpha_k = \frac{\tilde{r}^\top r_k}{\tilde{r}^\top Ap_k}$$

$$s_k = r_k - \alpha_k Ap_k$$

$$t_k = As_k$$

$$\omega_k = \frac{t_k^\top s_k}{t_k^\top t_k}$$

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k + \omega_k s_k$$

$$r_{k+1} = s_k - \omega_k t_k$$

$$\beta_{k+1} = \frac{\tilde{r}^\top r_{k+1}}{\tilde{r}^\top r_k} \cdot \frac{\alpha_k}{\omega_k}$$

$$p_{k+1} = r_{k+1} + \beta_{k+1}(p_k - \omega_k Ap_k)$$

fin pour

Initialisations $\begin{cases} x_0 \\ r_0 = b - Ax_0, \tilde{r} = r_0, \\ p_0 = r_0 \end{cases}$

pour $k = 0, 1, \dots$ **faire**

$$\mathbf{C}y_k = \mathbf{p}_k$$

$$\alpha_k = \frac{\tilde{r}^\top r_k}{\tilde{r}^\top Ay_k}$$

$$s_k = r_k - \alpha_k Ay_k$$

$$\mathbf{C}z_k = s_k$$

$$t_k = Az_k$$

$$\omega_k = \frac{t_k^\top s_k}{t_k^\top t_k}$$

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k y_k + \omega_k z_k$$

$$r_{k+1} = s_k - \omega_k t_k$$

$$\beta_{k+1} = \frac{\tilde{r}^\top r_{k+1}}{\tilde{r}^\top r_k} \cdot \frac{\alpha_k}{\omega_k}$$

$$p_{k+1} = r_{k+1} + \beta_{k+1}(p_k - \omega_k Ay_k)$$

fin pour

Bibliographie

- [ABF99] Ph. Angot, Ch.-H. Bruneau, and P. Fabrie. A penalization method to take into account obstacles in incompressible viscous flows. *Numerische Mathematik*, 81(4) :497-520, 1999.
- [ACK92] Ph. Angot, J.P. Caltagirone, and K. Khadra. Une méthode adaptative de raffinement local : la Correction du Flux à l'Interface. *C.R. Acad. Sci. Paris*, 315 (1), pp. 739-745, 1992.
- [ACK93] Ph. Angot, J.-P. Caltagirone, and K. Khadra. A comparison of locally adaptive multigrid methods : L.D.C., F.A.C. and F.I.C. *NASA Conf. Publ. CP-3224, volume 1*, pp.275-292, 1993.
- [Ago95] A. Agouzal. Fictitious domain method for Neumann problems. *Mat. Model.* 7(7), 94-98, 1995.
- [AL94] Ph. Angot and M. Laugier. La méthode FIC de raccordement conservatif de sous-domaines emboîtés pour un modèle de circulation océanique. *C.R. Acad. Sci. Paris*, 319 (2), pp. 993-1000, 1994.
- [ALR05] Ph. Angot, H. Lomenède, and I. Ramière. A general fictitious domain method with non-conforming structured meshes. *Finite Volume for Complex Applications IV, Problems and Perspectives, Marrakech, Ed. F. Benkhaldoun, D. Ouazar, S. Raghay - Hermes Science*, pp. 261-272, 2005.
- [Ang89] Ph. Angot. Contribution à l'étude des transferts thermiques dans des systèmes complexes ; Application aux composants électroniques. Thèse de doctorat (Mécanique), Université de Bordeaux I, 1989.
- [Ang99a] Ph. Angot. Analysis of singular perturbations on the Brinkman problem for fictitious domain models of viscous flows. *M²AS Math. Meth. in the Appl. Sci.*, Vol. 22(16), pp. 1395-1412, 1999.
- [Ang99b] Ph. Angot. Finite volume methods for non smooth solution of diffusion models ; Application to imperfect contact problems. *Recent Advances in Numerical Methods and Applications-Proceedings 4th Int. Conf. NMA'98, Sofia (Bulgaria) 19-23 August 1998*, pp.621-629, World Scientific Publishing, 1999.
- [Ang03] Ph. Angot. A model of fracture for elliptic problems with flux and solution jumps. *C.R. Acad. Sci. Paris, Ser I Math.*, 337 (6) 425-430, 2003.
- [Ang05] Ph. Angot. A unified fictitious domain model for general embedded boundary conditions. *C.R. Acad. Sci. Paris, Ser. Math.*, Vol. 341(11), pp 683-688, 2005.
- [Ang06] Ph. Angot. A fictitious domain model for the Stokes/Brinkman problem. *C.R. Acad. Sci. Paris, Ser. Math.*, accepted, 2006.
- [AR06] Ph. Angot and I. Ramière. Convergence analysis of the Q_1 -finite element method for elliptic problems with non-boundary fitted meshes. *IMA J. of Numer. Analysis*, submitted, 2006.

- [Aub67] J.P. Aubin. Approximation des espaces de distributions et des opérateurs différentiels. *Bull. Soc. Math. France Suppl. Mém.*, 12, 1967.
- [Bab73] I. Babuška. The finite element method with lagrange multipliers. *Numer. Math.*, Vol 20, pp. 179-192, 1973.
- [BBB⁺05] D. Bestion, M. Boucker, P. Boudier, Ph. Fillion, M. Grandotto, A. Guelfi, J.M. Hé-rard, E. Hervieu, and P. Péturaud. A new multi-scale platform for advanced nu-clear Thermal-hydraulics. *Proc. in the 11th International Topical Meeting on Nuclear Thermal-Hydraulics (NURETH-11), Avignon (France) 2-6 October, Paper 31*, 2005.
- [BDGG71] B.L. Buzbee, F.W. Dorr, J.A. George, and G.H. Golub. The direct solution of the discrete poisson equation on irregular grids. *SIAM J. on Numer. Analysis*, Vol. 8, pp. 722-736, 1971.
- [BF06] F. Boyer and P. Fabrie. *Eléments d'analyse pour l'étude de quelques modèles d'écou-lements de fluides visqueux incompressibles*. Mathématiques et Applications, Vol. 52, 2006.
- [BGH⁺01] C. Bernardi, V. Girault, F. Hecht, H. Kawarada, and O. Pironneau. A finite element problem issued from fictitious domain techniques. *East-West J. Numer. Math.* 9, No 4, 253-263, 2001.
- [BH82] A.N. Brooks and T.J.R. Hughes. Streamline upwind/Petrov-Galerkin formulations for convection dominated flows with particular emphasis on the incompressible Navier-Stokes equations. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 32, pp.199-259, 1982.
- [BIM04] S. Bertoluzza, M. Ismail, and B. Maury. The FBM method : Semi-discrete scheme and some numerical experiments. *Lecture Notes in Comp. Sc. and Eng.*, 2004.
- [BL92] R.P. Beyer and R.J. LeVeque. Analysis of a one-dimensional model for the immersed boundary method. *SIAM J. Numer. Anal.*, Vol. 29, pp. 332-364, 1992.
- [BPX90] J.H. Bramble, J.E. Pasciak, and J. Xu. Parallel multilevel preconditionners. *Math. Comp.*, 55 :191, pp. 1-22, 1990.
- [Bre00] H. Brezis. *Analyse fonctionnelle, Théorie et applications*. Dunod, 2000.
- [CAL03] X. Coré, Ph. Angot, and J.-C. Latché. A multilevel local mesh refinement projection method for low mach number flows. *Mathematics and Computers in Simulation - IMACS Int. J.*, Vol. 61, n° 3-6, pp. 477-488, 2003.
- [CB88] J.L. Campan and J.C. Bouchter. Steam generator experiment for advanced computer code qualification : CLOTAIRE international program. In *Third International Topical Meeting on Nuclear Power Plant Thermohydraulics and Operations*, Seoul, April 1988.
- [Cia78] P.G. Ciarlet. *The Finite Element Method for elliptic problems*. Studies in Mathematics and its Applications. North-Holland, first edition, 1978.
- [CJM97] F. Collino, P. Joly, and F. Millot. Fictitious domain method for unsteady problems. *J. of Comp. Physics*, Volume 138, Issue 2, pp. 907-938, 1997.
- [CM00] R. Cortez and M. Minion. The blob projection method for immersed boundary pro-blems. *J. Comput. Phys.*, 161 :428-463, 2000.
- [DDG⁺92] E.J. Dean, Q.V. Dinh, R. Glowinski, J. He, T.W. Pan, and J. Périaux. Least squares/domain imbedding methods for Neumann problems : application to fluid dyna-mics. *Domain Decomposition Methods for Partial Differential Equations*, D. E. Keyes, T. F. Chan, G. Meurant, J. S. Scroggs, R. G. Voigt eds., SIAM, Philadelphia, pp. 451-475, 1992.

- [DK03] M.A. Dumett and J.P. Keener. An immersed interface method for solving anisotropic elliptic boundary value problems in three dimensions. *SIAM J. Sci. Comput.*, 25(1), pp.348-367, 2003.
- [DL88] R. Dautray and J.L. Lions. *Analyse mathématique et calcul numérique pour les sciences et les techniques, vol. 1-9*. Masson, 1988.
- [EGH00] R. Eymard, Th. Gallouët, and R. Herbin. *Finite Volume methods*. P.G. Ciarlet, J.-L. Lions (Eds), Handbook of Numerical Analysis, vol. VII, North-Holland, pp.713-1020, 2000.
- [FK00] A.L. Fogelson and J.P. Keener. Immersed interface methods for Neumann and related problems in two and three dimensions. *SIAM J. Sci. Comput.*, Vol 22, pp. 1630-1684, 2000.
- [Fle76] R. Fletcher. Conjugate Gradient Methods for indefinite Systems. *Lecture notes in Mathematics 506*, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, pp. 73-89, 1976.
- [GBG⁺89] M. Grandotto, M. Bernard, J.P. Gaillard, J.L. Cheissoux, and E. De Langre. A 3D finite element analysis for solving two phase flow problems in PWR steam generators. In *7th International Conference on Finite Element Methods in Flow Problems, Huntsville, Alabama, USA*, April 1989.
- [GCLU84] P.M. Gresho, S.T. Chan, R. L. Lee, and C.D Upson. A modified Finite Element Method for Solving the Time-Dependent Incompressible Navier Stokes Equations (Part 1 : Theory). *Int. J. Num. Methods in Fluids*, 4 :557-598, 1984.
- [GG95] V. Girault and R. Glowinski. Error analysis of a fictitious domain method applied to a Dirichlet problem. *Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics*, vol. 12(3), 487-514, 1995.
- [GK98] R. Glowinski and Y. Kuznetsov. On the solution of the Dirichlet problem for linear elliptic operators by a distributed Lagrange multiplier method. *C.R. Acad. Sci. Paris, t.327, Serie I*, pp. 693-698, 1998.
- [GO96] M. Grandotto and P. Obry. Calculs des écoulements diphasiques dans les échangeurs par une méthode aux éléments finis. *Revue européenne des éléments finis. Volume 5, n°1/1996, pages 53 à 74*, 1996.
- [GPHJ99] R. Glowinski, T.-W. Pan, T.I. Hesla, and D.D. Joseph. A distributed lagrange multiplier/fictitious domain method for particulate flows. *Int. J. of Multiphase Flow* 25, pp. 755-794, 1999.
- [GPP94] R. Glowinski, T.-W. Pan, and J. Périaux. A fictitious domain method for Dirichlet problem and applications. *Comp. Meth. in Appl. Mech. and Eng.*, 111 (3-4) : 283-303, 1994.
- [GPP95] R. Glowinski, T.-W. Pan, and J. Périaux. A Lagrange multiplier/fictitious domain method for the Dirichlet problem - generalization to some flow problems. *Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics*, vol. 12, pp. 87-108, 1995.
- [GPWZ96] R. Glowinski, T.-W. Pan, Jr.R. Wells, and X. Zhou. Wavelet and finite element solutions for the Neumann problem using fictitious domains. *Journal Comput. Phys.*, Vol. 126(1),pp.40-51, 1996.
- [Gri85] P. Grisvard. *Elliptic problems in nonsmooth domains*. Pitman, 1985.
- [Hac84] W. Hackbusch. Local Defect Correction Method and Domain Decomposition Techniques. *Vol. 5 of Computing Suppl.*, pp 89-113, Springer-Verlag (Wien), 1984.

- [Hac85] W. Hackbusch. Multigrid Methods and applications. *Series in computer mathematics, Springer-Verlag*, 1985.
- [HHvR03] P.W. Hemker, W. Hoffmann, and M.H. van Raalte. Discontinuous Galerkin discretization with embedded boundary conditions. *Comput. Meth. Appl. Math., Vol. 3(1)*, pp. 135-158, 2003.
- [HL99] H. Huang and Z. Li. Convergence analysis of the immersed interface method. *IMA J. Numer. Anal., 19*, 583-608, 1999.
- [HN81] C.W. Hirt and B.D. Nichols. Volume of Fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries. *J. of Computational Physics, volume 39*, pp.201-225, 1981.
- [HS52] M.R. Hestenes and E.L. Stiefel. Methods of conjugate gradients for solving linear systems. *J. Res. Nat. Bur. Standards Sect. 5, vol. 49*, pp. 409-436, 1952.
- [Hug78] T.J.R. Hughes. A simple finite element scheme for developping upwind finite elements. *Int. J. Num. Meth. Eng., 12*, pp.1359-1365, 1978.
- [Ism04] M. Ismail. *The Fat Boundary Method for the Numerical resolution of Elliptic Problems in Perforated Domains. Application to 3D Fluid Flows*. PhD thesis, University Pierre and Marie Curie - Paris VI, France, 2004.
- [JC98] H. Johansen and Ph. Colella. A Cartesian grid embedded boundary method for Poisson's Equation on irregular domains. *J. Comput. Phys., 147* :60-85, 1998.
- [JR99] P. Joly and L. Rhaouti. Fictitious domains, H(div) finite elements and Neumann condition : the inf-sup condition. *C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. I Math., Vol. 328(12)*, pp. 1225-1230, 1999.
- [KACM96] K. Khadra, Ph. Angot, J.-P. Caltagirone, and P. Morel. Concept de zoom adaptatif en architecture multigrille locale ; étude comparative des méthodes L.D.C., F.A.C. et F.I.C. *Mathematical Modelling and Numerical Analysis, 30(1)* :39-82, 1996.
- [KAPC00] K. Khadra, Ph. Angot, S. Parneix, and J.-P. Caltagirone. Fictitious domain approach for numerical modelling of Navier-Stokes equations. *Int. J. Numer. Meth. in Fluids, Vol. 34(8)* : 651-684, 2000.
- [Kop68] V.D. Kopčenov. Approximate solutions of the Dirichlet problem by the method of fictive domains. *Differential Equations, vol 4, 1 (in Russian)*, 1968.
- [Kop74] V.D. Kopčenov. A method of fictitious domains for the second and third value problems. *Trudy Mat. Inst. Steklov, Vol 131*, pp.119-127 (in Russian), 1974.
- [Lat04] J.-C. Latché. A fictitious degrees of freedom finite element method for free surface flows. *Mathematical Modelling and Numerical Analysis (submitted)*, 2004.
- [Li98a] Z. Li. A fast iterative algorithm for elliptic interface problems. *SIAM J. Numer. Anal., 35* :230-254, 1998.
- [Li98b] Z. Li. The immersed interface method using a finite element formulation. *Applied Numer. Math., vol. 27*, pp. 253-267, 1998.
- [LI01] Z. Li and K. Ito. Maximum principle preserving schemes for interface problems with discontinuous coefficients. *SIAM J. Sci. Comput., Vol 23*, pp. 339-361, 2001.
- [Li03] Z. Li. An overview of the immersed interface method and its applications. *Taiwan, J. Math., 7* :1-49, 2003.
- [Lio62] J.L. Lions. Problèmes aux Limites dans les Equations aux Dérivées Partielles. *Presses de l'Université de Montréal, Montréal*, 1962.

- [LL94] R.J. Leveque and Z. Li. The immersed interface method for elliptic equations with discontinuous coefficients and singular sources. *SIAM J. Numer. Anal.*, 31 :1019-1044, 1994.
- [LZ82] G. S. Lellouche and B. A. Zolotar. *Mechanistic Model For Predicting Two-Phase Void Fraction For Water in Vertical Tubes, Channels, and Rod Bundles*. EPRI Report NP 2246-SR Special Report, 1982.
- [Mar82] G.I. Marchuk. *Methods of Numerical Mathematics*. Application of Math. 2, Springer-Verlag New York (1rst ed. 1975), 1982.
- [Mau01] B. Maury. A Fat Boundary Method for the Poisson problem in a domain with holes. *SIAM, J. of Sci. Comput.*, 16(3) :319-339, 2001.
- [May84] A. Mayo. The fast solution of Poisson's and the biharmonic equations on irregular regions. *SIAM J. Numer. Anal.*, 21(2), pp.285-299, 1984.
- [MCGV04] P. McCorquodale, Ph. Colella, D.P. Grote, and J.-L. Vay. A node-centered local refinement algorithm for Poisson's equation in complex geometries. *J. Comput. Phys.*, 201 :34-60, 2004.
- [MCJ01] P. McCorquodale, P. Colella, and H. Johansen. A Cartesian grid embedded boundary method for the heat equation on irregular domains. *J. Comput. Phys.*, 173 :620-635, 2001.
- [Mei83] J.A. Meijerink. Iterative methods for the solution of linear equations based on incomplete block factorisation of the matrix. *paper SPE 12262, Proc. 7th SPE Symposium on Reservoir Simulation, San Francisco, CA, pp. 297-304*, November 1983.
- [MGM94] A. McKenney, L. Greengard, and A. Mayo. A fast Poisson solver for complex geometries. *J. of Comput. Physics*, 118, pp.348-355, 1994.
- [Mom05] M.S. Mommer. A smoothness preserving fictitious domain method for elliptic boundary-value problems. *IMA J. of Numer. Anal.*, doi :10.1093/imanum/dri045, 2005.
- [MT99] J.-F. Maitre and L. Tomas. A fictitious domain method for Dirichlet problems using mixed finite elements. *Appl. Math. Let.*, Vol. 12(4), pp. 117-120, 1999.
- [Neč67] J. Nečas. *Les Méthodes Directes en Théorie des Equations Elliptiques*. Masson, 1967.
- [Nit68] J. Nitsche. Ein kriterium für die quasi-optimalität des Ritzschen Verfahrens. *Numer. Math.*, 11 :346-348, 1968.
- [Pes72] C.S. Peskin. Flow patterns around heart valves : A numerical method. *J. Comput. Phys.*, Volume 10, Issue 2, Pages 252-271, 1972.
- [Pes02] C.S. Peskin. The immersed boundary method. *Acta Numerica*, Vol 11, pp 479-517, 2002.
- [PP02] S. Del Pino and O. Pironneau. A fictitious domain based on general PDE's solvers. *Proc. ECCOMAS 2001, Sept Swansea. K. Morgan ed. Wiley.*, 2002.
- [PW76] W. Proskurowski and O. Widlund. On the numerical solution of Helmholtz's equation by capacitance matrix method. *Mathematics of Computation*, Vol. 30 (135), pp. 433-468, 1976.
- [RAB05] I. Ramière, Ph. Angot, and M. Belliard. Fictitious domain methods to solve convection-diffusion problems with general boundary conditions. *AIAA 2005-4709. 17th Computational Fluid Dynamics Conference - AIAA. Toronto, Canada, 6-9 June*, 2005.

- [RAB06] I. Ramière, Ph. Angot, and M. Belliard. A general fictitious domain method with immersed jumps and multilevel nested structured meshes. *Journal of Comp. Physics*, submitted, 2006.
- [RAB07] I. Ramière, Ph. Angot, and M. Belliard. A fictitious domain approach with spread interface for elliptic problems with general boundary conditions. *Comp. Meth. in Appl. Mech. and Eng.*, vol. 196 (4-6), pp.766-781, 2007.
- [RB04] I. Ramière and M. Belliard. Etablissement des équations homogénéisées. *Note technique CEA, NT/DTN/SMTM/2004-13*, 2004.
- [RBA05] I. Ramière, M. Belliard, and Ph. Angot. On the simulation of Nuclear Power Plant Components using a fictitious domain approach. *Proc. in the 11th International Topical Meeting on Nuclear Thermal-Hydraulics (NURETH-11), Avignon (France) 2-6 October, Paper 193*, 2005.
- [RT92] P.A. Raviart and J.M. Thomas. *Introduction à l'analyse numérique des équations aux dérivées partielles*. Masson, 1992.
- [Ruk67] L.A. Rukhovets. A remark on the method of fictive domains. *Differential Equations*, 3,4 (in Russian), 1967.
- [Sau63] V.K. Saul'ev. On the solution of some boundary value problems on high performance computers by fictitious domain method. *Siberian Math. Journal*, 4(4) :912-925 (in Russian), 1963.
- [SBCL06] P. Schwartz, M. Barad, Ph. Colella, and T. Ligocki. A Cartesian grid embedded boundary method for the heat equation and Poisson's equation in three dimensions. *J. Comput. Phys.*, 211 :531-550, 2006.
- [Sch68] H. Schlichting. *Boundary Layer Theory*. Mac Graw Hill, 1968.
- [SF73] G. Strang and G.J. Fix. An Analysis of the Finite Element Method. *Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ*, 1973.
- [Son89] P. Sonneveld. CGS : A fast Lanczos-type solver for nonsymmetric linear system. *SIAM J.Sci. Statist.Comput.* 10, 36-52, 1989.
- [SS86] Y. Saad and M.H. Schultz. GMRes : a generalized minimal residual algorithm for solving nonsymmetric linear systems. *SIAM J. Sci. Statist. Comput.*, 7, 856-869, 1986.
- [Str72] G. Strang. Variational crimes in the finite element method. *The Mathematical Foundations of the Finite Element Method with Applications to Partial Differential Equations (A.K. Aziz, Editor)*, pp. 689-710, Academic Oress, New York, 1972.
- [Tal94] P. Le Tallec. Domain decomposition methods in computational mechanics. *Computational Mechanics advances, Vol. 1, North Holland, Elsevier Science*, pp. 121-220, 1994.
- [TBE⁺01] G. Tryggvason, B. Brunner, A. Esmaeeli, D. Juric, N. Al-Rawahari, W. Tauber, J. Han, S. Nas, and Y.-J. Jan. A front-tracking method for the computations of multiphase flow. *J. of Comput. Physics*, 169 : 708-759, 2001.
- [Tom97a] L. Tomas. *Shape Optimization and Fictitious Domains : analysis of new formulations and algorithm aspects*. PhD thesis, Ecole Centrale de Lyon, France, 1997.
- [Tom97b] L. Tomas. Une estimation d'erreur pour une formulation par domaine fictif avec multiplicateurs de volume du problème de Dirichlet. *C.R. Acad.Sci. Paris, Serie I Math.*, Vol. 325, pp. 793-796, 1997.
- [TT99] P. Le Tallec and M.D. Tidridi. Convergence analysis of domain decomposition algorithms with full overlapping for advection-diffusion problem. *Math. Comp.*, 68, pp. 585-606, 1999.

- [TWR03] S. Turek, D.C. Wan, and L.S. Rivkind. The Fictitious Boundary Method for the implicit treatment of Dirichlet boundary conditions with applications to incompressible flow simulations. *Lecture Notes in Computational Science and Engineering, Volume 35*, Springer Verlag, 2003.
- [UT01] S.O. Unverdi and G. Tryggvason. A front-tracking method for viscous, incompressible, multifluid flows. *J. of Comput. Physics*, 100 : 25-37, 2001.
- [Van92] V.A. Van Der Vost. Bi-CGSTAB : A fast and smoothly converging variant of Bi-CG for the solution of nonsymmetric linear systems. *SIAM J. Sci. Stat. Comput.* 13, 631-644, 1992.
- [Ver99] R. Verfürth. Error estimates for some quasi-interpolation operators. *Mathematical Modelling and Numerical Analysis*, 33(4) :695-713, 1999.
- [VV04] S.O. Vojtsekhovs'kyj and T.G. Vojtsekhovs'ka. On estimate of the rate of convergence of difference schemes for the second order elliptic equations in domains of arbitrary form. *Visn., Ser. Fiz.-Mat. Nauky, Kyïv. Univ. Im. Tarasa Schevchenka, No 3*, pp.177-182 (Ukrainian, English summary), 2004.
- [WB00] A. Wiegman and K.P. Bube. The explicit-jump immersed interface method : finite difference methods for PDEs with piecewise smooth solutions. *SIAM J. Numer. Anal.*, 37(3) pp. 827-862, 2000.
- [WT06] D. Wan and S. Turek. Direct numerical simulation of particulate flow via multigrid FEM techniques and the fictitious boundary method. *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, Vol. 51, pp. 531-566, 2006.
- [YCI⁺97] G. Yang, D. Causon, D. Ingram, R. Saunders, and P. Batten. A Cartesian cut cell method for compressible flows. *Part A. Static body problems, Aeronaut. J.* 101 (1001),pp. 47-56, 1997.
- [YMUS99] T. Ye, R. Mittal, H.S. Udaykumar, and W. Shyy. An accurate Cartesian grid method for viscous incompressible flows with complex immersed boundaries. *J. Comput. Phys.*, 156 :209-240, 1999.

Méthodes de domaine fictif pour des problèmes elliptiques avec conditions aux limites générales en vue de la simulation numérique d'écoulements diphasiques.

Résumé. Ce travail est dédié à la mise en place de deux méthodes originales de type domaine fictif pour la résolution de problèmes elliptiques (de type convection-diffusion) avec des conditions aux limites générales et éventuellement mixtes : Dirichlet, Robin ou Neumann. L'originalité de ces méthodes consiste à utiliser le maillage du domaine fictif, généralement non adapté à la géométrie du domaine physique, pour définir une frontière immergée approchée sur laquelle seront appliquées les conditions aux limites immergées. Un même schéma numérique générique permet de traiter toutes les conditions aux limites générales. Ainsi, contrairement aux approches classiques de domaine fictif, ces méthodes ne nécessitent ni l'introduction d'un maillage surfacique de la frontière immergée ni la modification locale du schéma numérique. Deux modélisations de la frontière immergée sont étudiées. Dans la première modélisation, appelée interface diffuse, la frontière immergée approchée est l'union des mailles traversées par la frontière originelle. Dans la deuxième modélisation, la frontière immergée est approchée par une interface dite fine s'appuyant sur les faces de cellules du maillage. Des conditions de transmissions algébriques combinant les sauts de la solution et du flux sont introduites sur cette interface fine. Pour ces deux modélisations, le problème fictif à résoudre ainsi que le traitement des conditions aux limites immergées sont détaillés. Un schéma aux éléments finis Q_1 est utilisé pour valider numériquement le modèle à interface diffuse alors qu'un nouveau schéma aux volumes finis est développé pour le modèle à interface fine et sauts immergés. Chaque méthode est combinée avec un algorithme de raffinement de maillage multi-niveaux (avec résidu de solution ou du flux) autour de la frontière immergée afin d'améliorer la précision de la solution obtenue.

Parallèlement, une analyse théorique de convergence en maillage non adapté au domaine physique a été effectuée pour une méthode d'éléments finis Q_1 . Cette étude démontre l'ordre de convergence des méthodes de domaine fictif mises en place.

Parmi les nombreuses applications industrielles possibles, une simulation sur une maquette d'échangeur de chaleur dans les centrales nucléaires permet d'apprécier la performance des méthodes mises en œuvre.

Mots-clés. Méthodes de domaine fictif, Problèmes elliptiques, Maillage non adapté, Raffinement local de maillage multi-niveaux, Éléments Finis, Volumes Finis.

Fictitious domain methods for elliptic problems with general boundary conditions with an application to the numerical simulation of two phase flows.

Abstract. This work is dedicated to the introduction of two original fictitious domain methods for the resolution of elliptic problems (mainly convection-diffusion problems) with general and eventually mixed boundary conditions : Dirichlet, Robin or Neumann. The originality lies in the approximation of the immersed boundary by an approximate interface derived from the fictitious domain Cartesian mesh, which is generally not boundary-fitted to the physical domain. The same generic numerical scheme is used to impose the embedded boundary conditions. Hence, these methods require neither a surface mesh of the immersed boundary nor the local modification of the numerical scheme. We study two modellings of the immersed boundary. In the first one, called spread interface, the approximate immersed boundary is the union of the cells crossed by the physical immersed boundary. In the second one, called thin interface, the approximate immersed boundary lies on sides of mesh cells. Additional algebraic transmission conditions linking both flux and solution jumps through the thin approximate interface are introduced. The fictitious problem to solve as well as the treatment of the embedded boundary conditions are detailed for the two methods. A Q_1 finite element scheme is implemented for the numerical validation of the spread interface approach while a new cell-centered finite volume scheme is derived for the thin interface approach with immersed jumps. Each method is then combined to multilevel local mesh refinement algorithms (with solution or flux residual) to increase the precision of the solution in the vicinity of the immersed interface.

A convergence analysis of a Q_1 finite element method with non-boundary fitted meshes is also presented. This study proves the convergence rates of the present methods.

Among the various industrial applications, the simulation on a model of heat exchanger in french nuclear power plants enables us to appreciate the performances of the fictitious domain methods introduced here.

Keywords. Fictitious domain methods, Elliptic problems, Non-boundary fitted mesh, Multilevel local mesh refinement, Finite Element, Finite Volume.

Discipline - Spécialité Doctorale. Mathématiques Appliquées.

Adresse des laboratoires. LATP-CMI, Technopôle de Château-Gombert, F-13453 Marseille cedex 13.
CEA-Cadarache, DEN/DTN/SMTM/LMTR, F-13108 St-Paul-Lez-Durance.