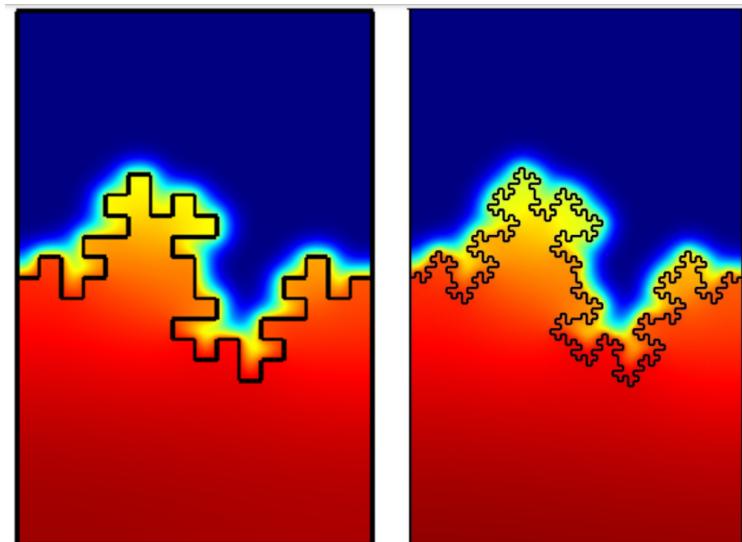




Optimisation de la vitesse de diffusion

10/06/2024

Rapport intermédiaire



EQUIPE N° 8 :
Corentin PIERRE
Thibault SANVOISIN
Hugo VUACHEUX

CLIENTS :
Anna
ROZANOVA-PIERRAT
Frédéric MAGOULÈS

RÉFÉRENTS :
Anna
ROZANOVA-PIERRAT
Frédéric MAGOULÈS



Abstract

On considère le problème de diffusion de la chaleur dans le cadre suivant : on a un fluide dans \mathbb{R}^2 et un sous-domaine compact $\Omega_+ \subset \mathbb{R}^2$ de \mathbb{R}^2 que l'on appelle milieu chaud où l'on fixe une température initiale plus importante que dans son complémentaire $\Omega_- = \mathbb{R}^2 \setminus \Omega_+$ le milieu froid, les températures initiales sont uniformes dans Ω_\pm . Le but est d'approcher numériquement par un algorithme d'optimisation, la forme permettant de maximiser la vitesse de diffusion entre les deux milieux pour un temps court. Pour cela on réalise d'abord une simulation numérique du problème à l'aide de la méthode des volumes finis sur un maillage triangulaire. Ensuite on réalise un algorithme d'optimisation naïf qui déplace itérativement les triangles du milieu chaud afin de toujours augmenter le flux jusqu'à un certain seuil $\epsilon > 0$ de variation, on compare la vitesse de diffusion entre une forme initiale et une forme optimisée. L'étape suivante est de réaliser un algorithme de *level-set* qui nous permettra de s'approcher d'une solution optimale, on donne une fonction de coût et une fonction ligne de niveaux et on applique une procédure itérative pour modifier la forme suivant une transformation optimale calculée à l'aide de la fonction ligne de niveau.

Table des matières

1	Introduction	1
2	État de l'art	2
3	Le problème de diffusion	4
3.1	Formalisation mathématique du problème	4
4	Résolution numérique du problème de diffusion	4
4.1	Résolution via la méthode des volumes finies	4
4.1.1	Définition et création du maillage	4
4.1.2	Discrétisation de l'équation de la chaleur 2D par la méthode des volumes finis	6
4.1.3	Etablissement du schéma numérique par méthode des volumes finis	8
4.1.4	Mise sous forme matricielle du shéma numérique	9
4.1.5	Simulation de l'équation de la chaleur avec des volumes finis triangulaires	10
4.1.6	Simulation de l'équation de la chaleur avec des volumes finis carrés	10
4.1.7	Discrétisation en temps par le schéma de Crank-Nicolson	13
5	Optimisation du temps de diffusion à volume constant	17
5.1	Optimisation de la forme par un algorithme naïf	17
5.1.1	Principe général	17
5.1.2	Complexité du programme	17
5.1.3	Limites et conclusion	18
5.1.4	Visualisation	19
5.2	Optimisation par la méthode level-set	21
5.2.1	Etablissement de la formulation variationnelle	21
5.2.2	Construction de la fonction de coût J	23
5.2.3	Calcul du lagrangien pour le problème non-stationnaire	23
5.2.4	La méthode level-set $d = 2$	25
5.3	Pénalisations	27
6	Conclusion et perspectives	32

1 Introduction

Pour une quantité d'aluminium fixée, il est plus intéressant de construire plusieurs ailettes de refroidissement qu'un seul bloc d'aluminium pour refroidir un ordinateur. Si ce résultat semble assez intuitif (on augmente la surface de refroidissement avec l'air en multipliant le nombre d'aillettes), jusqu'où peut-on le pousser ? Comment maximiser la surface d'échange avec l'air pour refroidir au mieux l'ordinateur ? Cela fait partie des questions auxquelles on a tenté d'apporter une réponse au cours de ces six premiers mois de projet.

Voici le problème auquel nous nous sommes confrontés. Soit un milieu chaud Ω_+ , à la température $u_+(t = 0) = 1$, plongé dans un milieu froid Ω_- , à la température $u_-(t = 0) = 0$. On souhaite trouver la meilleure forme du matériau chaud pour que le flux thermique traversant Ω_+ soit maximal sur un temps court fixé. La physique fournit des équations dictant l'évolution du flux et de la chaleur dans les deux milieux. Nous partirons de ces équations et conditions pour modéliser le transfert thermique. Nous utiliserons la méthode des volumes finis pour pouvoir en faire une simulation numérique, afin d'appliquer plus tard des algorithmes d'optimisation de la forme du matériau chaud, plus précisément, on écrira un algorithme naïf, coûteux en ressources mémoires et temporelles, et l'algorithme de level-set, tous deux faisant évoluer la frontière du milieu chaud, le faisant tendre vers une forme qui transfère nettement mieux la chaleur.

2 État de l'art

En 1982, Pierre-Gilles de Gennes généralise un résultat connu en diffusion particulière sur la vitesse caractéristique de diffusion dans son article *Physique des surfaces et des interfaces* [4]. Le problème étudié est alors le suivant : on considère un poreux (une éponge) saturé par une solution excitée au temps $t = 0$ qui baigne dans un fluide et on s'intéresse à la quantité $M(t)$ qui compte le pourcentage d'espèce non-relaxé au temps t . Le résultat connu était que la variation $M(0) - M(t)$ pour un temps t court, est proportionnelle à \sqrt{Dt} où D le coefficient de diffusion. Pierre-Gilles de Gennes généralise ce résultat à d'autres interfaces qu'un matériaux poreux, et notamment dans le cas d'une interface fractale. Il trouve que la variation $M(0) - M(t)$ dépend de la dimension fractale de l'interface D_f comprise dans [2, 3[dans ce cas (2 étant pour une interface non-fractale), la variation $M(0) - M(t)$ est proportionnelle à $(Dt)^{\frac{3-D_f}{2}}$, dans le cas $D_f = 2$ on retrouve le résultat qui était déjà connu mais on voit que par exemple pour $D_f = \frac{5}{2}$ on a que la variation est proportionnelle à $(Dt)^{\frac{1}{4}}$ et comme on est dans le cas où t est très petit on remarque donc que plus la frontière du poreux à une dimension fractale importante plus la variation $M(0) - M(t)$ est importante aux temps t courts.

En 2012, l'article *Faster Diffusion across an Irregular Boundary* [6] montre expérimentalement et par simulation que pour la diffusion de chaleur entre un milieu froid et un milieu chaud, la diffusion se fait plus rapidement pour un bord irrégulier (préfractal) que pour un bord lisse pour un temps court, et pour un écart de température entre les deux milieux suffisamment important. Ce premier résultat a été obtenu par expérience en laboratoire avec une plaque d'aluminium de 4mm d'épaisseur chauffée avec un bordure fractale de dimension $D_f = \frac{3}{2}$ (le problème est considéré en 2D) posé sur un film similaire à celui d'un écran d'ordinateur *liquid crystal film* qui permet de visualiser la diffusion car il change d'opacité et de couleur en fonction de la température. Une hypothèse a donc été ajoutée dans le cadre de la diffusion thermique, par rapport à la diffusion particulière et à l'article de de Gennes, il faut un écart de température suffisamment élevé entre les deux milieux, dans le cas contraire la forme irrégulière de l'interface n'est plus optimale.

En 2015, le premier résultat théorique sur les observations de 2012 apparaît dans l'article *Short-time heat diffusion in compact domains with discontinuous transmission boundary conditions* [2]. Le problème est alors le suivant : on considère le problème de diffusion thermique pour un fluide dans \mathbb{R}^d , dans ce fluide on considère un milieu chaud qui est un domaine compact $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ et un milieu froid $\mathbb{R}^d \setminus \Omega$, l'article montre analytiquement à partir des équations du problème de diffusion la validité de l'approche de de Gennes qu'utiliser une interface fractale, en particulier une courbe de Minkowski est effectivement plus efficace pour la diffusion à temps court.

Cependant l'interrogation qu'il reste est de savoir s'il existe une forme optimale, on sait maintenant qu'une forme fractale est plus efficace qu'une forme lisse pour la diffusion à temps court, mais on ne sait pas si c'est la forme la plus optimale, c'est pourquoi en 2020 paraît l'article *Existence of optimal shapes for heat diffusions*

across irregular interfaces [3] qui démontre l'existence, à partir du problème de diffusion, d'une forme optimale parmi les formes ayant un bord irrégulier. Il y a donc existence d'une forme optimale, mais il n'y pas d'unicité de cette forme, il est donc possible de trouver différentes formes qui optimise le transfert de chaleur et donc il y a possibilité de trouver une forme non seulement optimale pour la diffusion mais une forme qui serait aussi réalisable industriellement pour par exemple avoir une application en refroidissement des micro-composants, thématique déjà mentionnée en conclusion de l'article *Faster Diffusion across an Irregular Boundary* [6].

Il y a donc un intérêt nouveau, trouver explicitement une forme optimale, car pour l'instant on ne sait pas à quoi ressemble une des formes optimales. Un problème similaire existe dans le cadre de la propagation des ondes, en contrôle de la pollution acoustique. Dans ce cadre, le but est de trouver une forme permettant d'atténuer les ondes sonores ou électromagnétiques, un exemple d'application est l'isolation sonore d'une salle de conférence. Ce problème a déjà été résolu dans l'article *Fractal boundaries in acoustic energy wave absorption* [5], dans cet article la partie qui nous intéresse est la partie sur l'algorithme d'optimisation de forme, en effet on pourrait s'inspirer de la démarche suivie dans le cadre des ondes sonores et de l'adapter dans le cadre de la diffusion thermique pour approcher une forme optimale. La méthode d'optimisation utilisée est la méthode de *level-set*, c'est une méthode qui a été développée par Stanley Osher et James Sethian dans les années 1980, le fonctionnement est le suivant : on introduit une fonction ψ dit « ligne de niveau » telle que ψ vaut 0 sur le bord, cette fonction ψ vérifient une équation d'Hamilton-Jacobi, dont un des coefficients est calculé à partir de la fonction de coût de notre problème de minimisation. Cette équation permet de transporter le bord suivant la direction optimale qui est donnée par dérivation de l'énergie. La méthode est décrite plus en détail dans le cours d'introduction de Grégoire Allaire *INTRODUCTION À L'OPTIMISATION DE FORMES* [1] qui donne aussi des résultats sur la dérivation par rapport à une forme et par rapport à un bord.

3 Le problème de diffusion

3.1 Formalisation mathématique du problème

Le problème que nous allons étudier est décrit dans [2], on le rappelle ici

$$\partial_t u - D \Delta u = 0, \quad x \in \mathbb{R}^d, t > 0 \quad (1)$$

$$u_+|_{t=0} = 1, \quad u_-|_{t=0} = 0 \quad (2)$$

$$D_- \frac{\partial u_-}{\partial n}|_{\partial\Omega} = \lambda(x)(u_- - u_+) \quad (3)$$

$$D_- \frac{\partial u_-}{\partial n}|_{\partial\Omega} = D_+ \frac{\partial u_+}{\partial n}|_{\partial\Omega} \quad (4)$$

Avec $\mathbb{R}^d = \Omega_+ \cup \Omega_-$, $\Omega = \Omega_+$, $u_\pm = u|_{\Omega_\pm}$, $D = D_+ \mathbf{1}_{\Omega_+} + D_- \mathbf{1}_{\Omega_-}$ et $\lambda \in L^\infty(\partial\Omega \setminus \Gamma_\infty)$ où $\Gamma_\infty = \{x \in \partial\Omega \mid \lambda(x) = +\infty\}$.

4 Résolution numérique du problème de diffusion

Nous utiliserons trois types de maillages : un maillage basé sur des cellules de Voronoï, un maillage triangulaire, et un maillage carré régulier. Deux méthodes de discrétisation seront mises en œuvre : la méthode des volumes finis appliquée aux trois types de maillages, et une discrétisation de type Crank-Nicolson, spécifiquement pour le maillage carré.

4.1 Résolution via la méthode des volumes finies

4.1.1 Définition et création du maillage

Dans un cadre général,

On définit un maillage \mathcal{T} de par des volumes de contrôle (ou cellules) K de la façon suivante :

1. Les volumes de contrôle K sont des polygones convexes qui forment une partition de Ω :

$$\overline{\Omega} = \bigcup_{K \in \mathcal{T}} \overline{\Omega} \quad \text{et} \quad \overline{K} \cap \overline{L} = \emptyset \text{ pour } K \neq L.$$

2. Pour chaque cellule K , il existe un point $x_K \in K$ appelé centre, tel que les propriétés suivantes soient vérifiées :
 - (a) Pour chaque cellule L adjacente à K , on a $x_K \neq x_L$ et le segment de droite $(x_K x_L)$ est perpendiculaire à l'arête e commune aux deux cellules K et L (cf. Figure 1.5). On notera $e = (K, L)$.
 - (b) Pour chaque arête e appartenant au bord $\partial\Omega$, la droite passant par x_K et perpendiculaire à l'arête e , intersecte e (cf. Figure 1.6).

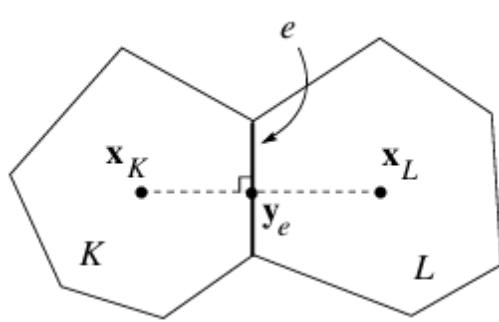


FIGURE 1 – Cellules admissibles

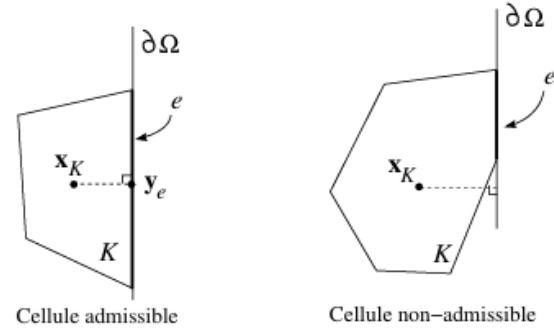


FIGURE 2 – Admissibilité au bord

Un tel maillage sera dit admissible au sens des Volumes Finis.

Une fois le cadre général défini, nous nous concentrerons par la suite sur des cas spécifiques : un maillage cartésien, c'est-à-dire une grille similaire à celle utilisée en différences finies centrées, un maillage triangulaire, et enfin un maillage plus complexe constitué de cellules de Voronoï.

Détaillons les deux derniers cas de maillage :

- 1. Maillage triangulaire.** On considère une triangulation du domaine Ω , qui est admissible dans le cadre des Éléments Finis. Cette admissibilité implique que si deux triangles partagent une arête, ils possèdent nécessairement deux sommets communs. De plus, on suppose que tous les angles des triangles sont inférieurs à $\pi/2$. En conséquence, les médiatrices des côtés de chaque triangle se croisent à l'intérieur du triangle. Les volumes de contrôle sont définis comme étant les triangles de la triangulation, et les centres x_K des cellules sont choisis comme les centres de masse des triangles, c'est-à-dire le point d'intersection des médiatrices. Grâce à l'hypothèse sur les angles, les centres x_K se trouvent toujours à l'intérieur des triangles.

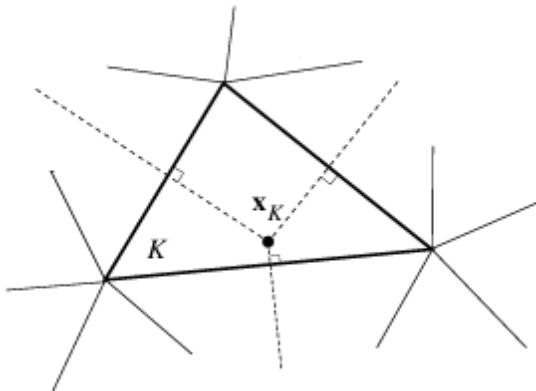


FIGURE 3 – Maillage triangulaire

- 2. Maillage de Voronoï.** Soit P un ensemble de points situés dans le domaine

4.1 Résolution via la méthode des volumes finies

Ω . Les cellules de Voronoï associées à chaque point $x \in P$ sont définies par :

$$K_x = \{y \in \Omega \mid \|x - y\| < \|z - y\|, \forall z \in P, z \neq x\}.$$

La construction des cellules de Voronoï repose sur la délimitation des régions par les médiatrices des segments reliant les points de P (cf. Figure 1.8). Les volumes de contrôle K correspondent aux cellules de Voronoï obtenues à partir d'une triangulation de Delaunay du domaine Ω . Chaque cellule de Voronoï K est associée à un centre $x_K \in K$, qui est un sommet de la triangulation.

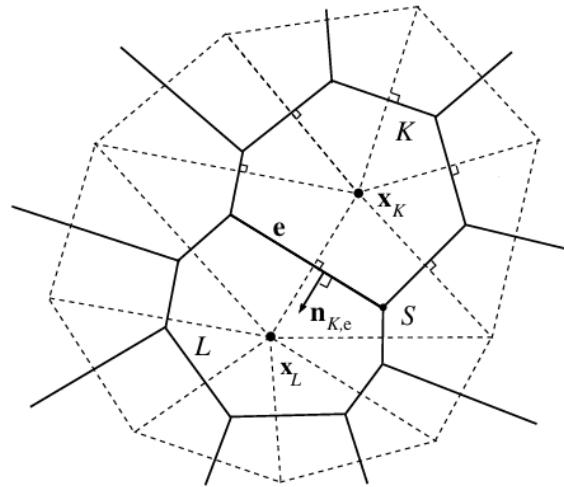


FIGURE 4 – Cellules de Voronoï associé à une triangulation de Delaunay

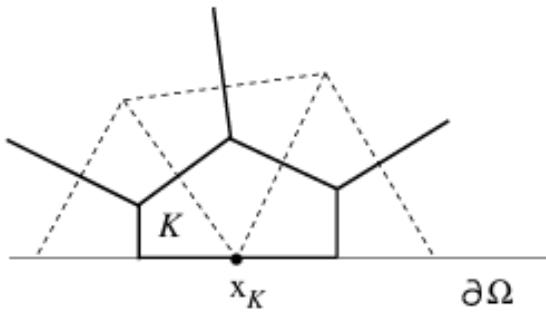


FIGURE 5 – Cellules de Voronoï associé à une triangulation de Delaunay

4.1.2 Discrétisation de l'équation de la chaleur 2D par la méthode des volumes finis

Tout d'abord, avant de pouvoir optimiser la forme du bord pour notre problème, il faut pouvoir le résoudre numériquement afin ensuite d'appliquer une méthode d'optimisation. On utilise la méthode des volumes finis pour résoudre numériquement le problème de diffusion.

4.1 Résolution via la méthode des volumes finies

On se place dans le cas $d = 2$, comme on ne peut pas simuler un plan de taille infini, on considère que notre espace de travail est $E = [0, 1]^2$, on considère alors $\Omega = \Omega_+ \subset E$ et Ω_- tels que $E = \Omega \cup \Omega_-$, on suppose que l'on fait un maillage quelconque de E , on notera les cellules de ce maillage $(C_i)_{i \in \mathcal{I}}$ avec \mathcal{I} l'ensemble des indices des cellules.

On pose

$$\forall i \in \mathcal{I}, u_i = \frac{1}{\text{mes}(C_i)} \int_{C_i} u \quad (5)$$

Partons de l'équation (1), on va intégrer cette équation sur une cellule et diviser par la mesure de la cellule

$$\forall i \in \mathcal{I}, \frac{1}{\text{mes}(C_i)} \int_{C_i} \partial_t u - \frac{1}{\text{mes}(C_i)} \int_{C_i} D \Delta u = 0$$

En utilisant le théorème de Green-Ostrogradsky car $\Delta u = \nabla \cdot (\nabla u)$ et en sachant que la cellule est fixe et que donc on peut inverser l'intégrale et la dérivée on a que

$$\forall i \in \mathcal{I}, \partial_t u_i - \frac{1}{\text{mes}(C_i)} \int_{\partial C_i} D \frac{\partial u}{\partial n} d\mu = 0$$

L'avantage de cette écriture est que l'on peut utiliser les conditions au bord si la cellule C_i en possède.

Nous nous plaçons dans un cadre bidimensionnel, avec $d = 2$. La méthode de discréétisation par volumes finis présente un avantage majeur : sa grande flexibilité. Elle permet de s'adapter facilement à une large variété de géométries, qu'il s'agisse de maillages réguliers ou irréguliers. De plus, elle simplifie de manière significative le traitement des conditions aux limites en les intégrant naturellement dans les calculs réalisés sur les faces des volumes de contrôle. Cette méthode se révèle particulièrement efficace pour traiter des domaines complexes ou des frontières présentant des irrégularités.

Dans ce cas on peut donner une expression du bord C_i à l'aide des arêtes σ des cellules, on a alors pour chaque triangle C_i

$$\partial C_i = \bigcup_{\sigma \in \mathcal{E}_i} \sigma$$

où \mathcal{E}_i est l'ensemble des arêtes de T_i . On a donc l'équation

$$\partial_t u_i - \frac{1}{\text{mes}(C_i)} \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_i} \int_{\partial \sigma} D \frac{\partial u}{\partial n_\sigma} d\mu = 0 \quad (6)$$

Maintenant on approxime le flux exacte $F_{i,\sigma} = \int_{\partial \sigma} D \frac{\partial u}{\partial n_\sigma} d\mu$ par son flux approché

$$F_{i,\sigma} = -D \frac{u_\sigma - u_i}{d_{i,\sigma}} \text{mes}(\sigma) \quad (7)$$

4.1 Résolution via la méthode des volumes finis

où $d_{i,\sigma}$ est la distance entre le barycentre de la cellule et l'arête σ . On obtient alors l'équation

$$\forall i \in \mathcal{I}, \partial_t u_i - \frac{1}{\text{mes}(C_i)} \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_i} F_{i,\sigma} = 0 \quad (8)$$

Afin d'obtenir notre schéma numérique il nous reste à discréteriser en temps. Soit $n \in \mathbb{N}$ et $t = T$. On considère $n > 0$ comme le nombre de pas de discréterisation en temps, avec $k = \frac{T}{n}$ et $t^k = k \cdot \Delta t$ pour $k = 0, 1, \dots, n$. On note l'approximation u_k telle que :

$$u_K^k \approx u_K(t_k) = \frac{1}{|K|} \int_K u(x, t_k) dx.$$

4.1.3 Etablissement du schéma numérique par méthode des volumes finis

Ainsi, la discréterisation en temps conduit aux schémas numériques suivants :

— **Par Euler explicite :**

$$u_K^{k+1} = u_K^k - \frac{\Delta t}{\text{mes}(K)} \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_i} F_{i,\sigma}^k, \quad \text{si } K \text{ est une cellule intérieure,} \quad (9)$$

$$u_K^{k+1} = 0, \quad \text{si } K \text{ appartient à } \partial\Omega. \quad (10)$$

— **Par Euler implicite :**

$$u_K^{k+1} = u_K^k - \frac{\Delta t}{\text{mes}(K)} \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_i} F_{i,\sigma}^{k+1}, \quad \text{si } K \text{ est une cellule intérieure,} \quad (11)$$

$$u_K^{k+1} = 0, \quad \text{si } K \text{ appartient à } \partial\Omega. \quad (12)$$

Où une cellule est considérée comme intérieure si elle ne partage pas d'arête avec le bord extérieur $\partial\Omega$. Il ne reste plus qu'à calculer le flux approximé $F_{i,\sigma}^k$ en fonction d'où se situe l'arête, ce qui se traite au cas par cas avec la méthode des volumes finis comme suit :

— **Pour une arête entre deux cellules dans un même milieu :** La conservation du flux donne :

$$F_{K,\sigma}^i + F_{L,\sigma} = 0 \implies F_{K,\sigma} = -F_{L,\sigma} = D_{\pm} \frac{\text{mes}(\sigma)}{d_{L,K}} (u_{\pm,K}^i - u_{\pm,L}^i).$$

$$F_{K,\sigma}^i = D_{\pm} \frac{\text{mes}(\sigma)}{d_{L,K}} (u_{\pm,K}^i - u_{\pm,L}^i) = \alpha_{K,L} (u_{\pm,K}^i - u_{\pm,L}^i). \quad (13)$$

— **Pour une arête située sur un bord du maillage :** La température est fixée par :

$$u_{\sigma} = \frac{1}{\text{mes}(\sigma)} \int_{\sigma} g(y) dS.$$

$$F_{K,\sigma}^i = -\frac{D_{\pm}}{d_{K,\sigma}} \left(\frac{1}{\text{mes}(\sigma)} \int_{\sigma} g(y) dS - u_{\pm,K}^i \right) = \gamma_{K,\sigma} - \theta_{K,\sigma} u_{\pm,K}^i. \quad (14)$$

— Pour une arête à l'interface entre deux milieux :

$$F_{K,\sigma}^i = \frac{\lambda D_+ \text{mes}(\sigma)}{D_+ + \lambda d_{K,\sigma}} (u_{\pm,K}^i - u_{\pm,L}^i) = \beta_{K,L} (u_{\pm,K}^i - u_{\pm,L}^i). \quad (15)$$

4.1.4 Mise sous forme matricielle du schéma numérique

Ainsi, nous pouvons expliciter notre schéma numérique sous forme matricielle :

— Pour un schéma explicite :

$$\mathbf{U}^{k+1} = (\mathbf{I}_N - \Delta t \cdot \mathbf{H}^{-1} \mathbf{A}) \mathbf{U}^k$$

— Pour un schéma implicite :

$$(\mathbf{H} + \Delta t \mathbf{A}) \mathbf{U}^{k+1} = \mathbf{H} \mathbf{U}^k$$

Où N est le nombre de cellules intérieures :

$$\mathbf{H} = \begin{bmatrix} |K_1| & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & |K_2| & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & |K_N| \end{bmatrix}$$

L'assemblage de la matrice A se fait en parcourant les arêtes intérieure $e = (K, L) \in \mathcal{E}_{\text{int}}$ et on ajoute les contributions des cellules adjacentes, tel que l'on ait dans le cas particulier suivant :

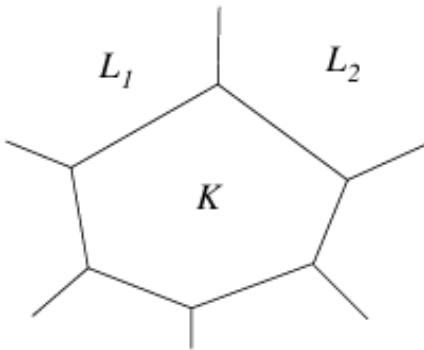


FIGURE 6 – Cellules de Voronoï adjacentes

4.1 Résolution via la méthode des volumes finies

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} \cdots & \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_{\text{int}}} (\beta_{K,L} \text{ ou } \alpha_{K,L}) \Big|_{\sigma} & \cdots & -(\beta_{L_1,K} \text{ ou } \alpha_{L_1,K}) & \cdots & -(\beta_{L_2,K} \text{ ou } \alpha_{L_2,K}) & \cdots \\ & \vdots & & \vdots & & \vdots & \\ \cdots & -(\beta_{L_1,K} \text{ ou } \alpha_{L_1,K}) & \cdots & \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_{\text{int}}} (\beta_{L_1,L} \text{ ou } \alpha_{L_1,L_2}) \Big|_{\sigma} & \cdots & -(\beta_{L_1,L_2} \text{ ou } \alpha_{L_1,L_2}) & \cdots \\ & \vdots & & \vdots & & \vdots & \\ \cdots & -(\beta_{L_2,K} \text{ ou } \alpha_{L_2,K}) & \cdots & -(\beta_{L_1,L_2} \text{ ou } \alpha_{L_1,L_2}) & \cdots & \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_{\text{int}}} (\beta_{L_2,L} \text{ ou } \alpha_{L_2,L}) \Big|_{\sigma} & \cdots \\ & \vdots & & \vdots & & \vdots & \end{bmatrix}$$

On peut vérifier que le schéma explicite est stable si et seulement si

$$\lambda = \max(D_{\pm})\Delta t \max_{1 \leq i \leq N} \frac{1}{|K_i|} \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_{K_i}} \frac{\text{mes}(\sigma)}{|x_{K_i} - x_L|} \leq 1,$$

4.1.5 Simulation de l'équation de la chaleur avec des volumes finis triangulaires

Le cas général pour un maillage admissiles au sens des volumes finis à été présenté ci-dessus, ici, intéressons nous au cas particulier d'un maillage triangulaire régulier

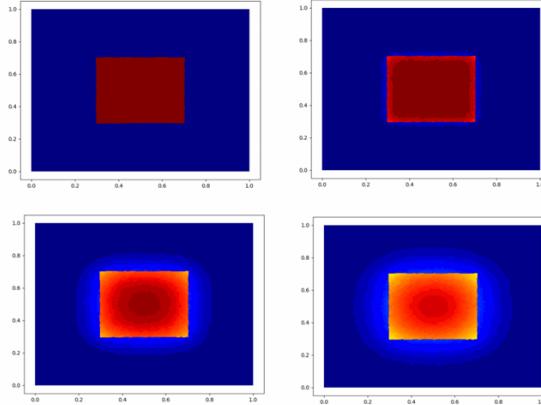


FIGURE 7 – Diffusion de la chaleur pour des volumes finis triangulaires

4.1.6 Simulation de l'équation de la chaleur avec des volumes finis carrés

On considère un maillage carré régulier avec $J \times K$ cellules (J, K entiers quelconques), on note $\Delta x, \Delta y$ les pas de discréétisation en espace.

L'avantage d'un maillage carré et régulier est qu'il est facile de numérotter les cellules, on pose alors

$$\forall (i,j), u_{i,j}(t) = \frac{1}{\Delta x \Delta y} \int_{i\Delta x}^{(i+1)\Delta x} \int_{j\Delta y}^{(j+1)\Delta y} u(t, x, y) dx dy$$

On a donc

$$\partial_t u_{i,j} - \frac{1}{\Delta x \Delta y} \int_{\sigma_{i,j}} D \frac{\partial u}{\partial n} d\mu = 0$$

où $\sigma_{i,j}$ est le bord de la cellule i, j . Grâce à la figure 8, on va pouvoir développer l'intégrale sur le bord et la dérivée normale.

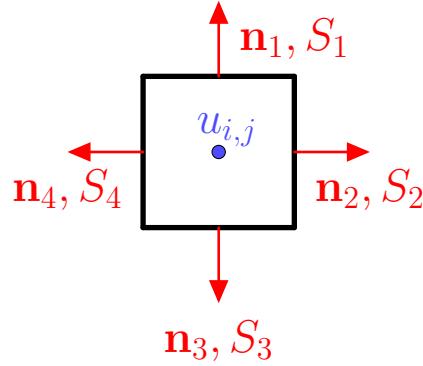


FIGURE 8 – Une cellule du maillage carré régulier, n_i représente les normales des S_i qui sont les arêtes de la cellule.

En explicitant le gradient on a $\nabla u = (\partial_x u, \partial_y u)^\top$ donc

Dans le cas d'une case sans conditions au bord on a que

$$\begin{aligned} \int_{S_1} D_{\pm} \partial_y u dS_1 &= \int_{(i-\frac{1}{2})\Delta x}^{(i+\frac{1}{2})\Delta x} D_{\pm} \partial_y u(t, x, j\Delta y) dx \approx D_{\pm} \Delta x \partial_y u_{i,j+\frac{1}{2}} \\ \int_{S_2} D_{\pm} \partial_x u dS_2 &= \int_{(j-\frac{1}{2})\Delta y}^{(j+\frac{1}{2})\Delta y} D_{\pm} \partial_x u(t, (i+1)\Delta x, y) dy \approx D_{\pm} \Delta y \partial_x u_{i+\frac{1}{2},j} \\ \int_{S_3} D_{\pm} \partial_y u dS_3 &= \int_{(i-\frac{1}{2})\Delta x}^{(i+\frac{1}{2})\Delta x} D_{\pm} \partial_y u(t, x, (j+1)\Delta y) dx \approx D_{\pm} \Delta x \partial_y u_{i,j-\frac{1}{2}} \\ \int_{S_4} D_{\pm} \partial_x u dS_4 &= \int_{(j-\frac{1}{2})\Delta y}^{(j+\frac{1}{2})\Delta y} D_{\pm} \partial_x u(t, i\Delta x, y) dy \approx D_{\pm} \Delta y \partial_x u_{i-\frac{1}{2},j} \end{aligned}$$

Donc on obtient

$$\partial_t u_{i,j}(t) = \frac{D_{\pm}}{\Delta x \Delta y} \left(\Delta x (\partial_y u_{i,j+\frac{1}{2}}(t) - \partial_y u_{i,j-\frac{1}{2}}(t)) + \Delta y (\partial_x u_{i+\frac{1}{2},j}(t) - \partial_x u_{i-\frac{1}{2},j}(t)) \right) \quad (16)$$

On écrit les discréétisations des dérivées (on applique un schéma centrée pour $h_x = \Delta x/2$ et $h_y = \Delta y/2$)

$$\partial_y u_{i,j+\frac{1}{2}}(t) = \frac{u_{i,j+1} - u_{i,j}}{\Delta x}$$

$$\partial_y u_{i,j-\frac{1}{2}}(t) = \frac{u_{i,j} - u_{i,j-1}}{\Delta y}$$

$$\partial_y u_{i+\frac{1}{2},j}(t) = \frac{u_{i+1,j} - u_{i,j}}{\Delta x}$$

$$\partial_y u_{i-\frac{1}{2},j}(t) = \frac{u_{i,j} - u_{i-1,j}}{\Delta x}$$

On obtient alors

$$\begin{aligned} \partial_t u_{i,j}(t) = & \frac{D_{\pm}}{\Delta y^2} (u_{i,j+1} - u_{i,j}) - \frac{D_{\pm}}{\Delta y^2} (u_{i,j} - u_{i,j-1}) \\ & + \frac{D_{\pm}}{\Delta x^2} (u_{i+1,j} - u_{i,j}) - \frac{D_{\pm}}{\Delta x^2} (u_{i,j} - u_{i-1,j}) \end{aligned}$$

On considère pour l'exemple que S_1 fait partie de la frontière de Ω_+ .

$$\begin{aligned} D_- \partial_n u_- &= \lambda(x)(u_- - u_+) \\ D_- \partial_n u_- &= D_+ \partial_n u_+ \\ \uparrow \text{n}_1, S_1 \\ u_{i,j} \end{aligned}$$

On a que

$$\begin{aligned} \int_{S_1} D \frac{\partial u}{\partial n} d\mu &= \int_{(i-\frac{1}{2})\Delta x}^{(i+\frac{1}{2})\Delta x} \lambda(x, (j + \frac{1}{2})\Delta y) \left(u(t, x, (j + \frac{1}{2})\Delta x) - u(t, x, j\Delta y) \right) \\ \int_{S_1} D \frac{\partial u}{\partial n} d\mu &\approx \Delta x \lambda_{i,j+\frac{1}{2}} \left[u_{i,j+\frac{1}{2}}(t) - u_{i,j}(t) \right] \end{aligned}$$

On pose alors

$$\lambda_{i,j+\frac{1}{2}} = \frac{\lambda_{i,j+1} + \lambda_{i,j}}{2} \text{ et } u_{i,j+\frac{1}{2}} = \frac{u_{i,j+1} + u_{i,j}}{2}$$

On obtient alors

$$\int_{S_1} D \frac{\partial u}{\partial n} d\mu \approx \frac{\Delta x}{4} (\lambda_{i,j+1} + \lambda_{i,j})(u_{i,j+1} - u_{i,j})$$

Dans une case où seul S_1 est au bord on a donc l'équation

$$\begin{aligned}\partial_t u_{i,j}(t) = & \frac{1}{4\Delta y}(\lambda_{i,j+1} + \lambda_{i,j})(u_{i,j+1} - u_{i,j}) - \frac{D}{\Delta y^2}(u_{i,j} - u_{i,j-1}) \\ & + \frac{D}{\Delta x^2}(u_{i+1,j} - u_{i,j}) - \frac{D}{\Delta x^2}(u_{i,j} - u_{i-1,j})\end{aligned}$$

4.1.7 Discrétisation en temps par le schéma de Crank-Nicolson

Discrétisation du problème

On se donne un maillage $M * M'$, où sur chaque case du maillage, la température est constante. Pour résoudre numériquement le jeu d'équations, nous utiliserons le schéma de Crank-Nicolson. Cette approche fait apparaître le système linéaire suivant, qu'il faudra établir puis résoudre :

$$\boxed{\begin{aligned}A_{ij}U_{i-1,j}^{n+1} + B_{ij}U_{i,j}^{n+1} + C_{ij}U_{i+1,j}^{n+1} \\ + D_{ij}U_{i,j-1}^{n+1} + E_{ij}U_{i,j+1}^{n+1} + F_{ij} \\ = G_{ij}U_{i-1,j}^n + H_{ij}U_{i,j}^n + I_{ij}U_{i+1,j}^n \\ + J_{ij}U_{i,j-1}^n + K_{ij}U_{i,j+1}^n + L_{ij}.\end{aligned}}$$

$U_{i,j}^n$ représente la valeur moyenne de la température dans la maille (i, j) au temps n (nos inconnues).

Les $A_{ij}, B_{ij}, \dots, L_{ij}$ sont des coefficients réels à trouver avant de résoudre notre système linéaire.

Méthode des volumes finis pour faire apparaître les coefficients de l'équation

Pour établir les coefficients $A_{ij}, B_{ij}, C_{ij}, D_{ij}, E_{ij}, F_{ij}, G_{ij}, H_{ij}, I_{ij}, J_{ij}, K_{ij}, L_{ij}$, nous utilisons la méthode des volumes finis. L'idée principale est d'intégrer l'équation de la chaleur sur une maille (i, j) de dimensions $\Delta x \times \Delta y$, puis de discrétiser chaque terme.

Reprendons l'équation de départ intégrée sur la maille $V_{i,j}$:

$$\int_{V_{i,j}} \partial_t u \, dV - \int_{\partial V_{i,j}} D \nabla u \cdot \mathbf{n} \, dS = \int_{V_{i,j}} s(x, y, t) \, dV. \quad (17)$$

En utilisant le théorème de divergence, cette équation devient :

$$\int_{V_{i,j}} \partial_t u \, dV - \sum_{f \in \text{faces}} \int_f D \nabla u \cdot \mathbf{n} \, dl = \int_{V_{i,j}} s(x, y, t) \, dV. \quad (18)$$

Notons les contributions des trois termes :

4.1 Résolution via la méthode des volumes finies

- **Terme de dérivée temporelle** : Le premier terme $\int_{V_{i,j}} \partial_t u \, dV$ se discrétise ainsi :

$$\int_{V_{i,j}} \partial_t u \, dV \approx \frac{U_{i,j}^{n+1} - U_{i,j}^n}{\Delta t} \Delta x \Delta y. \quad (19)$$

- **Terme source** : Le terme de production $\int_{V_{i,j}} s(x, y, t) \, dV$ est également discrétisé par Crank-Nicolson, ce qui donne :

$$\int_{V_{i,j}} s(x, y, t) \, dV \approx \frac{1}{2} (S_{i,j}^{n+1} + S_{i,j}^n) \Delta x \Delta y. \quad (20)$$

- **Terme de flux diffusif** : La contribution du second terme $-\int_{\partial V_{i,j}} D \nabla u \cdot \mathbf{n} \, dS$ dépend de la position de la maille (i, j) par rapport aux domaines Ω_+ et Ω_- .

- Prenons pour exemple une maille (i, j) , telle qu'elle et tous ses voisins soient dans Ω_+ , sauf sa voisine de gauche $(i, j-1)$, qui est dans Ω_- .

En utilisant la condition de saut de température (3) et en discrétisant suivant un schéma de Crank-Nicolson, cela donne pour la face gauche (voisin $(i, j-1)$) dans Ω_- :

$$\int_{\text{face gauche}} D \nabla u \cdot \mathbf{n} \, dl = \int_{\text{face gauche}} \lambda(u_+ - u_-) \, dl \approx \frac{\lambda}{2} (U_{i,j}^{n+1} - U_{i,j-1}^{n+1} + U_{i,j}^n - U_{i,j-1}^n) \Delta y. \quad (21)$$

- Pour la face du bas (le voisin $(i+1, j)$ dans Ω_+) :

$$\int_{\text{face du bas}} D \nabla u \cdot \mathbf{n} \, dl \approx \frac{D_+}{\Delta x} (U_{i+1,j}^{n+1} - U_{i,j}^{n+1} + U_{i+1,j}^n - U_{i,j}^n) \Delta y. \quad (22)$$

Là aussi, en utilisant le schéma de Crank-Nicolson, on applique le même principe pour la face de droite, et la face supérieure.

là aussi en utilisant le schéma de crank-nicolson. On applique le même principe pour la face du haut et du bas.

Tous les flux discrétisés, on obtient :

$$\begin{aligned} \frac{U_{ij}^{n+1} - U_{ij}^n}{\Delta t} \Delta x \Delta y &= \frac{\lambda}{2} [(U_{ij}^{n+1} - U_{i,j-1}^{n+1}) + (U_{ij}^n - U_{i,j-1}^n)] \Delta y + \frac{D}{2} \left[\frac{U_{i-1,j}^{n+1} - U_{ij}^{n+1}}{\Delta y} + \frac{U_{i-1,j}^n - U_{ij}^n}{\Delta y} \right] \Delta y \\ &+ \frac{D}{2} \left[\frac{U_{i,j+1}^{n+1} - U_{i,j+1}^n}{\Delta x} + \frac{U_{ij}^n - U_{ij}^n}{\Delta x} \right] \Delta y + \frac{D}{2} \left[\frac{U_{i+1,j}^{n+1} - U_{ij}^{n+1}}{\Delta y} + \frac{U_{i+1,j}^n - U_{ij}^n}{\Delta y} \right] \Delta x \end{aligned}$$

Bord gauche

On identifie les coefficients :

$$\begin{aligned}
 A_{ij} &= -D_+ \frac{\Delta x}{2\Delta y} & B_{ij} &= \frac{\Delta x \Delta y}{\Delta t} - \lambda \frac{\Delta y}{2} + D_+ \frac{\Delta x}{2\Delta y} + D_+ \frac{\Delta y}{2\Delta x} + D_+ \frac{\Delta x}{2\Delta y} \\
 C_{ij} &= -D_+ \frac{\Delta x}{2\Delta y} & D_{ij} &= \lambda \frac{\Delta y}{2} \\
 E_{ij} &= -D_+ \frac{\Delta y}{2\Delta x} & F_{ij} &= -\frac{\Delta x \Delta y}{2} S_{ij}^{n+1} \\
 G_{ij} &= D_+ \frac{\Delta x}{2\Delta y} & H_{ij} &= \frac{\Delta x \Delta y}{\Delta t} + \lambda \frac{\Delta y}{2} - D_+ \frac{\Delta x}{2\Delta y} - D_+ \frac{\Delta y}{2\Delta x} - D_+ \frac{\Delta x}{2\Delta y} \\
 I_{ij} &= D_+ \frac{\Delta x}{2\Delta y} & J_{ij} &= -\lambda \frac{\Delta y}{2} \\
 K_{ij} &= D_+ \frac{\Delta y}{2\Delta x} & L_{ij} &= \frac{\Delta x \Delta y}{2} S_{ij}^n
 \end{aligned}$$

Il reste une multitude de cas à traiter qui nous donnerons la valeur des coefficients des autres équations linéaires. On utilisera des arguments de symétrie pour s'épargner de fastidieux calculs. On ne donnera pas la valeur de tous les coefficients ici pour ne pas alourdir le rapport. Ils sont cependant disponibles dans un autre fichier, et dans nos programmes python.

Une fois ce système linéaire établi, il existe des bibliothèques python qui permettent de le résoudre. Ils permettent donc de trouver pour toutes les mailles, à chaque instant, la température correspondante.

L'avantage de la méthode de Crank-Nicolson par rapport à d'autre est qu'elle est stable, peu importe les pas d'espaces, de temps où les coefficients choisit.

Verification de la cohérence de la simulation numérique

On considère la fonction $u(t, x, y) = e^{-t} \sin(\pi x/N) \sin(\pi y/N)$, on peut l'injecter dans l'équation (1) et obtenir le terme source

$$f(t, x, y) = e^{-t} \sin(\pi x/N \Delta x) \sin(\pi y/N \Delta y) \left(1 - D \left(\frac{1}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta y^2} \right) \right)$$

En prenant $\lambda = +\infty$ (dans la simulation on ne pourra que prendre maximum $\lambda = 100$) on est dans le cas où il y a continuité entre u_+ et u_- et on obtient la figure suivante

On observe que l'erreur est partout inférieure à 1%, et qu'elle est plus importante au bord de Ω_+ , ce qui peut s'expliquer par le fait que la simulation ne pouvant supporter que $\lambda = 100$ au maximum, le flux entre Ω_+ et Ω_- n'est donc pas totalement continu pour u_{num} alors qu'il l'est pour $u_{analytique}$. L'erreur dépend aussi de la taille du maillage, plus le maillage est fin moins l'erreur est importante.

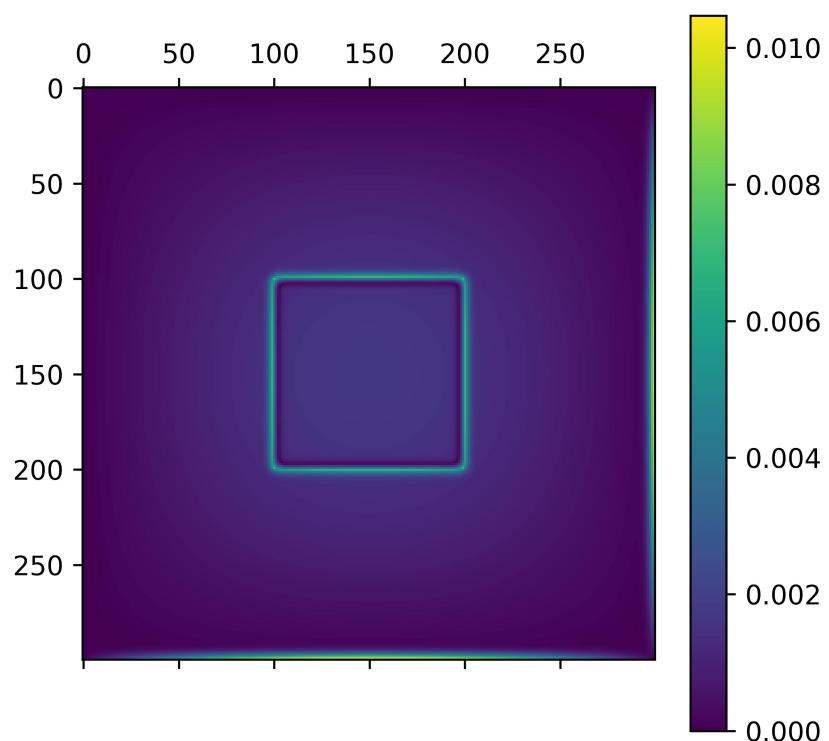


FIGURE 9 – L’erreur $|u_{num} - u_{analytique}|$ entre la solution numérique et la solution analytique lorsque $\lambda = +\infty$ à l’instant final sur un maillage 300x300

5 Optimisation du temps de diffusion à volume constant

5.1 Optimisation de la forme par un algorithme naïf

On dispose maintenant d'une façon de calculer le flux pénétrant une forme A sur un temps quelconque. On souhaite maximiser ce flux sur quelques itérations, pour un volume V_A fixé. On impose aussi à A de rester connexe.

5.1.1 Principe général

```
Initialiser A (On prend A simple, un carré.)  
  
Tant que (toutes les figures constructibles à partir de A  
sont non testées)  
  
    Pour chaque triangle i allumables  
        Pour chaque triangle j éteignables  
            Construire A' en déplaçant i à j  
            Calculer le flux de A'  
  
            Si (flux A' > flux A + eps) et (A' connexe)  
                A = A'  
                Actualiser la liste des triangles allumables  
                Actualiser la liste des triangles éteignables  
  
            Sinon  
                Ne rien Faire  
        Fin Pour  
    Fin Tant que
```

Plus de précision sur les triangles "allumables" et "éteignables"

Les triangles allumables sont ceux qui sont dans Ω_+ et collé à Ω_- . (en rouge sur la figure de gauche)

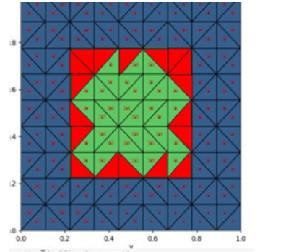
Les triangles déplaçables sont ceux qui sont dans Ω_- et collé à Ω_+ . (en blanc sur la figure de droite)

5.1.2 Complexité du programme

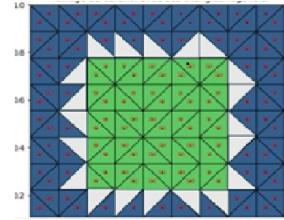
Introduisons quelques notations :

- Maillage constitué de $n_x \times n_y$ points
- A a un volume de n triangles

5.1 Optimisation de la forme par un algorithme naïf



(a) Triangles allumables



(b) Triangles éteignables

FIGURE 10 – Triangles que l'on va choisir d'intégrer ou de retirer de la forme du milieu chaud

Les fonctions de calcul de surface, de distance à un point ou à une arrête sont négligeables par rapport au coût du calcul de flux sur chaque maille de notre figure.

Calculer le flux d'une cellule à une complexité de $O(3n(2n_x n_y - n)) = O(f)$. Et notre maillage possède $2n_x n_y$ triangles, soit $O(F) = O(2n_x n_y) \times O(f)$ pour activer le flux de notre figure.

On teste au maximum $n_x n_y$ nouvelle forme dans notre programme (limite fixée par nous-même, en plus du flux devant être supérieur à eps) et avant de trouver une figure avec un meilleur flux, on peut en avoir testé au pire des cas environ n figure.

On teste pour celles-ci si la figure est connexe $\rightarrow O(n)$

On calcule le flux de la figure $\rightarrow O(F)$

Soit au total, $O(F \times n^2) = O(n_x \times n_y \times n^3 \times (2 \times n_x \times n_y - n))$.

Nous n'avons pas cherché à optimiser cette complexité en détail, il est certain que des améliorations du programme permettraient d'augmenter son efficacité temporelle.

5.1.3 Limites et conclusion

Au niveau des résultats observés, on constate qu'à la fin de l'algorithme, le flux de la figure finale est systématiquement 3x supérieur à celui de la figure initiale.

On constate aussi qu'on gagne beaucoup en flux dans les premières itérations, mais qu'après un certain nombre (qui dépend du nombre de triangles composant la figure initiale), on gagne nettement moins de flux sur chaque itération (plateau atteint vers l'itération 75 sur la figure du dessous)

Il serait aussi intéressant d'initialiser notre forme A différemment, peut-être par quelque chose de moins simple (une croix, un cercle, le début d'un motif fractal) et

voir vers quoi notre nouvelle forme tend.

Évidemment, cet algorithme ne prétend pas trouver une solution optimale au problème. On l'a mis en place pour avoir un aperçu rapide de ce à quoi pourrait ressembler une forme un peu plus optimisée que ce que l'on pourrait imaginer, et parce qu'on n'avait pas encore implémenté l'algorithme Level-Set.

Quand cet algorithme sera implémenté, on pourra comparer les formes générées par ce dernier et par l'algorithme naïf, nous permettant alors de savoir si ce dernier fournit des solutions plus ou moins loin de l'optimale.

Cependant, l'algorithme naïf produit bien des figures qui ont une surface de contact avec le milieu froid bien plus grand que la figure initiale. Ceci est conforme à l'article de De Gennes et à l'intuition, que pour maximiser l'échange de flux avec la surface froide, une solution consiste à agrandir la surface de contact entre milieu chaud et milieu froid.

Produire ces nouvelles formes prend du temps. L'algorithme naïf est très gourmand en ressources, et met 12 heures à fournir une solution sur un maillage 35×35 , avec $\text{Vol}(A) = 250$.

5.1.4 Visualisation

Il est possible de générer des animations de ces évolutions avec le code donné sous forme de Notebook à côté du rapport.

5.1 Optimisation de la forme par un algorithme naïf

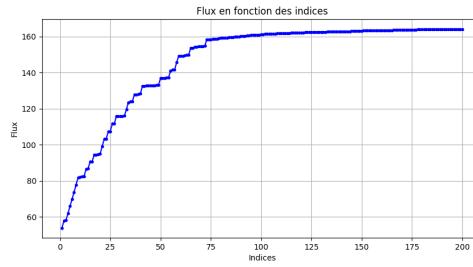


FIGURE 11 – Flux de la figure à chaque itération, sur un maillage 15x15

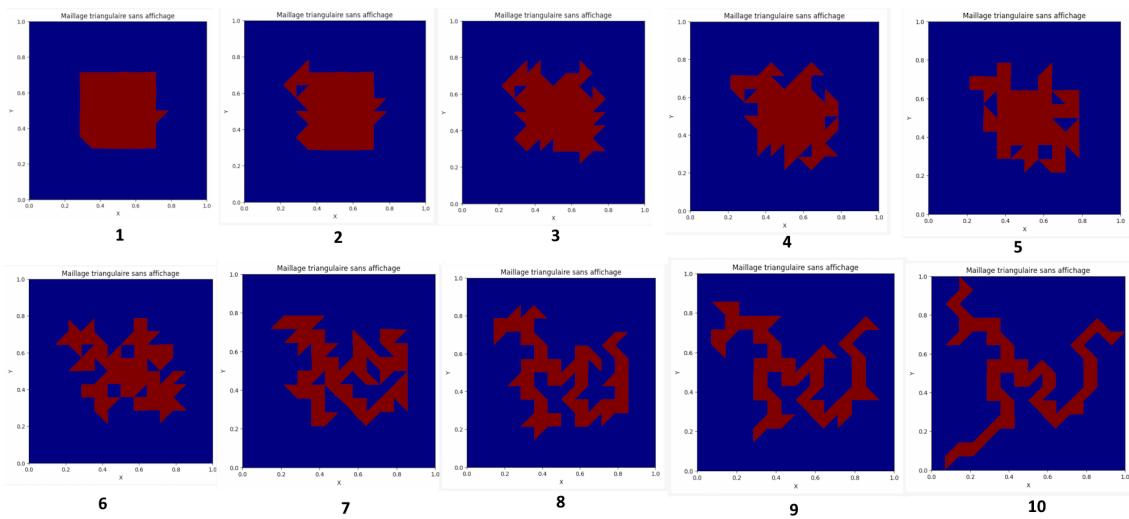


FIGURE 12 – Flux traversant la forme optimisée

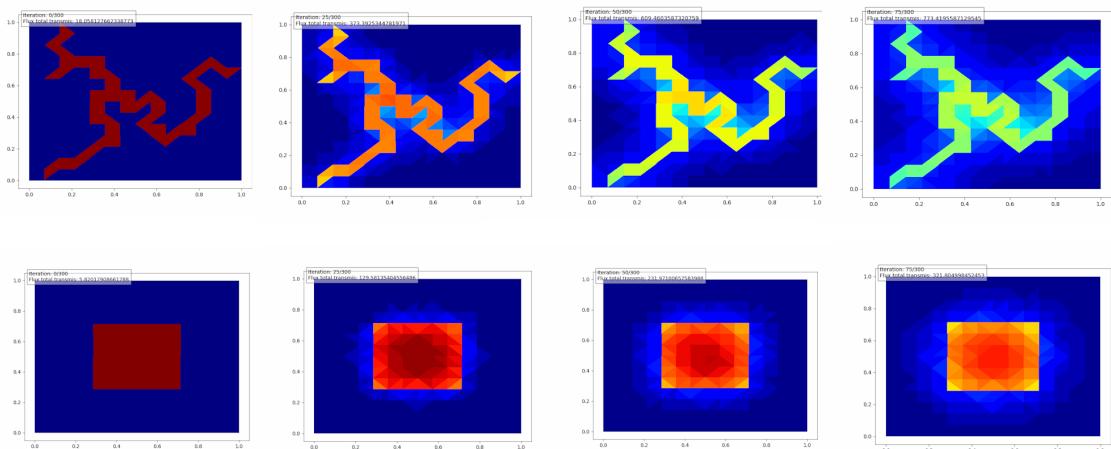


FIGURE 13 – Comparaison de la vitesse de la diffusion de la chaleur entre la forme initiale et la forme optimisée sur les mêmes itérations

5.2 Optimisation par la méthode level-set

5.2.1 Etablissement de la formulation variationnelle

On multiplie (1) par une fonction ϕ au moins C^1 et on intègre sur \mathbb{R}^d

$$\int_{\mathbb{R}^d} \partial_t u \phi - \int_{\mathbb{R}^d} D \Delta u \phi = 0$$

Comme $\mathbb{R}^d = \Omega_+ \cup \Omega_-$, on peut découper les intégrales en 2 morceaux (un sur Ω_+ , l'autre sur Ω_-).

$$\int_{\Omega_+} \partial_t u_+ \phi_+ + \int_{\Omega_-} \partial_t u_- \phi_- - \int_{\Omega_+} D_+ \Delta u_+ \phi_+ - \int_{\Omega_-} D_- \Delta u_- \phi_- = 0$$

avec $\phi_\pm = \phi|_{\pm}$

On applique la formule de Green sur les intégrales où le Laplacien apparaît

$$\int_{\Omega_\pm} D_\pm \Delta u_\pm = D_\pm \left\langle \frac{\partial u}{\partial n}, Tr \phi_\pm \right\rangle_{B'(\partial\Omega_\pm), B(\partial\Omega_\pm)} - \int_{\Omega_\pm} D_\pm \nabla u_\pm \phi_\pm$$

On supposera que $\frac{\partial u}{\partial n} \in L^2(\partial\Omega, \mu)$ pour avoir l'égalité suivante

$$D_\pm \left\langle \frac{\partial u_\pm}{\partial n}, Tr \phi_\pm \right\rangle_{B'(\partial\Omega_\pm), B(\partial\Omega_\pm)} = D_\pm \int_{\partial\Omega} \frac{\partial u_\pm}{\partial n} Tr \phi_\pm d\mu$$

On a donc

$$\int_{\Omega_\pm} D_\pm \Delta u_\pm = D_\pm \int_{\partial\Omega} \frac{\partial u_\pm}{\partial n} Tr \phi_\pm d\mu - \int_{\Omega_\pm} D_\pm \nabla u_\pm \cdot \nabla \phi_\pm$$

En revenant à la formulation faible, on a

$$\begin{aligned} 0 &= \int_{\Omega_+} \partial_t u_+ \phi_+ + \int_{\Omega_-} \partial_t u_- \phi_- + \int_{\Omega_+} D_+ \nabla u_+ \cdot \nabla \phi_+ + \int_{\Omega_-} D_- \nabla u_- \cdot \nabla \phi_- \\ &\quad - D_+ \int_{\partial\Omega} \frac{\partial u_+}{\partial n} Tr \phi_+ d\mu - D_- \int_{\partial\Omega} \frac{\partial u_-}{\partial n} Tr \phi_- d\mu \end{aligned}$$

Dans les intégrales sur les bords $\partial\Omega_\pm$, on peut utiliser les conditions aux bords (3) et (4) pour établir que $D_+ \frac{\partial u_+}{\partial n} = D_- \frac{\partial u_-}{\partial n} = \lambda(x)(u_- - u_+)$ puis que

$$\int_{\partial\Omega_\pm} D_\pm \frac{\partial u_\pm}{\partial n} Tr(\phi_\pm) d\mu = \int_{\partial\Omega_\pm \setminus \Gamma_\infty} \lambda(x)(u_- - u_+) d\mu$$

On va maintenant regrouper les deux intégrales sur le bords sous la même intégrale, on a que $\partial\Omega_+ = \partial\Omega_- = \partial\Omega$, donc on peut regrouper sous la même intégrale

$$\int_{\partial\Omega_+} D_+ \frac{\partial u_+}{\partial n} Tr(\phi_+) d\mu + \int_{\partial\Omega_-} D_- \frac{\partial u_-}{\partial n} Tr(\phi_-) d\mu = \int_{\partial\Omega_+} \left(D_+ \frac{\partial u_+}{\partial n} Tr(\phi_+) - D_- \frac{\partial u_-}{\partial n} Tr(\phi_-) \right) d\mu$$

vu que l'on intègre maintenant sur $\partial\Omega_+$, la normale sur $\partial\Omega_-$ est dans le sens opposé à celle sur $\partial\Omega_+$, on a donc ajouté un signe moins devant D_- , on obtient alors

$$\int_{\partial\Omega_+} \left(D_+ \frac{\partial u_+}{\partial n} \text{Tr}(\phi_+) - D_- \frac{\partial u_-}{\partial n} \text{Tr}(\phi_-) \right) d\mu = \int_{\partial\Omega_+ \setminus \Gamma_\infty} \lambda(x)(u_- - u_+) (\text{Tr}(\phi_+) - \text{Tr}(\phi_-)) d\mu$$

et par linéarité de l'opérateur trace, et en prenant l'opposé de notre intérale (pour obtenir un signe + dans la formulation faible)

$$\int_{\partial\Omega_+} \left(D_+ \frac{\partial u_+}{\partial n} \text{Tr}(\phi_+) - D_- \frac{\partial u_-}{\partial n} \text{Tr}(\phi_-) \right) d\mu = - \int_{\partial\Omega_+ \setminus \Gamma_\infty} \lambda(x)(u_- - u_+) \text{Tr}(\phi_- - \phi_+) d\mu$$

On a finalement la formulation faible suivante

$$0 = \int_{\Omega_+} \partial_t u_+ \phi_+ + \int_{\Omega_-} \partial_t u_- \phi_- + \int_{\Omega_+} D_+ \nabla u_+ \cdot \nabla \phi_+ + \int_{\Omega_-} D_- \nabla u_- \cdot \nabla \phi_- \\ + \int_{\partial\Omega_+ \setminus \Gamma_\infty} \lambda(x)(u_- - u_+) \text{Tr}(\phi_- - \phi_+) d\mu$$

Pour établir la formulation variationnelle on va se placer dans l'espace $V = \{f \in L^2(\mathbb{R}^d) \mid f_+ = f|_{\Omega_+} \in H^1(\Omega_+), f_- = f|_{\Omega_-} \in H^1(\Omega_-)\}$ avec sa norme $\|\cdot\|_{V(\mathbb{R}^d)}$, tous deux repris de « *Existence of optimal shapes for heat diffusions across irregular interfaces* » [3] dont on admet, grâce à l'article, que V est un espace de Hilbert. On a donc la formulation variationnelle suivante : $\forall v \in V$, on cherche l'unique $u \in V$ tel que

$$0 = \int_{\Omega_+} \partial_t u_+ v_+ + \int_{\Omega_-} \partial_t u_- v_- + \int_{\Omega_+} D_+ \nabla u_+ \cdot \nabla v_+ + \int_{\Omega_-} D_- \nabla u_- \cdot \nabla v_- \\ + \int_{\partial\Omega_+ \setminus \Gamma_\infty} \lambda(x)(u_- - u_+) \text{Tr}(v_- - v_+) d\mu$$

toujours grâce à l'article, on sait que la formulation variationnelle est bien posée. Pour la suite on pose

$$FV(u_+, u_-, v_+, v_-) = \int_{\Omega_+} \partial_t u_+ v_+ + \int_{\Omega_-} \partial_t u_- v_- + \int_{\Omega_+} D_+ \nabla u_+ \cdot \nabla v_+ + \int_{\Omega_-} D_- \nabla u_- \cdot \nabla v_- \\ + \int_{\partial\Omega_+ \setminus \Gamma_\infty} \lambda(x)(u_- - u_+) \text{Tr}(v_- - v_+) d\mu$$

et

$$FV_S(u_\pm, v_\pm) = \int_{\Omega_+} D_+ \nabla u_+ \cdot \nabla v_+ + \int_{\Omega_-} D_- \nabla u_- \cdot \nabla v_- + \int_{\partial\Omega_+ \setminus \Gamma_\infty} \lambda(x)(u_- - u_+) \text{Tr}(v_- - v_+) d\mu$$

5.2.2 Construction de la fonction de coût J

On souhaite construire une fonction de coût pour notre problème d'optimisation, on peut tout d'abord s'inspirer de ce qui a été fait dans le cadre de l'équation d'Helmholtz dans l'article [5], posons

$$j_t(\Omega, u) = A \int_{\Omega_+} |u_+|^2 + B \int_{\Omega_-} |u_-|^2 + C \int_{\partial\Omega \setminus \Gamma_\infty} \lambda(x) |u_- - u_+|^2 d\mu$$

ceci est la fonction de coût pour le problème stationnaire à un instant $t > 0$, si on se place dans le cas du problème non-stationnaire, on a que j_t dépend du temps donc on pose

$$\begin{aligned} J_T(\Omega, u) &= \int_0^T j_t(\Omega, u) dt \\ J_T(\Omega, u) &= \int_0^T \left[A \int_{\Omega_+} |u_+|^2 + B \int_{\Omega_-} |u_-|^2 + C \int_{\partial\Omega \setminus \Gamma_\infty} \lambda(x) |u_- - u_+|^2 d\mu \right] dt \end{aligned}$$

5.2.3 Calcul du lagrangien pour le problème non-stationnaire

On pose le lagrangien pour tout $t > 0$

$$\mathcal{L}_t(\Omega, w_\pm, q_\pm) = FV(w_\pm, q_\pm) + j_t(w_\pm)$$

et

$$\mathcal{L}(\Omega, w_\pm, q_\pm) = \int_0^T \mathcal{L}_t(\Omega, w_\pm, q_\pm) dt$$

Pour dériver la formulation variationnelle par rapport à w_\pm , on utilise la formule de Green

$$\int_{\Omega} D_\pm \nabla w_\pm \cdot \nabla q_\pm = - \int_{\Omega} D_\pm \Delta q_\pm w_\pm + \int_{\partial\Omega} D_\pm \frac{\partial q_\pm}{\partial n} w_\pm$$

en dérivant par rapport à w_\pm et en multipliant par ϕ_\pm , on a que

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{\partial}{\partial w_\pm} \left(\int_{\Omega} D_\pm \nabla w_\pm \cdot \nabla q_\pm \right), \phi_\pm \right\rangle &= \left\langle \frac{\partial}{\partial w_\pm} \left(- \int_{\Omega} D_\pm \Delta q_\pm w_\pm + \int_{\partial\Omega} D_\pm \frac{\partial q_\pm}{\partial n} w_\pm \right), \phi_\pm \right\rangle \\ &= - \int_{\Omega} D_\pm \Delta q_\pm \phi_\pm + \int_{\partial\Omega} D_\pm \frac{\partial q_\pm}{\partial n} \phi_\pm \\ &= \int_{\Omega} D_\pm \nabla q_\pm \cdot \nabla \phi_\pm \end{aligned}$$

La dérivée de l'intégrale avec la dérivée en temps est

$$\left\langle \frac{\partial}{\partial w_\pm} \left(\int_{\Omega_\pm} (\partial_t w_\pm) q_\pm \right), \phi_\pm \right\rangle = \int_{\Omega_\pm} (\partial_t q_\pm) \phi_\pm$$

car c'est une forme linéaire. On calcule les dérivées par rapport à w_+ et w_-

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial w_+}, \phi_+ \right\rangle &= 2A \int_{\Omega_+} w_+ \phi_+ + \int_{\partial\Omega \setminus \Gamma_\infty} 2\lambda(x) C(w_+ - w_-) d\mu \\ &+ D_+ \int_{\Omega_+} \nabla q_+ \nabla \phi_+ + \int_{\Omega_+} (\partial_t q_+) \phi_+ + \int_{\partial\Omega \setminus \Gamma_\infty} \lambda(x) [q_+ - q_-] \phi_+ d\mu \\ \left\langle \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial w_-}, \phi_- \right\rangle &= 2A \int_{\Omega_-} w_- \phi_- + \int_{\partial\Omega \setminus \Gamma_\infty} 2\lambda(x) C(w_+ - w_-) d\mu \\ &+ D_- \int_{\Omega_-} \nabla q_- \nabla \phi_- + \int_{\Omega_-} (\partial_t q_-) \phi_- + \int_{\partial\Omega \setminus \Gamma_\infty} \lambda(x) [q_- - q_+] \phi_- d\mu \end{aligned}$$

En égalisant ces deux termes à 0, on trouve la formulation variationnelle des problèmes adjoints pour w_+ et w_- , on peut alors remonter aux formulations fortes

$$\begin{cases} D_- \Delta q_- - \partial_t q_- = 2Bu_- \\ D_- \frac{\partial q_-}{\partial n}|_{\partial\Omega_-} = \lambda(x) [2C(u_- - u_+) + (q_+ - q_-)] \\ q_-|_{t=0} = q_0^- \end{cases} \quad (23)$$

En notant p_\pm les solutions des problèmes adjoints, on a que

$$\frac{\partial \mathcal{L}_t(\Omega, u_\pm, p_\pm)}{\partial \Omega} = j'_t(\Omega)$$

donc

$$\frac{\partial \mathcal{L}(\Omega, u_\pm, p_\pm)}{\partial \Omega} = \int_0^T j'_t(\Omega) dt = J'_T(\Omega)$$

On dérive en utilisant les formules trouvables dans « *Introduction à l'optimisation de forme* » [1]

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \Omega} &= \int_0^T \int_{\partial\Omega} \langle \theta, n \rangle A |u_+|^2 dt - \int_0^T \int_{\partial\Omega} \langle \theta, n \rangle B |u_-|^2 dt \\ &+ \int_0^T \int_{\partial\Omega} \langle \theta, n \rangle (\partial_n [C\lambda(x)|u_- - u_+|^2] + H [C\lambda(x)|u_- - u_+|^2]) dsdt \\ &+ \int_0^T \int_{\partial\Omega} \langle \theta, n \rangle (\partial_t u_+) p_+ dsdt - \int_0^T \int_{\partial\Omega} \langle \theta, n \rangle (\partial_t u_-) p_- dsdt \\ &+ \int_0^T \int_{\partial\Omega} \langle \theta, n \rangle D_+ \nabla u_+ \nabla p_+ dsdt - \int_0^T \int_{\partial\Omega} \langle \theta, n \rangle D_- \nabla u_- \nabla p_- dsdt \\ &+ \int_0^T \int_{\partial\Omega \setminus \Gamma_\infty} \langle \theta, n \rangle \partial_n [\lambda(x)(u_- - u_+) Tr(p_- - p_+)] dsdt \\ &+ \int_0^T \int_{\partial\Omega \setminus \Gamma_\infty} \langle \theta, n \rangle H(\lambda(x)(u_- - u_+) Tr(p_- - p_+)) dsdt \end{aligned}$$

On pose

$$\begin{aligned} \mathcal{V} = & \int_0^T [A|u_+|^2 - B|u_-|^2 + (\partial_n [C\lambda(x)|u_- - u_+|^2] + H [C\lambda(x)|u_- - u_+|^2])] dt \\ & + \int_0^T [(\partial_t u_+) p_+ - (\partial_t u_-) p_- + D_+ \nabla u_+ \nabla p_+ - D_- \nabla u_- \nabla p_-] dt \\ & + \int_0^T [\partial_n (\lambda(x)(u_- - u_+) Tr(p_- - p_+)) + H(\lambda(x)(u_- - u_+) Tr(p_- - p_+))] dt \end{aligned}$$

et on obtient que

$$J'_T(\Omega)(\theta) = \int_{\partial\Omega \setminus \Gamma_\infty} \mathcal{V} \langle \theta, n \rangle ds$$

Dans le cas particulier $A = B = 1$ et $C = 0$ le problème adjoint peut s'écrire sous la forme

$$\begin{cases} D\Delta p - \partial_t p = 2u \\ D_+ \frac{\partial p_+}{\partial n}|_{\partial\Omega} = D_- \frac{\partial p_-}{\partial n}|_{\partial\Omega} \\ D_- \frac{\partial p_-}{\partial n}|_{\partial\Omega} = \lambda(x)(p_- - p_+) \\ p_-|_{t=0} = 0, p_+|_{t=0} = 1 \end{cases} \quad (24)$$

avec $D = D_+ \mathbf{1}_{\Omega_+} + D_- \mathbf{1}_{\Omega_-}$, $u_\pm = u|_{\Omega_\pm}$ la solution du problème (1) et $p_\pm = p|_{\Omega_\pm}$

5.2.4 La méthode level-set $d = 2$

Pour la méthode du level-set on considère une boîte $D \subset \mathbb{R}^2$ telle que $\Omega_+ \subsetneq D$, sur laquelle on va considérer un maillage régulier de pas $\Delta x = \Delta y$ et la fonction

$$\psi : (x, t) \mapsto \begin{cases} \psi(x, t) > 0, \text{ si } x \in D \setminus \Omega_+ \\ \psi(x, t) = 0, \text{ si } x \in D \cap \partial\Omega \\ \psi(x, t) < 0, \text{ si } x \in \Omega_+ \end{cases} \quad (25)$$

d'après le cours de Grégoire Allaire « *Introduction à l'optimisation de forme* » [1], cette fonction suit une équation d'Hamilton-Jacobi qui permet de transporter le bord de Ω

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} + \mathcal{V} \|\nabla_x \psi\|_2 = 0$$

et de plus la direction optimale de déplacement est donnée par $n = \frac{\nabla_x \psi}{\|\nabla_x \psi\|_2}$. Pour résoudre numériquement cette équation on utilise un schéma "upwind" décrit en annexe de [5].

Étapes de la méthode level-set pour passer de l'étape k à l'étape $k + 1$

1. Résolution du problème (1) associé à u_{\pm} pour la forme Ω_k
2. Résolution des problèmes adjoints pour avoir p_+ et p_- pour la forme Ω_k
3. Calcul de la fonction ψ pour la forme Ω_k
4. Calcul du gradient de ψ car $n = \frac{\nabla_x \psi}{\|\nabla_x \psi\|_2}$ pour la forme Ω_k
5. Puis on a que le bord de Ω_{k+1} vérifie $\partial\Omega_{k+1} = \psi^{-1}(\{0\})$

5.3 Pénalisations

Pour que les résultats de la simulation numérique aient une signification physique, il faut ajouter des contraintes sur la forme Ω_+ à optimiser :

Une contrainte sur le volume, qui doit rester constant :

Pour ce faire, on ajoute dans la fonction de coût un terme proportionnel au carré de la différence entre le volume à l'instant t $Vol(\Omega)$ et le volume initial $Vol(\Omega_0)$: $\kappa(Vol(\Omega) - Vol(\Omega_0))^2$. On a utilisé un terme au carré à la place d'une simple valeur absolue pour s'assurer de ne pas avoir de problèmes de dérivabilité par rapport à Ω .

Une contrainte sur la formation de trous dans la forme Ω_+ :

On souhaite éviter la présence de trous dans Ω_+ , ce qui revient à imposer que Ω_- soit connexe. Pour ce faire, nous avons d'abord calculé le nombre de trous, puis ajouté une pénalité de la forme $\Gamma|N_{\text{trou}}|$, où N_{trou} désigne le nombre de trous. Ce calcul était initialement réalisé à l'aide d'un algorithme de parcours en profondeur, coûteux en mémoire. Cette première approche rendait le temps de simulation trop long, ce qui nous a conduits à rechercher une méthode plus efficace. Nous avons alors adopté le Two-Pass Connected Component Labeling avec Union-Find, une méthode standard dans la littérature, qui s'exécute en temps linéaire $O(n)$. Cet algorithme minimise l'allocation dynamique de mémoire et optimise l'utilisation du cache, ce qui a permis de réduire considérablement le temps de simulation.

Une contrainte sur la connexité de Ω_+ :

Ω_+ doit rester connexe. Pour cela, nous ajoutons une pénalité de la forme $\Lambda|N_{\text{cc}} - 1|$, où N_{cc} désigne le nombre de composantes connexes de Ω_+ . Initialement, ce calcul était effectué, comme précédemment, à l'aide d'un algorithme de parcours en profondeur, également coûteux en mémoire. Afin d'améliorer les performances, nous avons également adopté le Two-Pass Connected Component Labeling avec Union-Find.

Une contrainte sur la longueur du bord de Ω_+ :

Le processus d'optimisation, en l'absence de pénalisation, tend à produire des formes peu compactes en allongeant excessivement la longueur du bord de Ω_+ pour maximiser la vitesse de diffusion. Afin d'encourager l'obtention de formes plus compactes, nous avons introduit une pénalisation sur la longueur du bord de Ω_+ , mise en œuvre à l'aide d'un algorithme parallèle qui calcule, pour chaque cellule de Ω_+ , le périmètre en contact avec Ω_- . Toutefois, l'ajout de cette pénalisation a entraîné des problèmes de convergence de l'équation de Hamilton-Jacobi, ce qui ne nous a pas encore permis de réaliser une simulation complète avec cette méthode.

Pertinence de l'utilisation des pénalisations :

Pour conclure de la pertinence de ces pénalisations, il convient de comparer les différents résultats selon les contraintes adoptées :

Premièrement, sans pénalisation, on observe que la forme tant bien à évoluer de sorte à maximiser l'énergie (figure 14), mais le volume change beaucoup entre deux instants (figure 15).

Norme L^2 (énergie) de $u(\Omega)$ pour chaque itération de la boucle d'optimisatio

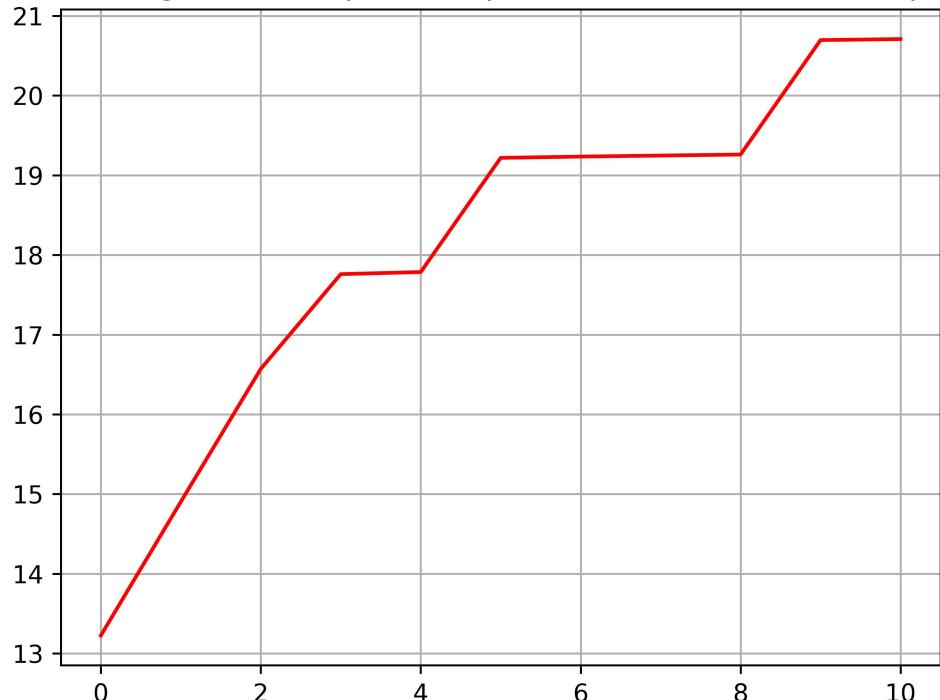


FIGURE 14 – Energie se maximisant au cours du temps

Deuxièmement, après avoir mis en place la pénalisation sur le volume, on voit que celle-ci est efficace sur le graphique 16, mais l'énergie n'est plus croissante à tout instant (graphique 17), bien qu'elle augmente entre les instants initial et final. On voit également l'apparition de trous et de problèmes de connexité dans Ω_+ (figure 18).

Enfin, en ajoutant les pénalisations pour les trous et la connexité, la forme évolue de manière satisfaisante physiquement au cours du temps, mais encore une fois l'énergie n'est plus croissante au cours du temps (graphique 19). La figure 20 montre l'évolution entre les formes initiale et finale. On remarque que la forme s'est déplacée non loin des bords du maillage, ce qui est dû à la boîte D choisie pour la méthode level-set, si on souhaite que Ω_+ reste au centre, il suffit de réduire la taille de la boîte D pour ne plus avoir ce problème.

5.3 Pénalisations

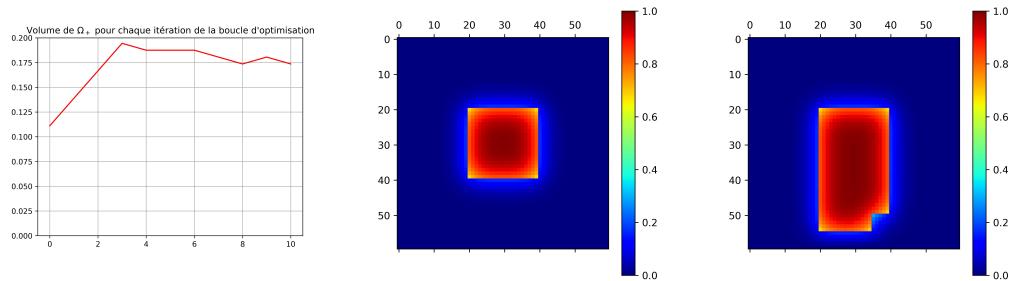


FIGURE 15 – Volume non constant au cours du temps

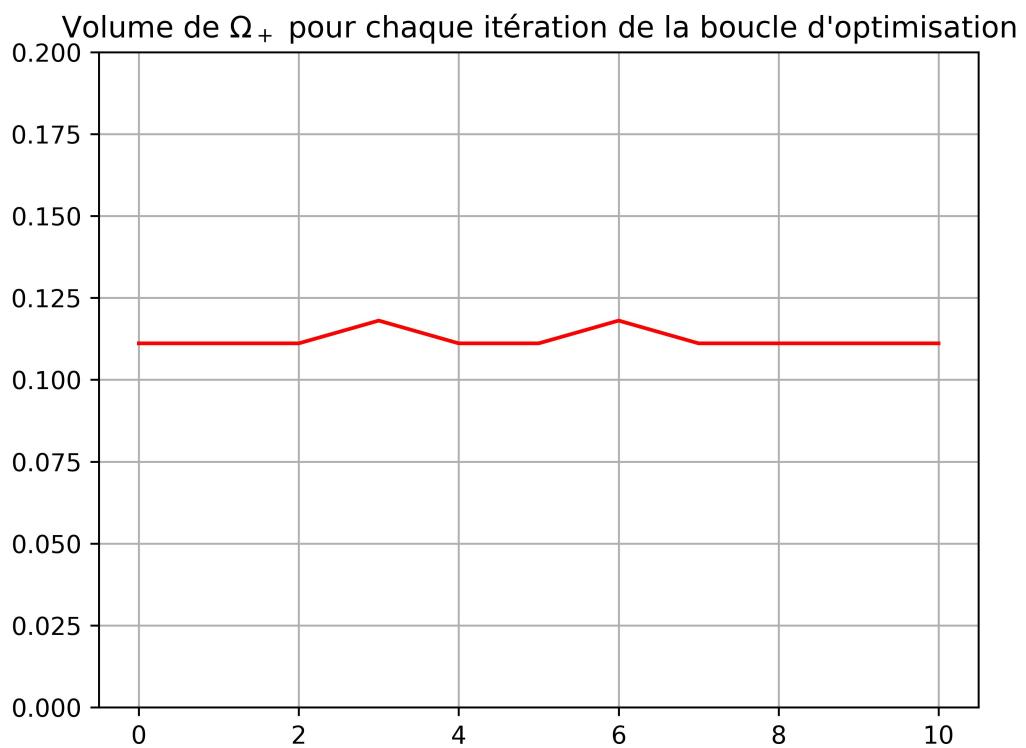


FIGURE 16 – Volume constant au cours du temps

5.3 Pénalisations

Norme L^2 (énergie) de $u(\Omega)$ pour chaque itération de la boucle d'optimisation

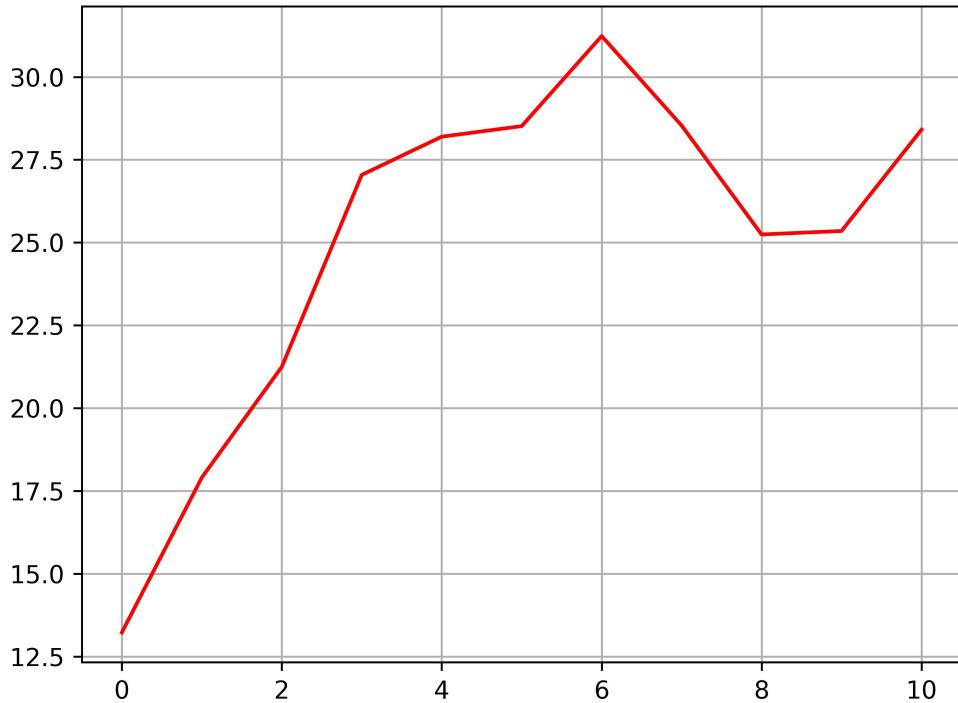


FIGURE 17 – L'énergie n'est plus croissante au cours du temps

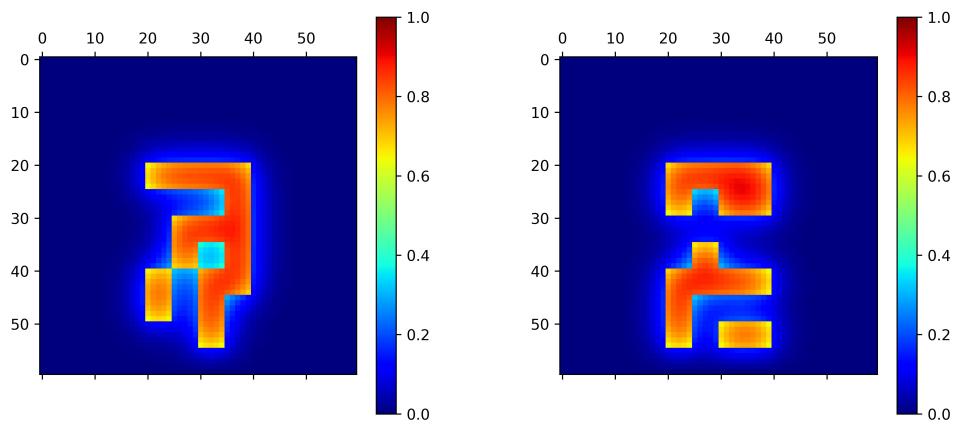


FIGURE 18 – Problèmes de trous et de connexité

Norme L^2 (énergie) de $u(\Omega)$ pour chaque itération de la boucle d'optimisation

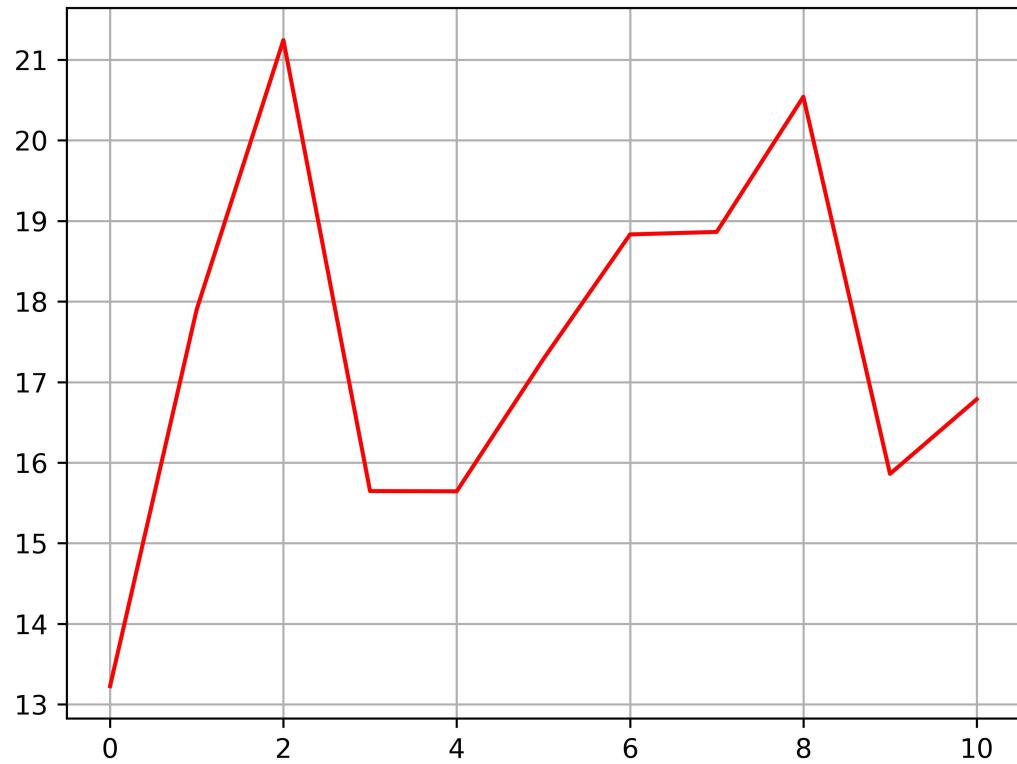


FIGURE 19 – Evolution de l'énergie en fonction du nombre d'itérations

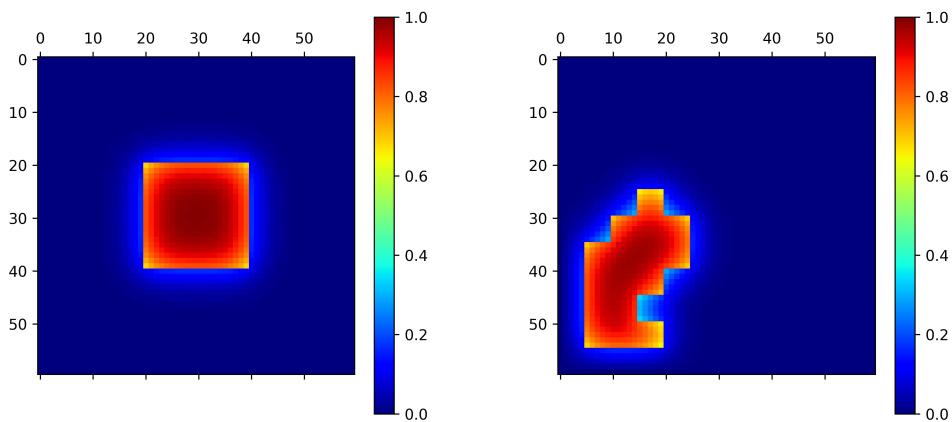


FIGURE 20 – Formes initiale et finale de Ω_+ avec pénalisations

6 Conclusion et perspectives

Grâce à la modélisation à l'aide des volumes finis, nous avons une simulation qui fonctionne quelque soit le maillage, il y a beaucoup de liberté sur le choix du maillage et cela permet ensuite de pouvoir explorer plus de forme pour l'optimisation.

En ce qui concerne la partie optimisation, nous avons d'abord réalisé un algorithme naïf pour avoir un premier résultat et voir comment la simulation se comportait quand on modifie certains éléments comme le maillage ou la forme du milieu chaud. Ensuite nous avons réalisé l'algorithme d'optimisation basé sur la méthode level-set, en trouvant l'expression de la dérivée par rapport au domaine Ω de la fonction énergie grâce à la méthode du Lagragien et en discréétisant l'équation de Hamilton-Jacobi par un schéma-upwind.

Pour les perspectives, Il conviendra alors dans un second temps d'adapter la méthode de level-set présenté ci-dessus pour être utilisée pour n'importe quel maillage.

RÉFÉRENCES

Références

- [1] Grégoire Allaire. Introduction À l'optimisation de formes. 2005.
- [2] Claude Bardos, Denis Grebenkov, and Anna Rozanova-Pierrat. Short-time heat diffusion in compact domains with discontinuous transmission boundary conditions. *Mathematical Models and Methods in Applied Sciences*, 26(01) :59–110, 2016.
- [3] Gabriel Claret and Anna Rozanova-Pierrat. Existence of optimal shapes for heat diffusions across irregular interfaces, 2023.
- [4] P.-G. de Gennes. Physique des surfaces et des interfaces. *Bulletin of mathematical biology*, 52(1-2) :153–197, 1982.
- [5] Frédéric Magoulès, Thi Phuong Kieu Nguyen, Pascal Omnes, and Anna Rozanova-Pierrat. Optimal absorption of acoustic waves by a boundary. *SIAM Journal on Control and Optimization*, 59, 01 2021.
- [6] A. Rozanova-Pierrat, D. S. Grebenkov, and B. Sapoval. Faster diffusion across an irregular boundary. *Phys. Rev. Lett.*, 108 :240602, Jun 2012.