Optimisation de la vitesse de diffusion

September 22, 2025

PIERRE Corentin, SANVOISIN Thibault, VUACHEUX Hugo

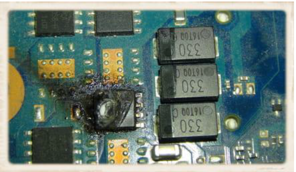
Sommaire

Sommaire

Introduction

Enjeux du projet : Optimisation de formes pour des applications industrielles

On vise un refroidissement au temps court plus rapide pour avoir de meilleurs dissipateurs thermiques, éviter la surchauffe et ainsi tendre vers une miniaturisation des composants tout en maintenant le niveau de performance



Sommaire

Les équations du problème

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

$$u_+|_{t=0} = 1, \qquad u_-|_{t=0} = 0 \tag{2}$$

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

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

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 $\Gamma_\infty = \{x \in \partial\Omega| \quad \lambda(x) = +\infty\}$.

La méthode des volumes finis

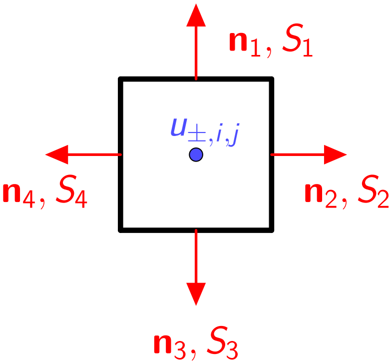
Dans toute la suite, on se place dans $\mathbb{R}^2$.
Utilisation d'un maillage carré, on pose pour chaque cellule du maillage

$$u_{\pm,i,j}(t) = \frac{1}{V}\int_C u_\pm(x,y,t)\mathrm{d}x\mathrm{d}y$$

En utilisant le théorème de Green-Ostrogradsky (1) s'écrit sous la forme d'une EDO

$$\partial_t u_{\pm,i,j} - \frac{1}{V}\int_{\partial C} D_\pm \frac{\partial u_\pm}{\partial n}\mathrm{d}S = 0 \qquad (5)$$

Cas d'une case sans condition



Formule finale

En développant la dérivée normale et après approximation à l'ordre 1

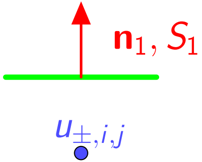
$$\partial_t u_{\pm,i,j}(t) = \frac{D_\pm}{\Delta x \Delta y}\left(\Delta x(\partial_y u_{\pm,i,j+\frac{1}{2}}(t) - \partial_y u_{\pm,i,j-\frac{1}{2}}(t)) + \Delta y(\partial_x u_{\pm,i+\frac{1}{2},j}(t) - \partial_x u_{\pm,i-\frac{1}{2},j}(t))\right) \quad (6)$$

En utilisant des schémas centrées d'ordre 2 de pas $h = \Delta_{x,y}/2$ on trouve finalement

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

Cas d'une case possédant une condition au bord

$$D_-\partial_n u_- = \lambda(x)(u_- - u_+)$$
$$D_-\partial_n u_- = D_+\partial_n u_+$$



On obtient

$$\partial_t u_{\pm,i,j}(t) = \frac{1}{4\Delta y}(\lambda_{i,j+1} + \lambda_{i,j})(u_{i,j+1} - u_{i,j}) - \frac{D_\pm}{\Delta y^2}(u_{\pm,i,j} - u_{\pm,i,j-1}) + \frac{D_\pm}{\Delta x^2}(u_{\pm,i+1,j} - u_{\pm,i,j}) - \frac{D_\pm}{\Delta x^2}(u_{\pm,i,j} - u_{\pm,i-1,j})$$

Schéma de Crank-Nicolson

- Schéma de Crank-Nicolson

$$u_{i,j}^{n+1} = u_{i,j}^{n} + \frac{\Delta t}{2}\left(f(u^{n+1}, t^{n+1}) + f(u^n, t^n)\right)$$

- Stable quelque soit le pas de temps.

On va séparer la fonction f pour chacune des arêtes d'une cellule rectangulaire

$$f(u^n, i, j) = f_1(u^n, i, j) + f_2(u^n, i, j) + f_3(u^n, i, j) + f_4(u^n, i, j)$$

Par exemple pour f_1 on a

$$f_1(u^n, i, j) = \begin{cases} -\dfrac{D}{\Delta y^2}([u^n]_{i,j} - [u^n]_{i,j-1}) \text{ si pas de cb sur } S_1 \\ -\dfrac{1}{4\Delta y}(\lambda_{i,j-1} + \lambda_{i,j})([u^n]_{i,j} - [u^n]_{i,j-1}) \text{ sinon} \end{cases}$$

Passage Matrice $\rightarrow$ Vecteur

On transforme la matrice des températures de dimension $N \times N$ en un vecteur colonne de taille N^2. Posons $U^n \in \mathbb{R}^{N^2}$ tel que

$$[U^n]_k = [u^n]_{k \bmod N, \lfloor k/N \rfloor}$$

ou dans l'autre sens

$$[u^n]_{i,j} = [U^n]_{i+jN}$$

La fonction f_1 s'écrit alors

$$f_1(U^n, k) = \begin{cases} -\dfrac{D}{\Delta y^2}(U_k^n - U_{k-N}^n) \text{ si pas de cb sur } S_1 \\ \dfrac{1}{4\Delta y}(\lambda_{k \bmod N, \lfloor k/N \rfloor - 1} + \lambda_{k \bmod N, \lfloor k/N \rfloor})(U_k^n - U_{k-N}^n) \text{ sinon} \end{cases} \tag{7}$$

Pour simplifier, notons $\Lambda_k^1 = \lambda_{k \bmod N, \lfloor k/N \rfloor - 1} + \lambda_{k \bmod N, \lfloor k/N \rfloor}$.

Écriture de $f(U^n, k)$ sous la forme d'un produit matrice-vecteur

Formule du produit matrice-vecteur $A_1 U^n$

$$[A_1 U^n]_k = \sum_{l=1}^{N^2} [A_1]_{k,l} [U^n]_l$$

On identifie alors

$$[A_1]_{k,k} = \begin{cases} \frac{D}{\Delta y^2} & \text{si pas de cb} \\ \frac{\Lambda_k^1}{4\Delta y} & \text{sinon} \end{cases} \quad , \quad [A_1]_{k,k-N} = \begin{cases} -\frac{D}{\Delta y^2} & \text{si pas de cb} \\ -\frac{\Lambda_k^1}{4\Delta y} & \text{sinon} \end{cases}$$

Matrices associées aux f_i, $i \in \{1, 2, 3, 4\}$

On a donc pour les matrices représentatives de f_1, f_2, f_3 et f_4

$$[A_1]_{k,k-N} = \begin{cases} \frac{D}{\Delta y^2} & \text{si pas de cb} \\ \frac{\Lambda_k^1}{4\Delta y} & \text{sinon} \end{cases} , \quad [A_1]_{k,k} = \begin{cases} -\frac{D}{\Delta y^2} & \text{si pas de cb} \\ -\frac{\Lambda_k^1}{4\Delta y} & \text{sinon} \end{cases} \tag{8}$$

$$[A_2]_{k,k+1} = \begin{cases} \frac{D}{\Delta x^2} & \text{si pas de cb} \\ \frac{\Lambda_k^2}{4\Delta x} & \text{sinon} \end{cases} , \quad [A_2]_{k,k} = \begin{cases} -\frac{D}{\Delta x^2} & \text{si pas de cb} \\ -\frac{\Lambda_k^2}{4\Delta x} & \text{sinon} \end{cases} \tag{9}$$

$$[A_3]_{k,k+N} = \begin{cases} \frac{D}{\Delta y^2} & \text{si pas de cb} \\ \frac{\Lambda_k^3}{4\Delta y} & \text{sinon} \end{cases} , \quad [A_3]_{k,k} = \begin{cases} -\frac{D}{\Delta y^2} & \text{si pas de cb} \\ -\frac{\Lambda_k^3}{4\Delta y} & \text{sinon} \end{cases} \tag{10}$$

$$[A_4]_{k,k-1} = \begin{cases} \frac{D}{\Delta x^2} & \text{si pas de cb} \\ \frac{\Lambda_k^4}{4\Delta x} & \text{sinon} \end{cases} , \quad [A_4]_{k,k} = \begin{cases} -\frac{D}{\Delta x^2} & \text{si pas de cb} \\ -\frac{\Lambda_k^4}{4\Delta x} & \text{sinon} \end{cases} \tag{11}$$

Équation de récurrence sur U_k^n

On pose alors $A = A_1 + A_2 + A_3 + A_4$ et on a

$$U_k^{n+1} = U_k^n + \frac{\Delta t}{2}(AU_k^{n+1} + AU_k^n) \tag{12}$$

que l'on peut réécrire

$$U_k^{n+1} = \left(I - \frac{\Delta t}{2}A\right)^{-1}\left(I + \frac{\Delta t}{2}A\right)U_k^n \tag{13}$$

S'il y a un terme source

$$U_k^{n+1} = \left(I - \frac{\Delta t}{2}A\right)^{-1}\left(\left(I + \frac{\Delta t}{2}A\right)U_k^n + \frac{\Delta t}{2}S_k^n\right) \tag{14}$$

Convergence de la simulation numérique

On choisit une solution analytique de (1) de la forme

$$u(t,x,y) = e^{-t}\sin(\pi x/N\Delta x)\sin(\pi y/N\Delta y)$$

ce qui génère un terme source

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

Il suffit ensuite d'initialiser la simulation numérique avec $u(0,x,y) = f(0,x,y)$ et de tester sur différentes tailles de maillage.

Courbe de convergence

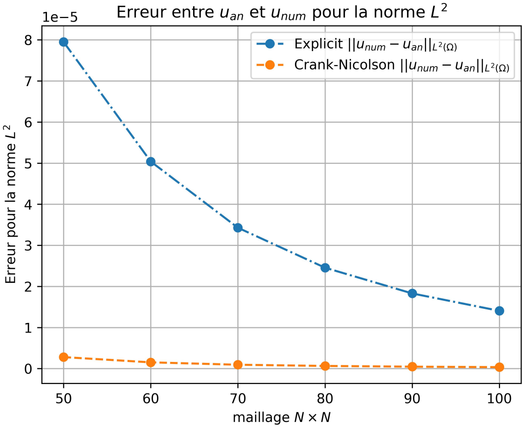


Figure: Comparaison en norme L^2 de l'erreur $\|u_{an} - u_{num}\|_{L^2}$ lorsque $\lambda = +\infty$ pour les schémas de Crank-Nicolson et d'Euler explicite avec différentes tailles de maillages

Sommaire

Le problème d'optimisation

On pose la fonction d'énergie

$$j_t(\Omega) = \int_{\Omega_+} |u_+|^2 + \int_{\Omega_-} |u_-|^2$$

On veut résoudre le problème suivant

$$\Omega^{opt} = \underset{\substack{\Omega \subset \mathbb{R}^2 \text{ connexe} \\ \mathrm{Vol}(\Omega) = \mathrm{Vol}(\Omega_0)}}{\operatorname{argmax}} \int_0^T j_t(\Omega) \mathrm{d}t$$

$\rightarrow$ Dérivation de la fonction d'énergie.

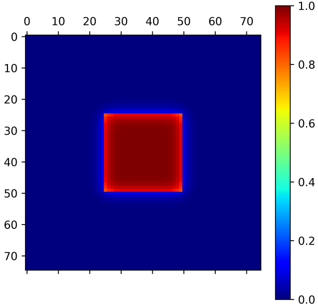


Figure: La forme Ω_0

Le lagrangien

On va utiliser la méthode du Lagrangien, on pose

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

et

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

avec

$$\begin{aligned} FV(w_\pm, q_\pm) = \quad & \int_{\Omega_+} \partial_t w_+ q_+ + \int_{\Omega_-} \partial_t w_- q_- + \\ & \int_{\Omega_+} D_+ \nabla w_+ \cdot \nabla q_+ + \int_{\Omega_-} D_- \nabla u_- \cdot \nabla q_- \\ & + \int_{\partial\Omega_+ \setminus \Gamma_\infty} \lambda(x)(u_- - u_+) Tr(q_- - q_+) d\mu \end{aligned}$$

On va dériver cette quantité par rapport à Ω.

La formulation variationnelle problème adjoint

Tout d'abord, il faut dériver par rapport à $w_\pm$ pour trouver le problème adjoint

$$\left\langle \frac{\partial \mathcal{L}_t}{\partial w_+}, \phi_+ \right\rangle = \int_{\Omega_+} w_+\phi_+ + D_+ \int_{\Omega_+} \nabla q_+ \nabla \phi_+ + \int_{\Omega_+} (\partial_t q_+)\phi_+ + \int_{\partial\Omega\backslash\Gamma_\infty} \lambda(x)\left[q_+ - q_-\right]\phi_+ \mathrm{d}\mu$$

$$\left\langle \frac{\partial \mathcal{L}_t}{\partial w_-}, \phi_- \right\rangle = \int_{\Omega_-} w_-\phi_- + D_- \int_{\Omega_-} \nabla q_- \nabla \phi_- + \int_{\Omega_-} (\partial_t q_-)\phi_- + \int_{\partial\Omega\backslash\Gamma_\infty} \lambda(x)\left[q_- - q_+\right]\phi_- \mathrm{d}\mu$$

En mettant ces deux termes à zéro, on obtient la formulation variationnelle du problème adjoint.

Le problème adjoint

Grâce à la formulation variationnelle, on peut remonter au problème au sens fort

$$\begin{cases} D\Delta p - \partial_t p = 2u \\ D_+ \frac{\partial p_+}{\partial n}|_{\partial\Omega} = D_- \frac{\partial p_-}{\partial n}|_{\partial\Omega} \\ D_- \frac{\partial p_-}{\partial n}|_{\partial\Omega} = \lambda(x)(p_- - p_+) \\ p_-|_{t=0} = 0, \quad p_+|_{t=0} = 1 \end{cases} \tag{15}$$

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

Dérivée de la fonction d'énergie

On obtient une dérivée de la forme

$$\frac{\partial \mathcal{L}(u_\pm, p_\pm)}{\partial \Omega} = J'_T(\Omega)(\theta) = \int_{\partial\Omega \setminus \Gamma_\infty} \mathcal{V} \langle \theta, n \rangle \, \mathrm{d}s$$

avec

$$\mathcal{V} = \int_0^T \left[|u_+|^2 - |u_-|^2 + \partial_t u_+ p_+ - \partial_t u_- p_- + D_+ \nabla u_+ \nabla p_+ - D_- \nabla u_- \nabla p_- \right] \mathrm{d}t$$
$$+ \int_0^T \left[\partial_n \left(\lambda(x)(u_- - u_+) \mathrm{Tr}(p_- - p_+) \right) + H \left(\lambda(x)(u_- - u_+) \mathrm{Tr}(p_- - p_+) \right) \right] \mathrm{d}t$$

Principe de la méthode level-set

$$\psi : (x,t) \mapsto \begin{cases} \psi(x,t) > 0, \text{ si } x \in D \setminus \Omega_+ \\ \psi(x,t) = 0, \text{ si } x \in D \cap \partial\Omega \\ \psi(x,t) < 0, \text{ si } x \in \Omega_+ \end{cases} \tag{16}$$

L'équation à résoudre pour obtenir la nouvelle forme

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} - \mathcal{V} \left\| \nabla_x \psi \right\|_2 = 0 \tag{17}$$

1. Résolution du problème (1) associé à $u_\pm(\Omega_k)$
2. Résolution du problème adjoint (15) pour avoir $p_\pm(\Omega_k)$
3. $\psi(x,0) = \pm \mathrm{dist}(x, \partial\Omega_k)$
4. Résolution de (17) jusqu'à stationnarité.
5. $\Omega_{k+1} = \psi^{-1}(]-\infty, 0])$

Schéma de discrétisation

Schéma "upwind"

$$\frac{\psi_{i,j}^{n+1} - \psi_{i,j}^{n}}{\Delta t} + \left[\max(\mathcal{V}_{i,j}, 0)\nabla^{+} + \min(\mathcal{V}_{i,j}, 0)\nabla^{-}\right] = 0 \quad (18)$$

avec

$$\nabla^{+} = \left[\max\left(D_{ij}^{-x}, 0\right)^2 + \min\left(D_{ij}^{+x}, 0\right)^2 + \max\left(D_{ij}^{-y}, 0\right)^2 + \min\left(D_{ij}^{+y}, 0\right)^2\right]^{1/2},$$

$$\nabla^{-} = \left[\max\left(D_{ij}^{+x}, 0\right)^2 + \min\left(D_{ij}^{-x}, 0\right)^2 + \max\left(D_{ij}^{+y}, 0\right)^2 + \min\left(D_{ij}^{-y}, 0\right)^2\right]^{1/2},$$

$$D_{ij}^{-x} = \frac{\psi^n(i,j) - \psi^n(i-1,j)}{\Delta x}, \quad D_{ij}^{+x} = \frac{\psi^n(i+1,j) - \psi^n(i,j)}{\Delta x},$$

$$D_{ij}^{-y} = \frac{\psi^n(i,j) - \psi^n(i,j-1)}{\Delta y}, \quad D_{ij}^{+y} = \frac{\psi^n(i,j+1) - \psi^n(i,j)}{\Delta y},$$

Ajout de pénalisations

Aucune pénalisation $\implies$ Aucun contrôle sur des propriétés comme la connexité, le volume ou les trous.

- Pénalisation en volume : $\kappa(\mathrm{Vol}(\Omega) - \mathrm{Vol}(\Omega_0))^2$
- Pénalisation pour les trous et pour la connexité : algorithme de parcours en profondeur du maillage puis pénalisation en $\Gamma\,|N_{\mathrm{trou}}|$ et $\Lambda\,|N_{\mathrm{cc}} - 1|$

Effets secondaires

- Temps de calcul plus lent
- Maximum d'énergie plus difficile à atteindre

Nouvel algorithme pour le calcul des pénalisations

- L'approche précédente utilisait la méthode DFS (Depth First Search) pour étiqueter les composantes connexes.
- Nouvelle méthode : Two-Pass Connected Component Labeling avec Union-Find.
- Méthode standard dans la littérature. Exécution en temps linéaire $O(n)$. Minimise l'allocation de mémoire dynamique et optimise l'utilisation du cache.
- Implémentation à intégrer dans l'algorithme d'optimisation

Aucune pénalisation

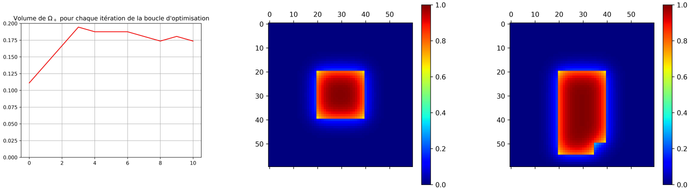


Figure: Volume non constant au cours du temps

Évolution de l'énergie

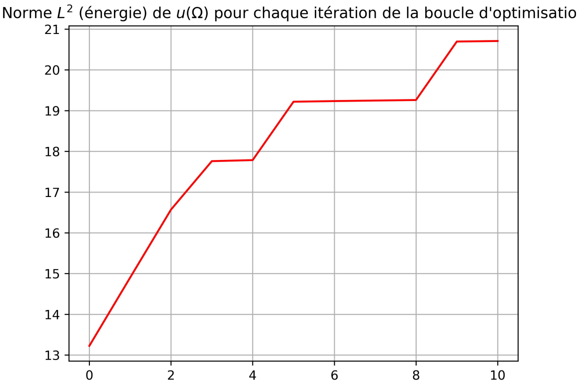


Figure: Énergie se maximisant au cours des itérations

Si on applique une pénalisation sur le volume

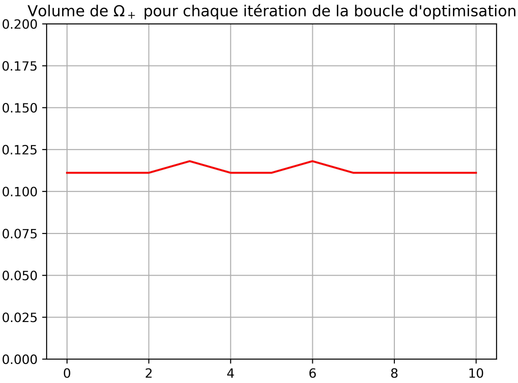


Figure: Volume constant au cours des itérations

Si on applique une pénalisation sur le volume

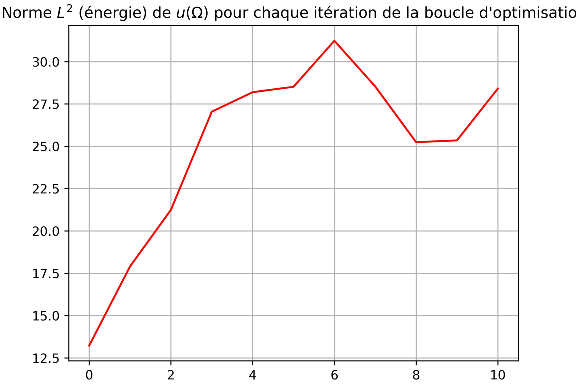


Figure: L'énergie n'est plus croissante au cours du temps

Si on applique une pénalisation sur le volume

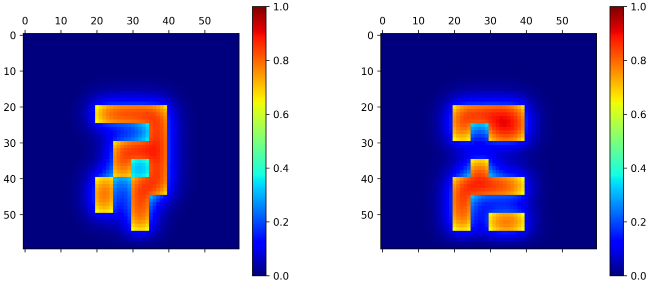


Figure: Problèmes de trous et de connexité

Si on applique une pénalisation partout

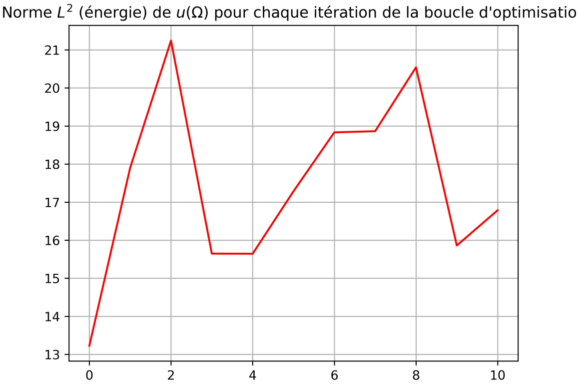


Figure: L'énergie n'est plus croissante au cours du temps

Si on applique toutes les pénalisations

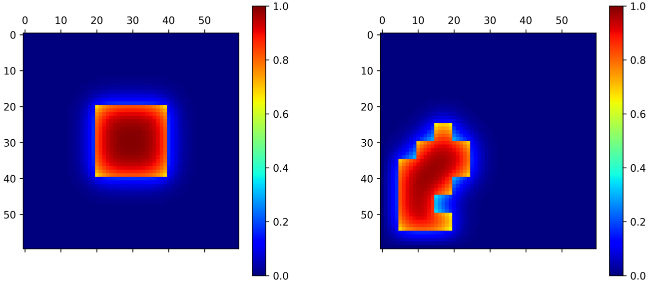
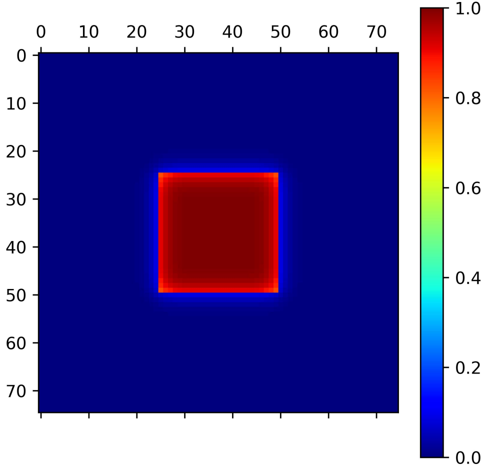


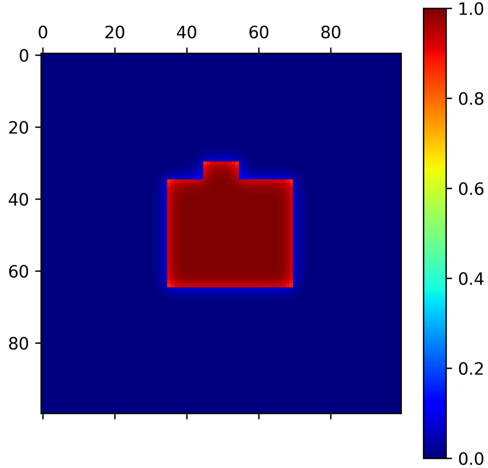
Figure: Formes initiale et finale de Ω_+ avec pénalisations

Sommaire

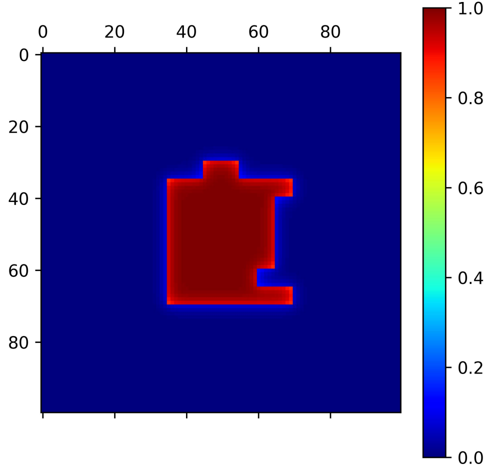
Itération 0



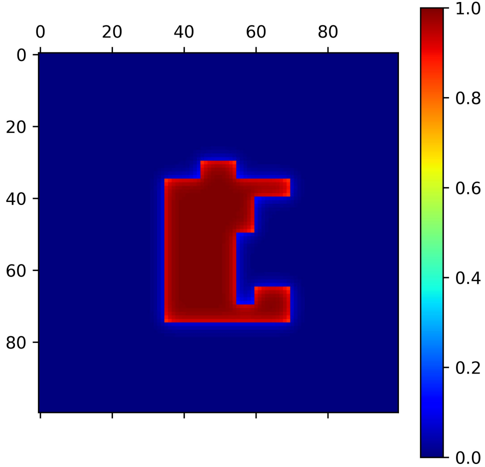
Itération 1



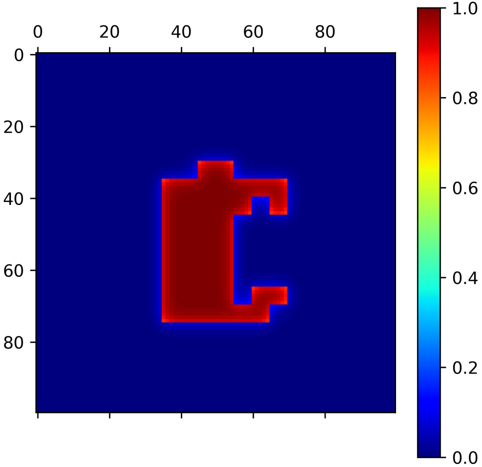
Itération 2



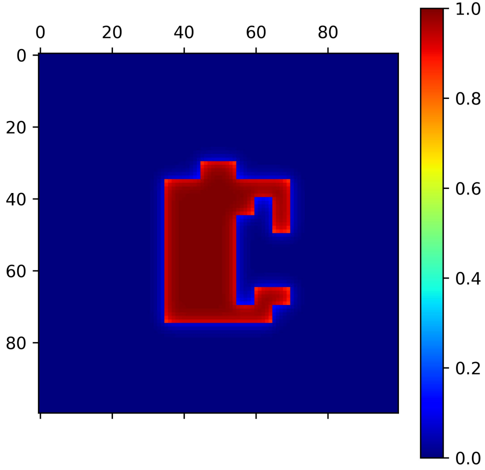
Itération 3



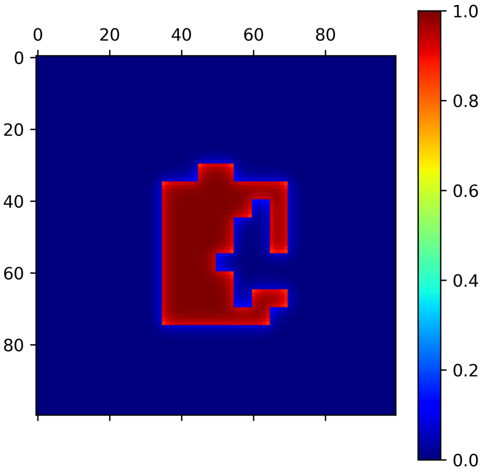
Itération 4



Itération 5

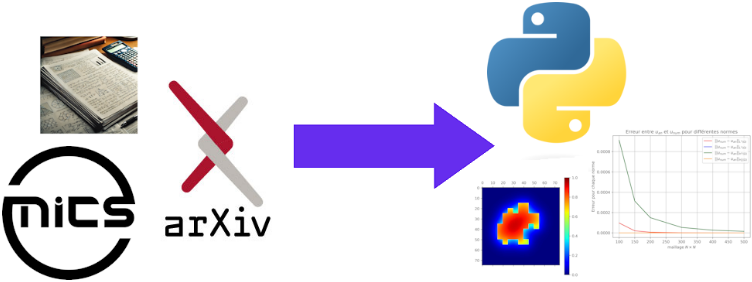


Itération 6



Sommaire

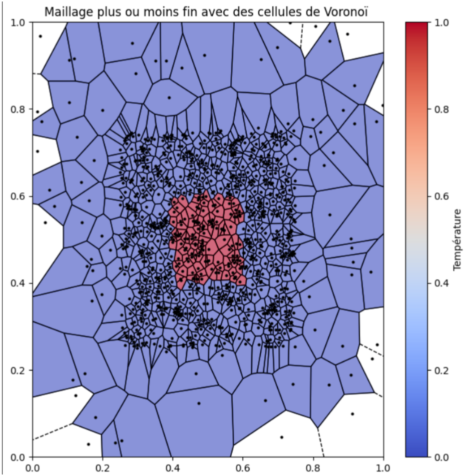
Conclusion et perspectives



- Finir l'implémentation et l'intégration des calculs de pénalisations améliorées.
- Finir la construction d'une solution analytique dans le cas $\lambda < +\infty$ permettant de vérifier la convergence de la simulation numérique.
- Création d'un maillage moins structuré pour pouvoir réduire le nombre de mailles aux endroits moins intéressants.

Sommaire

Annexe 1


Maillage plus ou moins fin avec des cellules de Voronoï
1.0
0.8
0.6
0.4
0.2
0.0
0.0
0.2
0.4
0.6
0.8
1.0
Température

Annexe 2 : Simulation sur un maillage 750x750