

# **Comparaison des erreurs de discrétisations numériques de différentes formulations des dérivées de forme de fonctionnelles dépendant du gradient**

DEVICTOR Timothée, CEA.DES.IRESNE.DEC, Cadarache F 13108 St Paul Lez Durance

JOSIEN Marc, CEA.DES.IRESNE.DEC, Cadarache F 13108 St Paul Lez Durance

PANTZ Olivier, UNICE, LJAD-Nice

05/06/2025

# Plan de la présentation

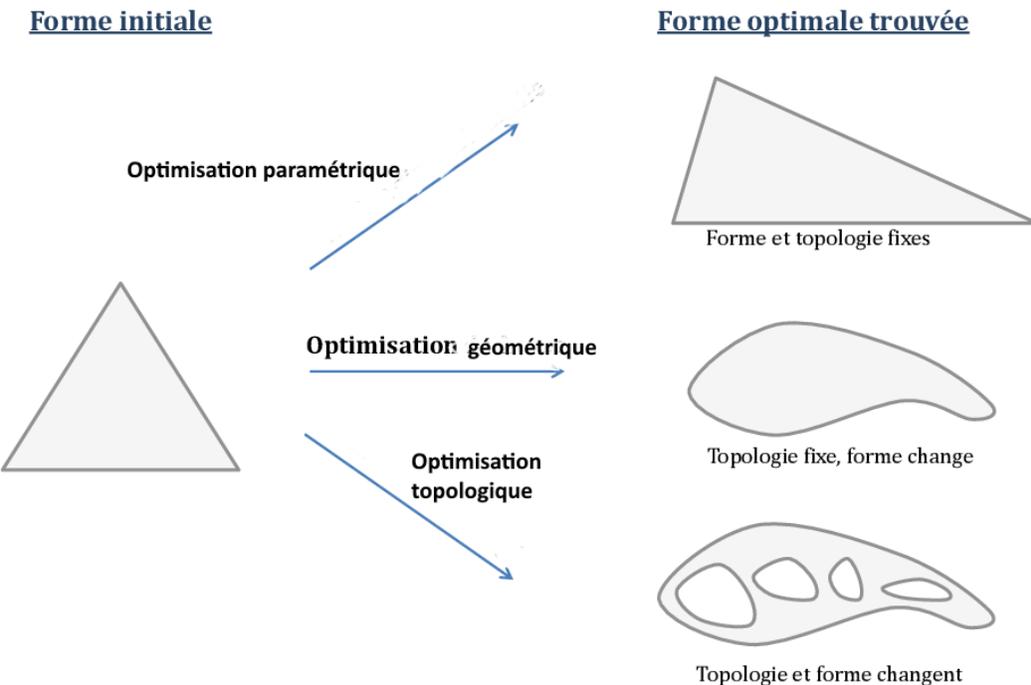
- 1. Qu'est-ce que l'optimisation de forme ?**
- 2. Présentation des dérivées de forme**
- 3. Expérimentations numériques**



# Introduction

- Recherche de matériaux composites et composants plus performants → **Optimisation de forme**
- Besoin de **dérivées de forme** : **différentes formulations** possibles mais **erreurs de discrétisations variées**
- Etude des **erreurs de discrétisations de** fonctionnelles de forme dépendant du gradient de la solution primale  $\nabla_{\Omega} J(\nabla u_{\Omega})$  (problèmes de flux, contraintes mécaniques ...)
- Développement d'une **nouvelle formulation** de la dérivée de forme surfacique basée sur les **méthodes de décomposition Mortar**
- Par expérimentation numérique : les **dérivées volumique et Mortar** sont suffisamment **robustes** pour résoudre  $\min_{\Omega} J(\nabla u_{\Omega})$  en optimisation structurelle

# Qu'est-ce que l'optimisation de forme ?



L'optimisation de forme est un ensemble de méthodes permettant de trouver la meilleure « forme » à donner à un objet pour qu'elle puisse remplir ses fonctions. [Allaire 2007]

On y distingue 3 classes : l'optimisation paramétrique, l'optimisation géométrique et l'optimisation topologique.

Certaines de ces méthodes utilisent des **dérivées de forme** :

- la méthode de variations de frontières en optimisation géométrique
- les méthodes des lignes de niveaux en optimisation topologique

Fig. 1 : Illustration des différentes classes d'optimisation de forme

# Définition de la dérivée de forme

- On souhaite minimiser  $J(\Omega)$ .

- Soit la transformation suivante :

$$\Omega^{(n+1)} = \phi^{(n)}(\Omega^{(n)}) = (\text{Id} + \theta^{(n)})(\Omega^{(n)}).$$

- On définit la **dérivée de forme** de  $J$  en  $\Omega$  selon :

$$\langle \nabla_{\Omega} J(\Omega), \theta \rangle = \lim_{\delta t \rightarrow 0} \frac{J(\Omega + \delta t \theta(\Omega)) - J(\Omega)}{\delta t}.$$

- Selon le théorème d'Hadamard-Zolésio, celle-ci peut s'exprimer avec une **formulation surfacique** :

$$\langle \nabla_{\Omega} J(\Omega), \theta \rangle = \int_{\partial\Omega} g(\theta \cdot n) dS.$$

- On peut intégrer par partie la formule précédente pour obtenir une **formulation volumique** :

$$\langle \nabla_{\Omega} J, \theta \rangle = \int_{\Omega} f(\theta) dx.$$

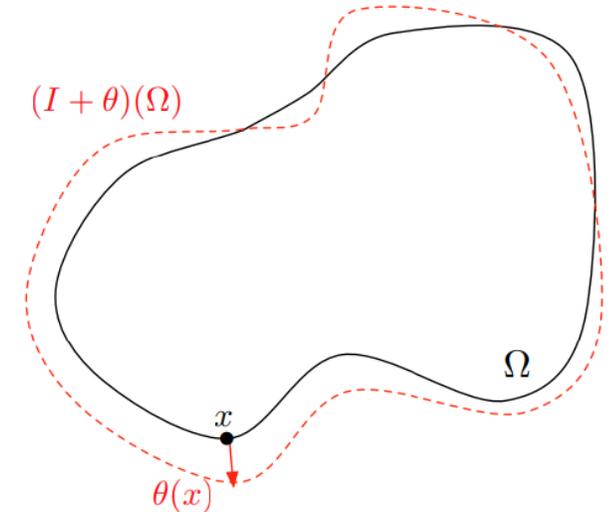


Fig. 2 : Exemple de la variation d'un domaine  $\Omega$  par une fonction de déformation  $\theta$  [Dapogny 2013]

# Dérivées de forme volumique et surfaciques

- Les **formules théoriques** des dérivées volumique et surfaciques sont **équivalentes mais leurs discrétisations ne le sont pas** [Hiptmair et al. 2014]

Dérivée volumique		Dérivées surfaciques	
Avantages	Désavantages	Avantages	Désavantages
<ul style="list-style-type: none"><li><b>Robuste</b> [Hiptmair et al. 2014]</li></ul>	<ul style="list-style-type: none"><li><b>Expression ardue</b></li><li>S'exprime sur l'ensemble du <b>volume</b></li></ul>	<ul style="list-style-type: none"><li><b>Expression simple</b> à obtenir</li><li>S'exprime uniquement sur les <b>interfaces</b></li></ul>	<ul style="list-style-type: none"><li>En général, faibles propriétés de convergence [Klein et al. 2022]</li></ul>

- Plusieurs formulations et discrétisations possibles pour la formulation surfacique (cf. [Gong et al. 2021])
- Trouver des **formulations surfaciques plus robustes** ?

# Dérivées de forme par les méthodes Mortar

- Les méthodes Mortar sont des méthodes de décomposition de maillage dans lesquelles la **continuité** de la solution des EDPs est assurée **au bord et aux interfaces** est assurée par l'introduction de multiplicateurs de Lagrange.

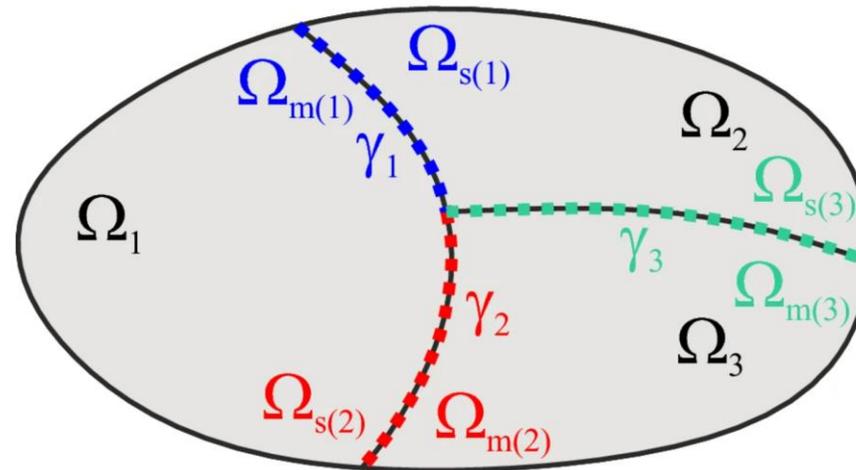


Fig. 3 : Illustration de la décomposition Mortar [Dornisch et al. 2021]

- Quel intérêt ?
  - Au niveau des interfaces/bord : **problème de régularité du gradient** → faibles propriétés de convergence de la dérivée surfacique « classique » [Gong et al. 2021]
  - Introduction de multiplicateurs de Lagrange → **dérivée surfacique plus robuste**

# Travaux antérieurs

- R. Hiptmair, A. Paganini, et S. Sargheini : étude de **l'erreur de discrétisation en norme  $H^1(\Omega)$**  de  $\nabla_{\Omega} J(\mathbf{u}_{\Omega})$  où  $u_{\Omega}$  solution d'une EDP elliptique linéaire dans  $\Omega$  [Hiptmair et al. 2014]
  - Dérivée de forme volumique : erreur en  **$O(h^2)$** ,  $h$  plus grand diamètre des éléments
  - Dérivée surfacique :  **$O(h)$**  pour Dirichlet et  $O(h^2)$  pour Neumann

- Exemples d'application :

- Compliance (élasticité linéaire) 
- Température (thermique) [Allaire 2007, p. 195-199]
- Mécanique des fluides [Dapogny et al. 2018]
- Etc.

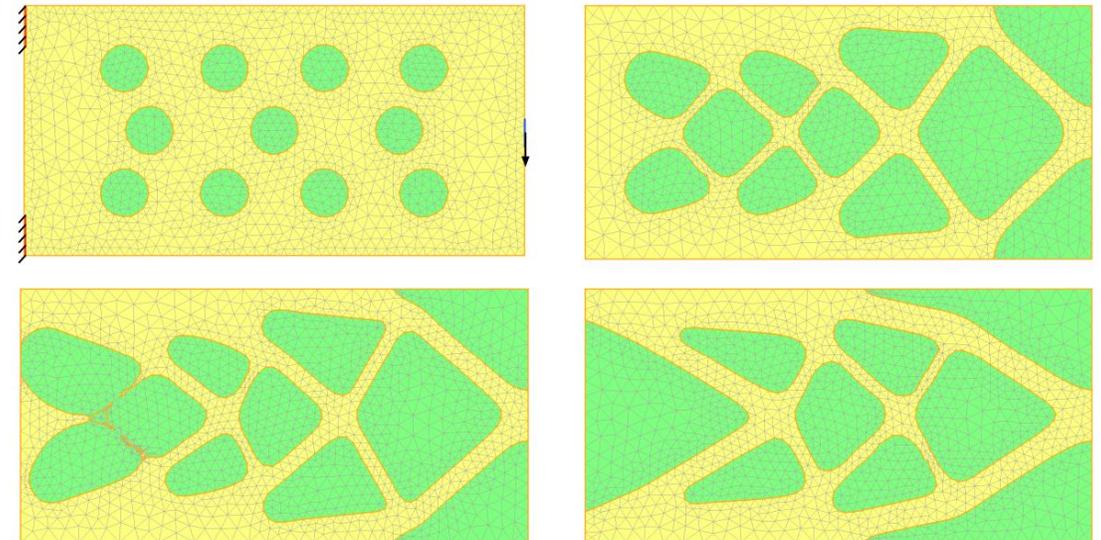
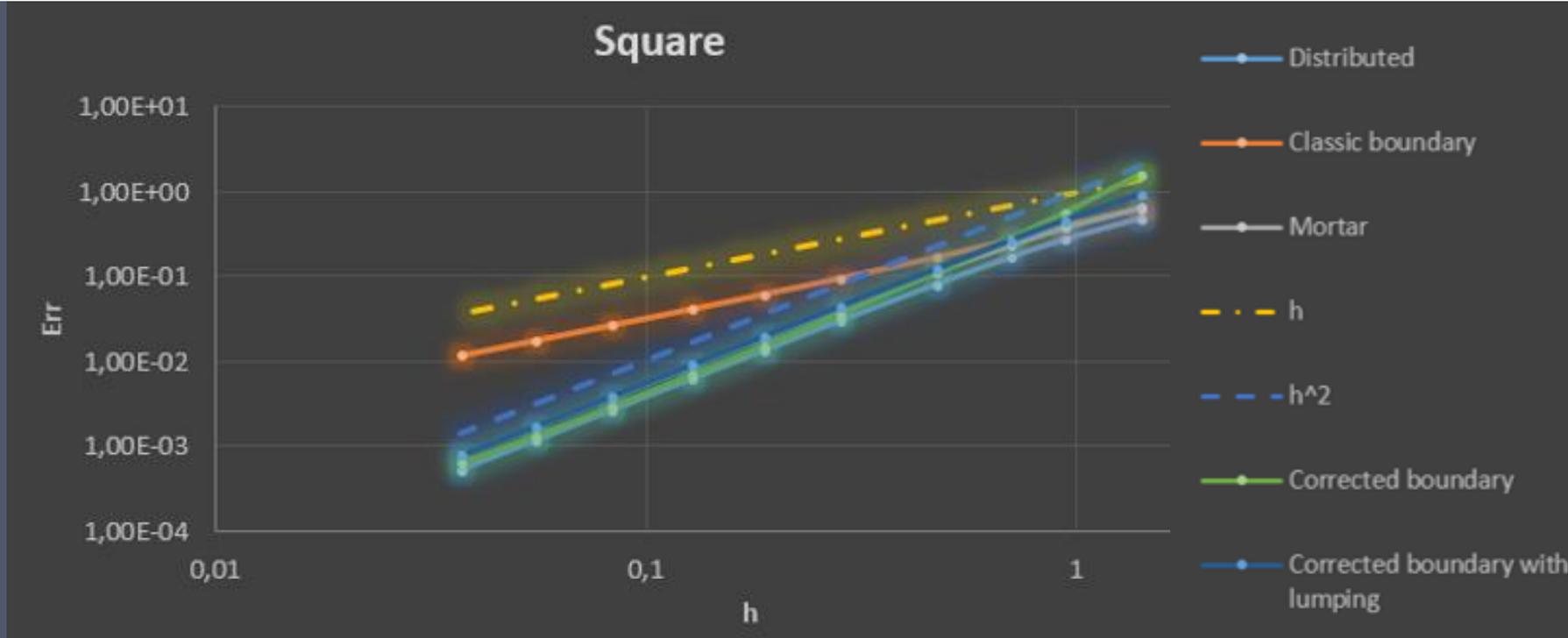
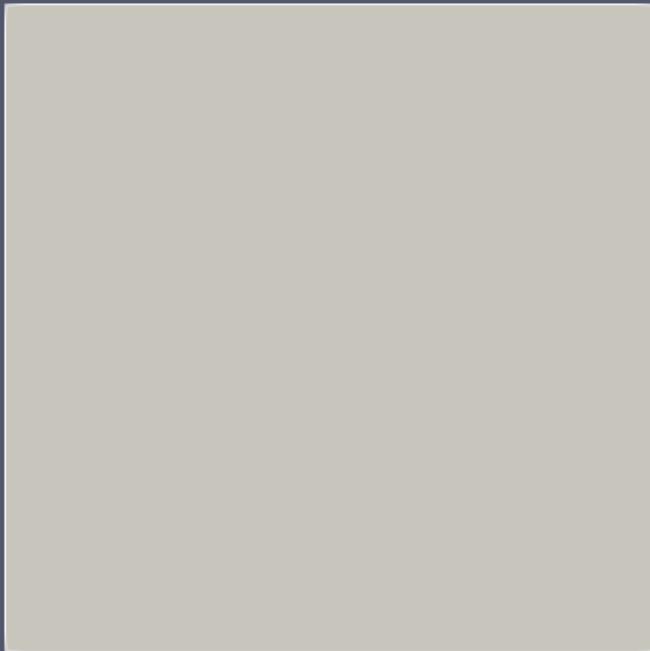


Fig. 4 : Evolution des formes d'une console en minimisant la compliance par la méthode des lignes de niveaux (jaune : matière, vert : vide) [Dapogny 2013]

- On étend ces travaux au cas  $J(\nabla \mathbf{u}_{\Omega})$  (utile pour les problèmes de **minimisation de flux** ou de **contraintes mécaniques**)

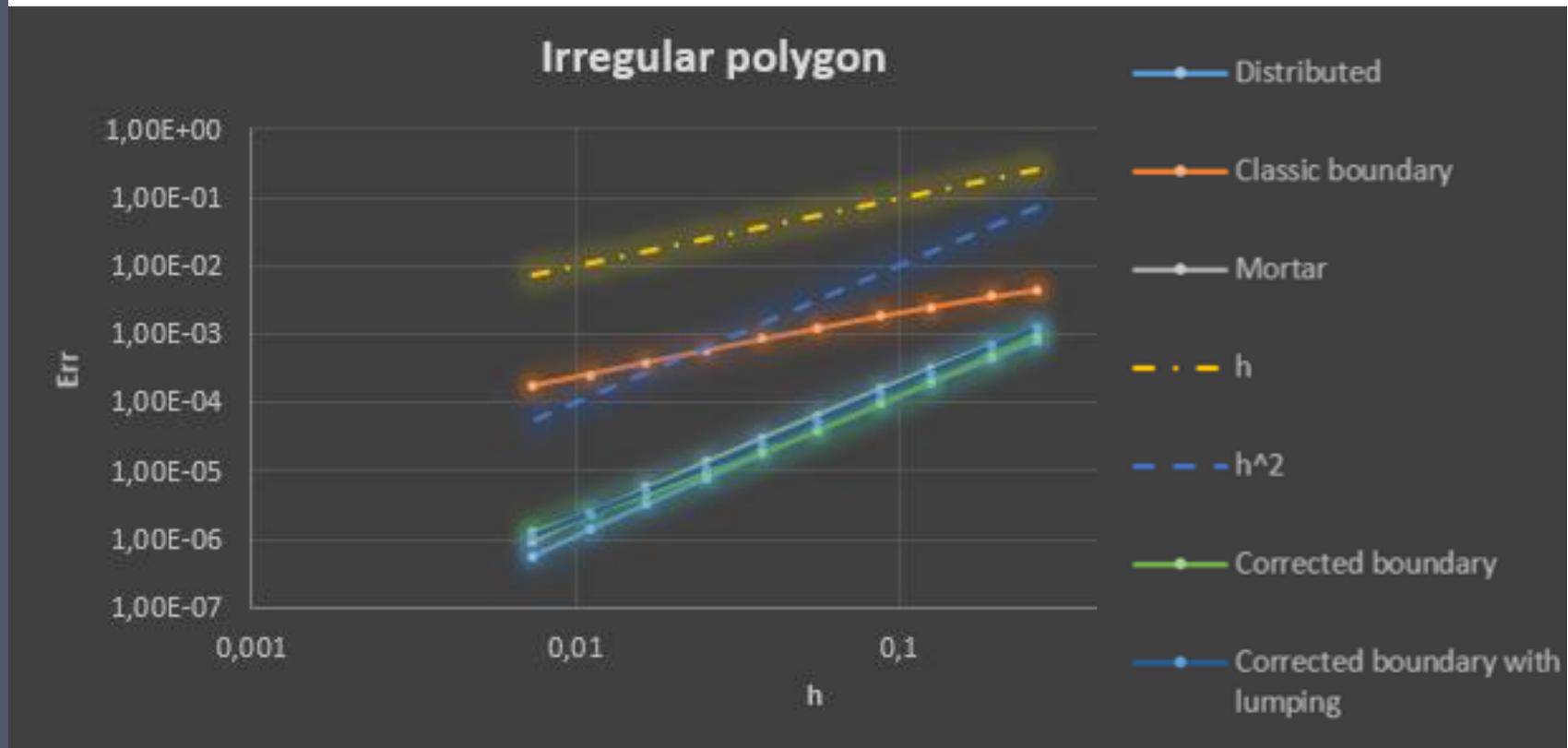
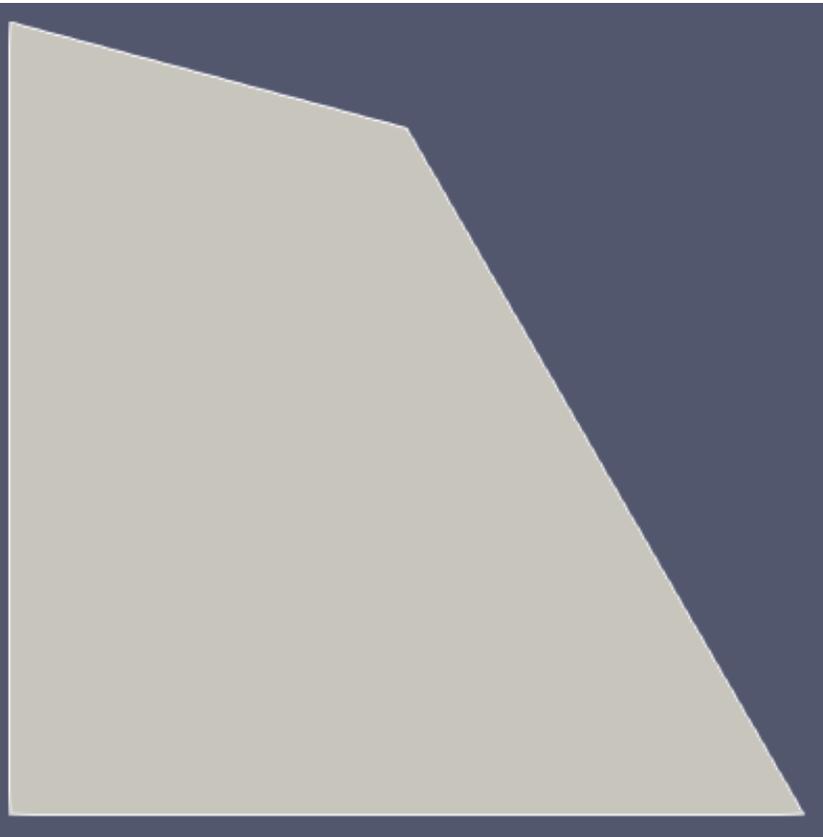
# Comparaison numérique de différentes formulations des dérivées de forme : cas régulier

- Pour les **dérivées volumique et Mortar**, sous conditions de régularité du domaine, **on a montré** que leurs **convergences** étaient en  $O(h^2)$ .
- Soit  $u_\Omega$  unique solution de «  $-\Delta u + u = f$  » avec conditions de Dirichlet.
  - Pour  $J(\Omega) = \int_\Omega \partial_{x_1} u_\Omega dx$  :



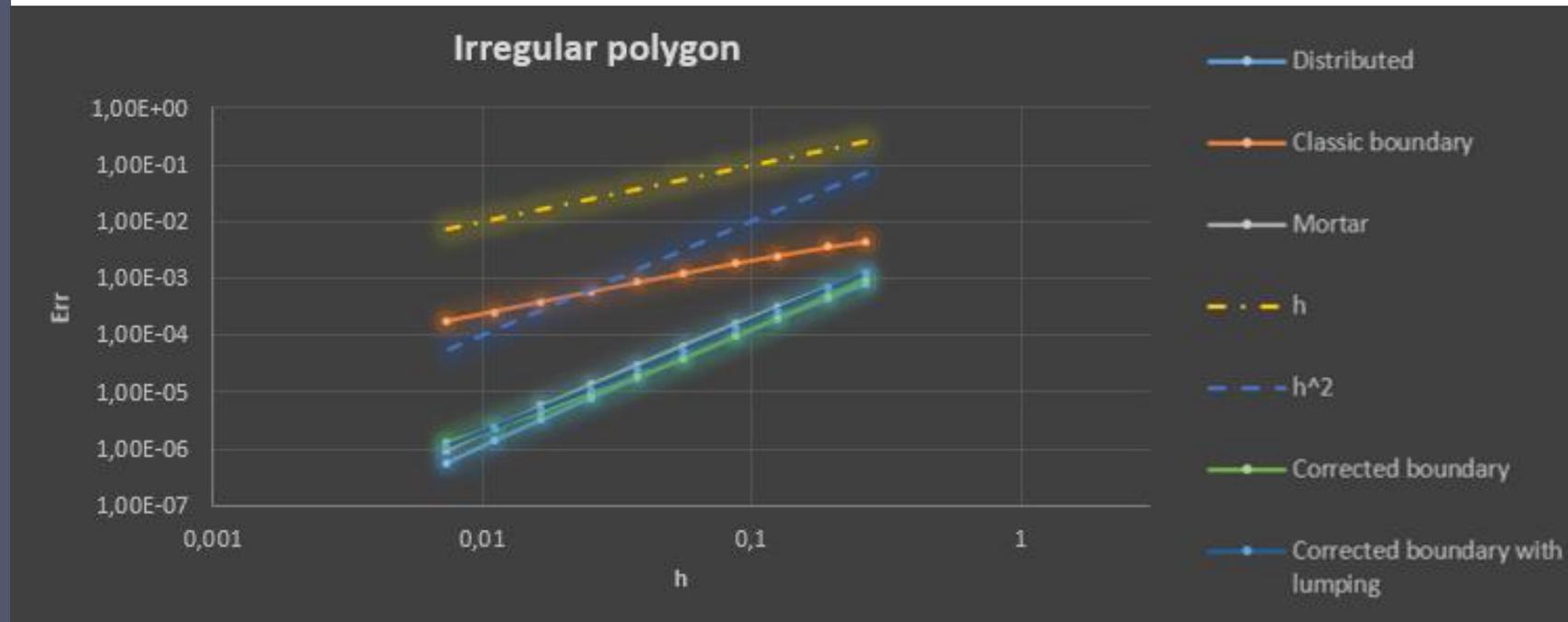
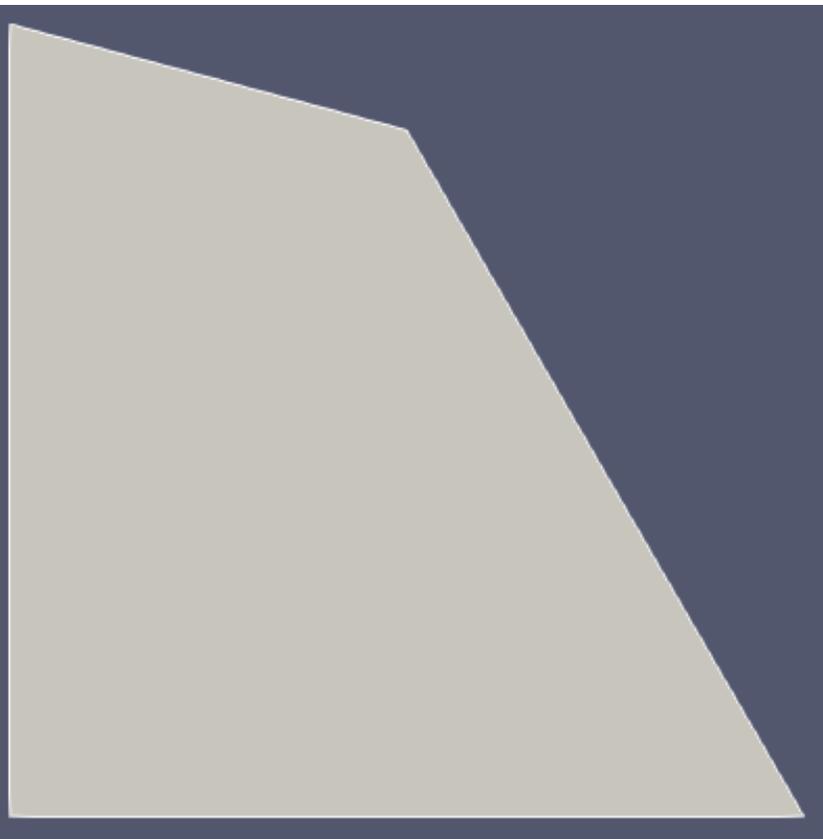
# Comparaison numérique de différentes formulations des dérivées de forme : cas régulier

- Soit  $u_\Omega$  unique solution de «  $-\Delta u + u = f$  » avec conditions de Dirichlet.
- Pour  $J(\Omega) = \int_\Omega \partial_{x_1} u_\Omega dx$  :



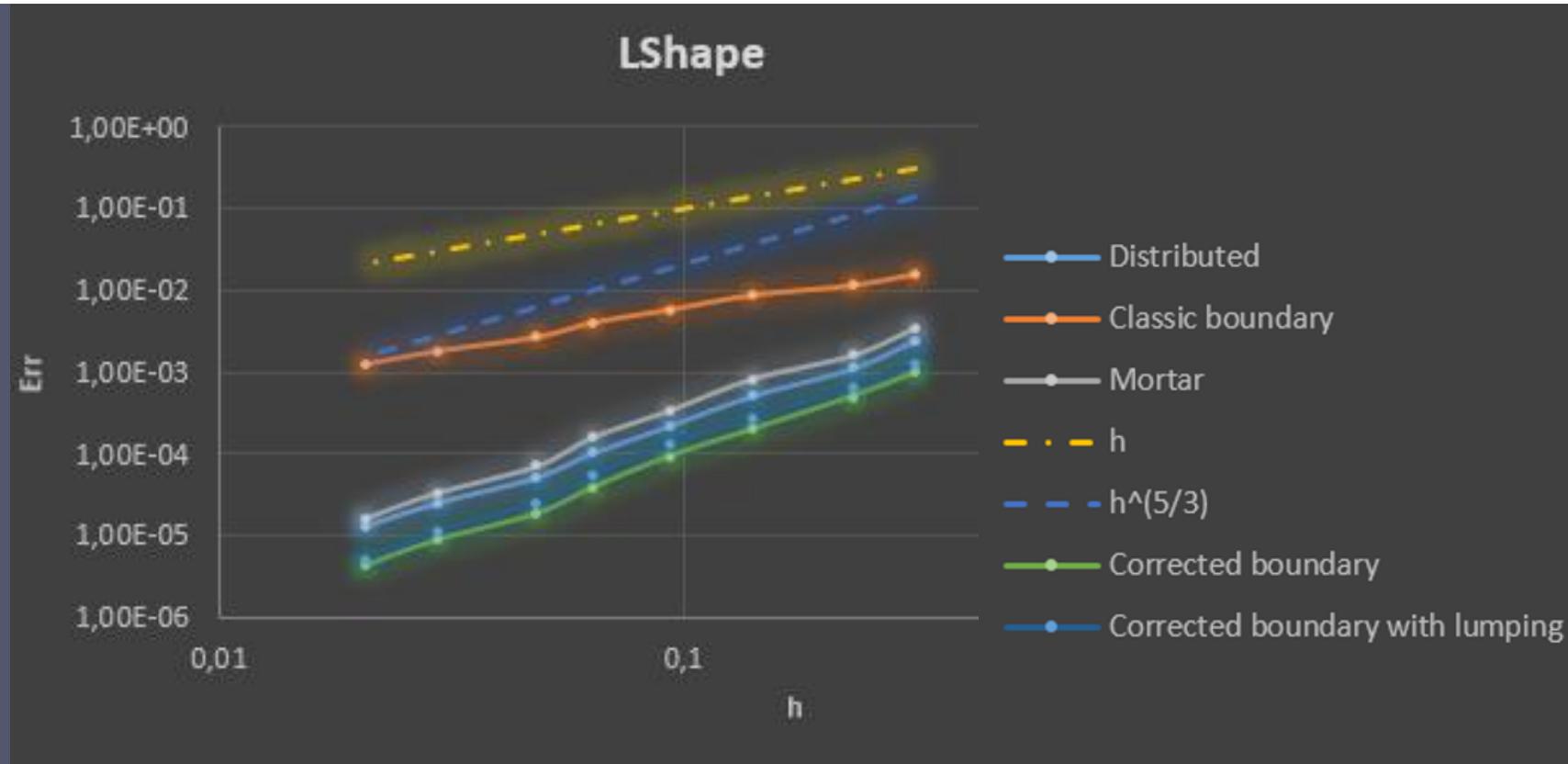
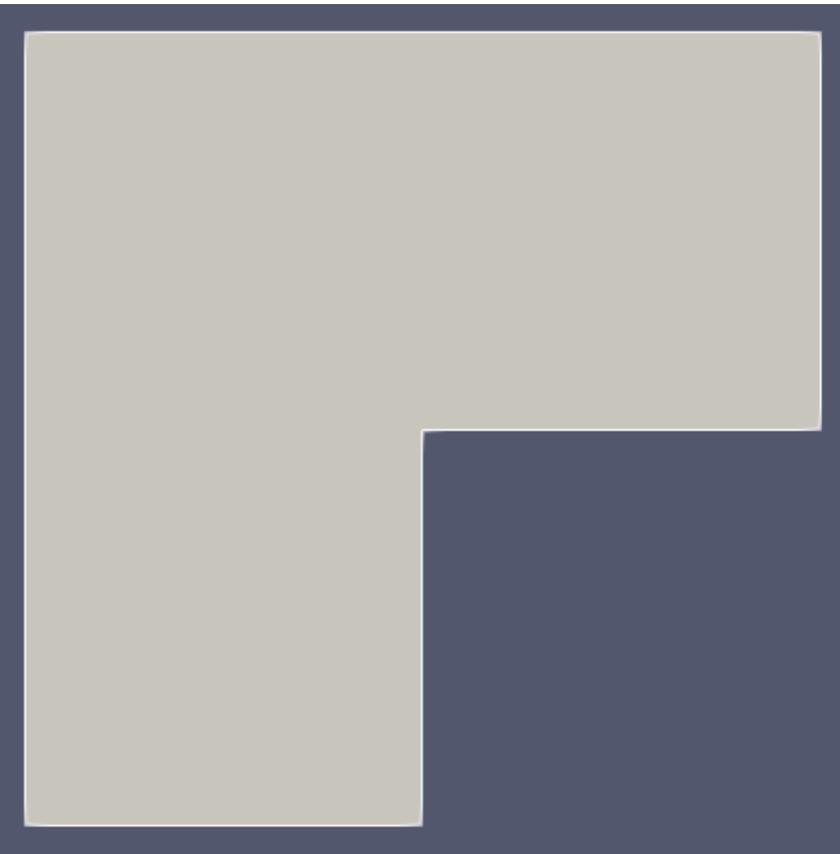
# Comparaison numérique de différentes formulations des dérivées de forme : avec conditions de Neumann

- Soit  $u_\Omega$  unique solution de «  $-\Delta u + u = f$  » avec conditions de Neumann.
- Pour  $J(\Omega) = \int_\Omega \partial_{x_1} u_\Omega dx$  :



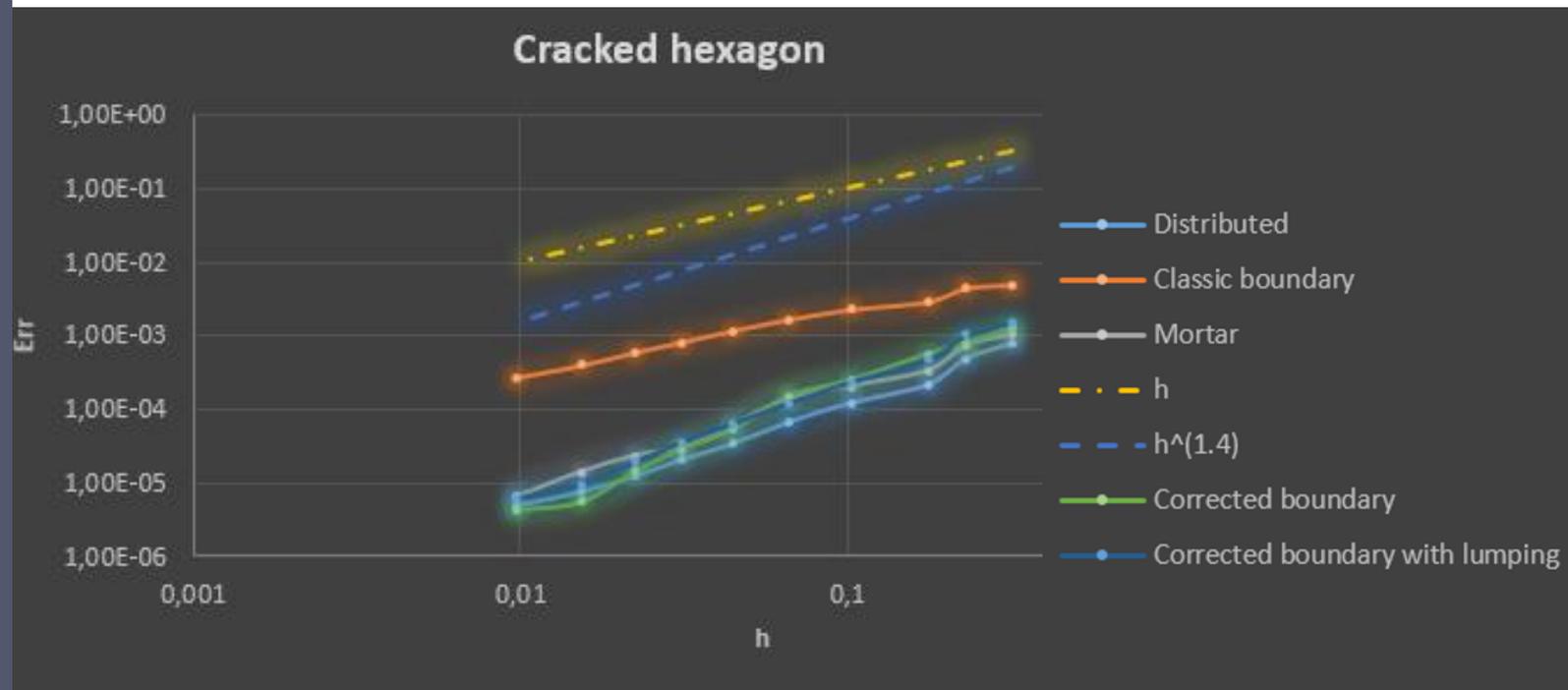
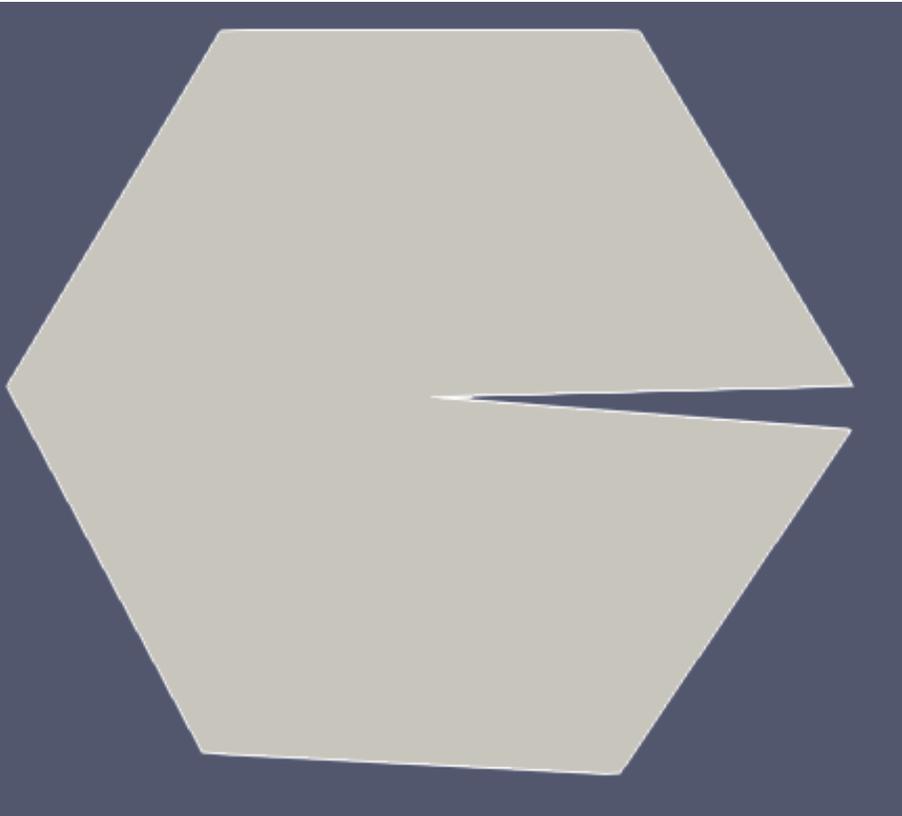
# Comparaison numérique de différentes formulations des dérivées de forme : cas irrégulier

- Soit  $u_\Omega$  unique solution de «  $-\Delta u + u = f$  » avec conditions de Dirichlet.
- Pour  $J(\Omega) = \int_\Omega \partial_{x_1} u_\Omega dx$  :



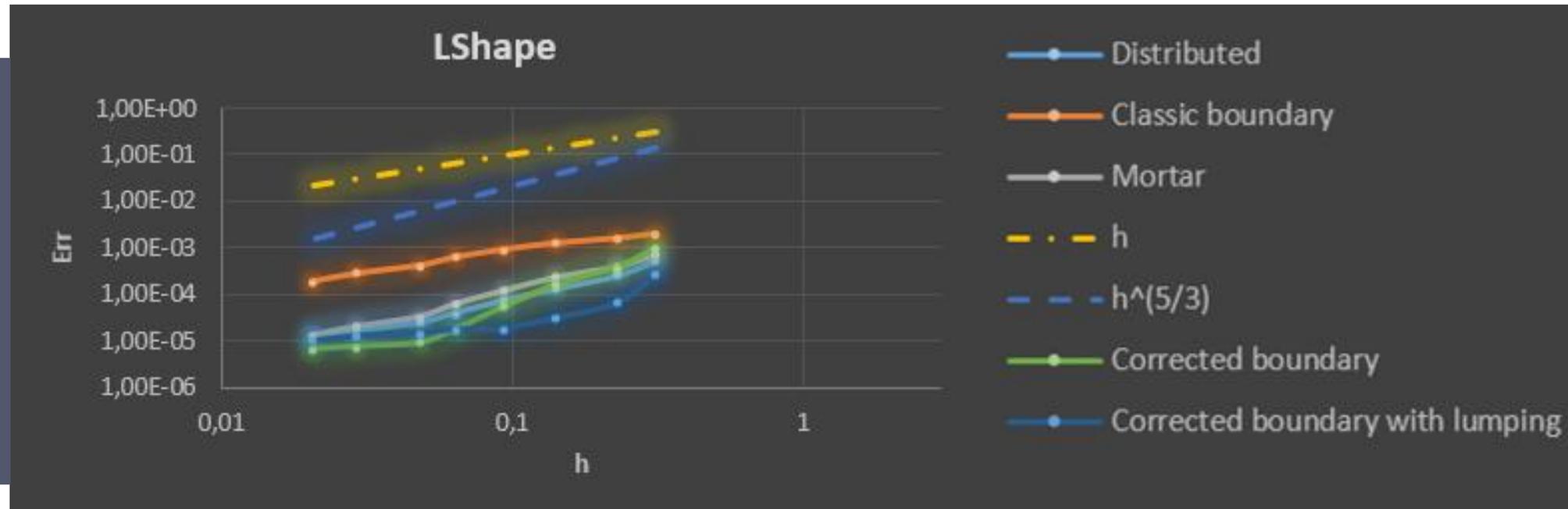
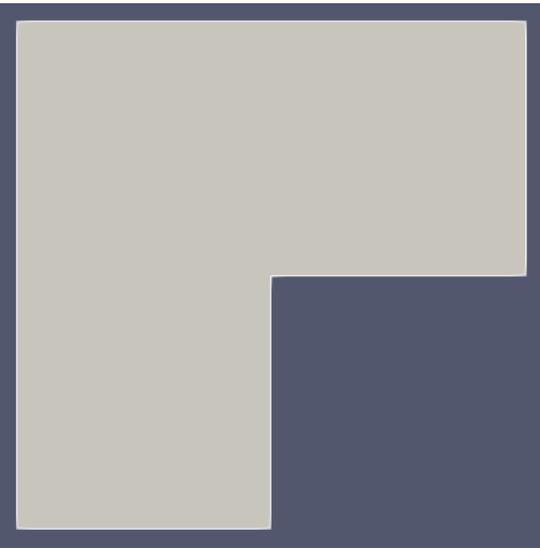
# Comparaison numérique de différentes formulations des dérivées de forme : cas irrégulier

- Soit  $u_\Omega$  unique solution de «  $-\Delta u + u = f$  » avec conditions de Dirichlet.
- Pour  $J(\Omega) = \int_\Omega (\partial_{x_1} u_\Omega)^2 dx$  :



# Comparaison numérique de différentes formulations des dérivées de forme : cas irrégulier

- Soit  $u_\Omega$  unique solution de «  $-\Delta u + u = f$  » avec conditions de Dirichlet.
- Pour  $J(\Omega) = \int_\Omega (\nabla u_\Omega)^4 dx$  :



# Exemple : Minimisation des contraintes mécaniques de résistances électriques FeCrAl-BeO

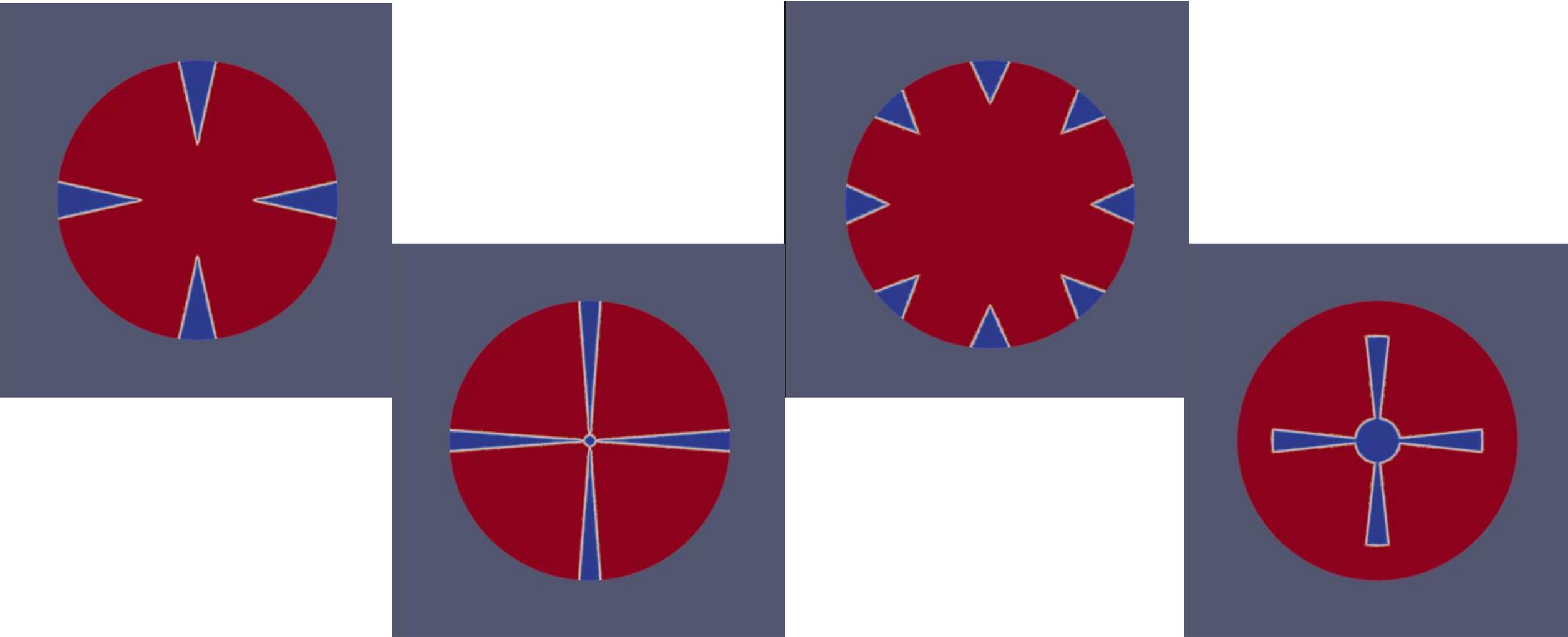


Fig. 6 : Evolution des formes au cours des itérations par méthode de variations de frontières munie d'une dérivée volumique

# Conclusion

- La dérivée volumique est suffisamment robuste pour résoudre  $\min_{\Omega} J(\nabla u_{\Omega})$
- Développement d'une nouvelle formulation de la dérivée surfacique par les méthodes Mortar :
  - Robuste pour des cas tests sans interfaces entre phases matérielles
- Perspectives :
  - Démonstration des erreurs des différentes formulations de  $\nabla_{\Omega} J(\nabla u_{\Omega})$
  - Conditions de différentiabilité de  $J(u_{\Omega}, \nabla u_{\Omega})$

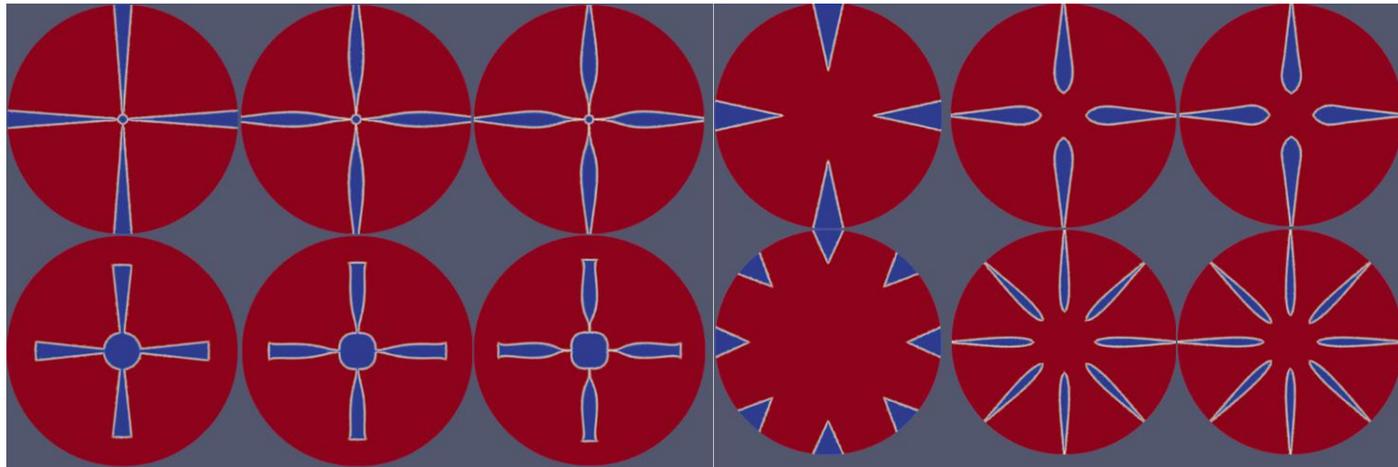


Fig. 7 : Evolution des formes au cours des itérations pour la dérivée volumique

# Références

- [Allaire 2002] G. Allaire. Shape optimization by the homogenization method, volume 146 of Applied Mathematical Sciences. Springer-Verlag, New York, 2002.
- [Allaire 2007] G. Allaire. Conception optimale de structures, volume 58 of *Mathématiques & Applications* (Berlin). Springer-Verlag, Berlin, 2007.
- [Bendsøe 1989] M. Bendsøe, Optimal Shape Design as a Material Distribution Problem. *Structural Optimization*, 1, 193-202, 1989.
- [Céa 1986] J. Céa. Conception optimale ou identification de formes, calcul rapide de la dérivée directionnelle de la fonction coût. *M2AN – Modélisation mathématique et analyse numérique*, 20(3) : 371-402, 1986
- [Dapogny 2013] C. Dapogny. Optimisation de formes, méthode des lignes de niveaux sur maillages non structurés et évolution de maillages. Equations aux dérivées partielles [math.AP]. Université Pierre et Marie Curie - Paris VI, 2013.
- [Dapogny et al. 2018] C. Dapogny, P. Frey, F. Omnès, Y. Privat, F. Omnès. Geometrical shape optimization in fluid mechanics using FreeFem++. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, Springer Verlag (Germany).
- [Dombre et al. 2012] E. Dombre, G. Allaire O. Pantz and D. Schmitt. Shape optimization of a sodium fast reactor core. *ESAIM : Proc.*, 38 :319-334, 2012.
- [Dornisch et al. 2021] W. Dornisch and J. Stöckler. An isogeometric mortar method for the coupling of multiple NURBS domains with optimal convergence rates. *Numerische Mathematik*, 149 :871-931, 2021.

# Références

[Gong et al. 2021] W. Gong and S. Zhu. On discrete shape gradients of boundary type for pde-constrained shape optimization. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 59(3) :1510–1541, 2021.

[Hecht 2012] F. Hecht. New development in FreeFem++. *J. Numer. Math.*, 20(3-4) :251-265, 2012.

[Hiptmair et al. 2014] R. Hiptmair, A. Paganini, and S. Sargheini. Comparison of approximate shape gradients. *BIT Numerical Mathematics*, 55, 06 2014.

[Ho-Nguyen-Tan et al. 2022] T. Ho-Nguyen-Tan and H.-G. Kim, Level set-based topology optimization for compliance and stress minimization. *Computers & Structures*, Volume 259, 2022.

[Nowak et al. 2020] M. Nowak, J. Sokolowski, and A. Zochowski. Biomimetic Approach to Compliance Optimization and Multiple Load Cases. *Journal of Optimization Theory and Applications*, 184(1) :210-225, January 2020.

[Pantz 2005] O. Pantz. Sensibilité de l'équation de la chaleur aux sauts de conductivité. *Comptes Rendus Mathématique*, 341(5) : 333-337, 2005.

[Rozvany 2001] G.I.N. Rozvany. On design-dependent constraints and singular topologies. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, 21 : 164-172, 04 2001.

# Merci



# Annexes



# Calcul des erreurs de discrétisations numériques

- On calcule les erreurs entre  $\nabla_{\Omega} J$  et  $\nabla_{\Omega} J_h$  dans l'espace des polynômes de degré  $k$   $P_k(\mathbb{R}^N, \mathbb{R}^N)$  :

$$\varepsilon := \left( \max_{0 \neq \tilde{\theta} \in P_k(\mathbb{R}^N, \mathbb{R}^N)} \frac{\|\langle \nabla_{\Omega} J, \tilde{\theta} \rangle - \langle \nabla_{\Omega} J_h, \tilde{\theta} \rangle\|^2}{\|\tilde{\theta}\|^2} \right)^{1/2}$$

- Pour ce faire, on introduit la base vectorielle suivante :

$$\{\tilde{\theta}_i\}_{i=1}^q = \left\{ \left[ \prod_{i=1}^n x_i^{\beta_i}, 0, \dots, 0 \right], \dots, \left[ 0, \dots, 0, \prod_{i=1}^n x_i^{\beta_i} \right] \right\}_{\sum_{i=1}^n \beta_i \leq k}$$

où  $n$  est un entier,  $\beta_i > 0$ , et  $q = n C_{k+n}^n$ .

- Ainsi :

$$\varepsilon := \left( w^T \mathbb{K}^{-1} w \right)^{1/2},$$

$$\text{où } \mathbb{K} = \left[ (\tilde{\theta}_i, \tilde{\theta}_j)_{H^1(\Omega)} \right]_{i,k=1}^q \in \mathbb{R}^{q \times q} \quad \text{et} \quad w := \left[ \langle \nabla_{\Omega} J, \tilde{\theta}_i \rangle - \langle \nabla_{\Omega} J_h, \tilde{\theta}_i \rangle \right]_{i=1}^q.$$

# Comment obtenir les dérivées de forme volumique et surfacique « classique » ? (Partie 1)

$$J(\Omega) = \int_{\Omega} j(\nabla u_{\Omega}) dx, \longleftrightarrow \int_{\Omega} (\kappa \nabla u \cdot \nabla \tilde{u} + u \tilde{u}) dx = \int_{\Omega} f \tilde{u} dx + \int_{\Gamma_N} \psi \tilde{u} dS, \longleftrightarrow a(\Omega, u, \tilde{u}) = b(\Omega, \tilde{u}).$$

Lagrangien : somme de J et de l'EDP

$$\mathcal{L}(\Omega, u, u^*) = \int_{\Omega} j(\nabla u) dx + a(\Omega, u, u^*) - b(\Omega, u^*).$$

Changement de variables

$$\mathcal{L}(\varphi, \mathbf{u}, \mathbf{u}^*) = \int_{\Omega} j(\nabla^{\varphi} \mathbf{u}) \det(\nabla \varphi) dx + \int_{\Omega} (\kappa \nabla^{\varphi} \mathbf{u} \cdot \nabla^{\varphi} \mathbf{u}^* + \mathbf{u} \mathbf{u}^*) \det(\nabla \varphi) dx - \int_{\Omega} f \mathbf{u}^* \det(\nabla \varphi) dx - \int_{\Gamma_N} \psi \mathbf{u}^* |\det \nabla \varphi| |((\nabla \varphi)^{-1})^T \mathbf{n}|_{\mathbb{R}^N} dS.$$

Dérivation de J par  $\theta$

$$\langle \nabla_{\Omega} J(\Omega), \tilde{\theta} \rangle = - \int_{\Omega} \left( \frac{\partial j}{\partial \nabla u} \cdot (\nabla \theta^T \nabla u) \right) dx + \int_{\Omega} j'(\nabla u) \cdot \nabla \partial_{\theta} u dx + \int_{\Omega} j(\nabla u) (\nabla \cdot \tilde{\theta}) dx.$$

Définition adjoint  $u_{\Omega}^*$

$$a(\Omega, \tilde{u}^*, u^*) = - \int_{\Omega} j'(\nabla u) \cdot \nabla \tilde{u}^* dx.$$

# Comment obtenir les dérivées de forme volumique et surfacique « classique » ? (Partie 2)

$$\begin{aligned}
 \mathcal{L}(\varphi, \mathbf{u}, \mathbf{u}^*) &= \int_{\Omega} j(\nabla^{\varphi} \mathbf{u}) \det(\nabla \varphi) dx \\
 &+ \int_{\Omega} (\kappa \nabla^{\varphi} \mathbf{u} \cdot \nabla^{\varphi} \mathbf{u}^* + \mathbf{u} \mathbf{u}^*) \det(\nabla \varphi) dx \\
 &- \int_{\Omega} f \mathbf{u}^* \det(\nabla \varphi) dx \\
 &- \int_{\Gamma_N} \psi u^* |\det \nabla \varphi| |((\nabla \varphi)^{-1})^T n|_{\mathbb{R}^N} dS.
 \end{aligned}
 \quad
 \langle \nabla_{\Omega} J(\Omega), \tilde{\theta} \rangle = - \int_{\Omega} \left( \frac{\partial j}{\partial \nabla u} \cdot (\nabla \theta^T \nabla u) \right) dx
 \quad
 a(\Omega, \tilde{u}^*, u^*) = - \int_{\Omega} j'(\nabla u) \cdot \nabla \tilde{u}^* dx.$$

$$\begin{aligned}
 &+ \int_{\Omega} j'(\nabla u) \cdot \nabla \partial_{\theta} u dx + \int_{\Omega} j(\nabla u) (\nabla \cdot \tilde{\theta}) dx.
 \end{aligned}$$

## Dérivée volumique

$$\begin{aligned}
 \langle \nabla_{\Omega} L_v(\Omega), \theta \rangle &= \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \theta} \\
 &= \int_{\Omega} j(\nabla u_{\Omega}) \nabla \cdot \theta dx \\
 &- \int_{\Omega} \left( \frac{\partial j}{\partial \nabla u} \cdot (\nabla \theta^T \nabla u_{\Omega}) \right) dx \\
 &+ \int_{\Omega} (\kappa \nabla u_{\Omega} \cdot \nabla u_{\Omega}^* + u_{\Omega} u_{\Omega}^*) \nabla \cdot \theta dx \\
 &- \int_{\Omega} \kappa (\nabla u_{\Omega} \cdot \nabla \theta^T \nabla u_{\Omega}^* + \nabla \theta^T \nabla u_{\Omega} \cdot \nabla u_{\Omega}^*) dx \\
 &- \int_{\Omega} u_{\Omega}^* (f \nabla \cdot \theta + \nabla f \cdot \theta) dx \\
 &- \int_{\Gamma_N} ((\nabla \psi \cdot \theta) u_{\Omega}^* + \psi u_{\Omega}^* (\nabla \cdot \theta - \nabla \theta n \cdot n)) dS.
 \end{aligned}$$

## Dérivée surfacique « classique »

$$\begin{aligned}
 \langle \nabla_{\Omega} J(\Omega), \tilde{\theta} \rangle &= \sum_{i=0}^m \sum_{j \in M(i)} \int_{\Gamma_{ij}} [j(\nabla u_{\Omega})] (\tilde{\theta} \cdot n) dS \\
 &- \sum_{i=0}^m \sum_{j \in M(i)} \int_{\Gamma_{ij}} [(\tilde{\theta} \cdot \nabla u_{\Omega}) j'(\nabla u_{\Omega}) \cdot n] dS \\
 &+ \sum_{i=0}^m \sum_{j \in M(i)} \int_{\Gamma_{ij}} [\kappa \nabla u_{\Omega} \cdot \nabla u_{\Omega}^* + u_{\Omega} u_{\Omega}^* - f u_{\Omega}^*] (\tilde{\theta} \cdot n) dS \\
 &- \sum_{i=0}^m \sum_{j \in M(i)} \int_{\Gamma_{ij}} \left[ \kappa \left( (\tilde{\theta} \cdot \nabla u_{\Omega}^*) \frac{\partial u_{\Omega}}{\partial n} + (\tilde{\theta} \cdot \nabla u_{\Omega}) \frac{\partial u_{\Omega}^*}{\partial n} \right) \right] dS \\
 &+ \int_{\Gamma_N} (\tilde{\theta} \cdot n) (u_{\Omega}^* \partial_n \psi + K \psi u_{\Omega}^*) dS,
 \end{aligned}$$

Intégration par parties