

Méthode de champ de phase et flots géométriques d'interfaces

Elie Bretin

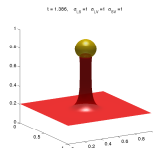
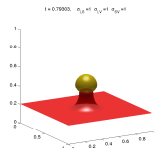
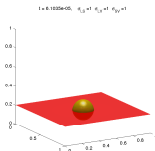
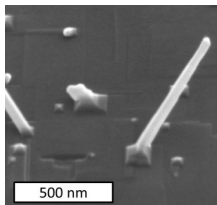
Institut Camille Jordan & INSA Lyon

12ième Biennale Française des Mathématiques Appliquées et Industrielles - Carcans Maubuisson (Juin 2025)



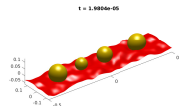
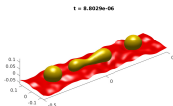
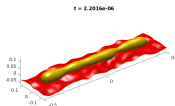
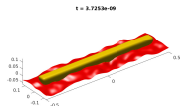
- Projet CNRS Nanophase

Modélisation de la croissance de nanofils de type VLS



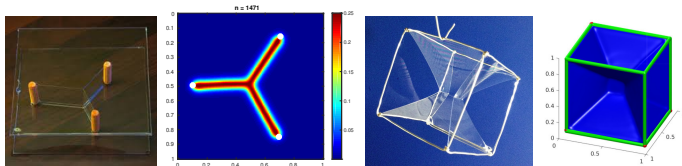
- ANR BEEP

Flot de diffusion de surface et application au dé-mouillage de structures fines



- ANR- Geometrya, Stoiques, Pepr EDP-AI

Approximation du problème de Steiner et de Plateau



Objectif de l'exposé :

- **Introduction** des méthodes de champ de phase comme **outils théorique et numérique très performant** pour l'approximation d'évolution d'interface orientée
- Exemple de limites dans le cas de **diffusion de surface**
- Exemple de limites dans le cas de **surface non orientée**

Exemple d'énergies géométriques simples

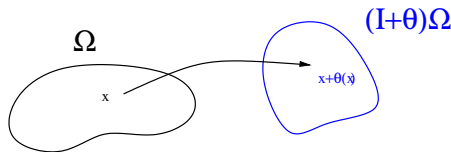
- Volume et périmètre

$$V(\Omega) = \int_{\Omega} 1 dx \quad \text{and} \quad P(\Omega) = \int_{\partial\Omega} 1 d\mathcal{H}^{n-1}.$$

- Dérivée de forme (au sens de Hadamard)

$$J'(\Omega)(\theta) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{J((Id + \epsilon\theta)\Omega) - J(\Omega)}{\epsilon},$$

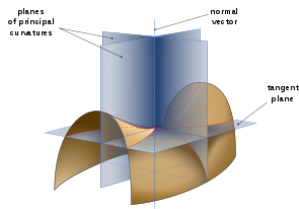
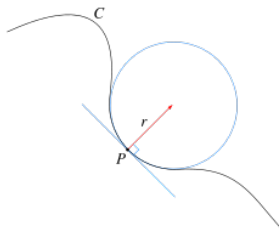
où $\theta : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$ est un champ de déformation "régulier"



Dérivée de forme et courbure moyenne

- **Quantités géométriques** : normale et courbure moyenne

$$\mathbf{n} = \nabla \text{dist}(x, \Omega) \quad \text{et} \quad H = \text{div}(\mathbf{n})$$



- **Dérivée de forme**

$$V'(\Omega)(\theta) = \int \theta \cdot \mathbf{n} d\mathcal{H}^{n-1} \quad \text{et} \quad P'(\Omega)(\theta) = \int H\theta \cdot \mathbf{n} d\mathcal{H}^{n-1}$$

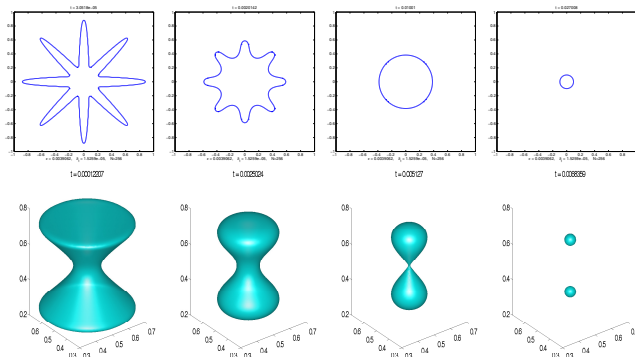
- **Gradient de forme**

$$\nabla V(\Omega) = \mathbf{n} \quad \text{et} \quad \nabla P(\Omega) = H\mathbf{n}$$

Mouvement par courbure moyenne $t \mapsto \Omega(t)$

- Flot de gradient L^2 du périmètre : loi d'évolution

$$V_n = H$$



Quelques propriétés du mouvement par courbure moyenne

$t \rightarrow \Omega(t)$

- Existence locale pour un ensemble initial convexe. L'ensemble $\Omega(t)$ reste convexe, converge vers un point et devient asymptotiquement sphérique [Huisken 1984]
- En dimension 2, existence locale pour des courbes fermées régulières. L'ensemble $\Omega(t)$ devient convexe en un temps fini, converge vers un point et devient **asymptotiquement sphérique** [Gage et Hamilton 1986], [Grayson 1987]
- En dimension $n > 2$: **singularités en temps fini** [Grayson 1989]
- Principe d'inclusion [Ecker 2002] :

$$\Omega_1(0) \subset \Omega_2(0) \text{ alors } \Omega_1(t) \subset \Omega_2(t), \quad \forall t \in [0, T]$$

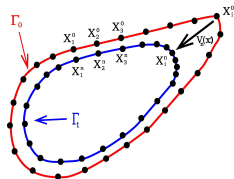
Discrétisation numérique du flot $t \rightarrow \Omega(t)$

Méthode paramétrique : $\Gamma = \{X(s) = (x(s), y(s))\}_{s \in [0, 2\pi]}$

- Equation d'évolution

$$X_t = \frac{1}{|X_s|} \left(\frac{X_s}{|X_s|} \right)_s$$

Changement topologie ?



Méthode level set : $\Gamma(t) = \{x ; \varphi(x, t) = 0\}$

- Equation d'Hamilton Jacobi

$$\partial_t \varphi = \kappa(\varphi) |\nabla \varphi| = \operatorname{div} \left(\frac{\nabla \varphi}{|\nabla \varphi|} \right) |\nabla \varphi|$$



Discrétisation numérique ?

Principe des méthodes de champ de phase

Approximation des énergies géométriques J

- Approximation au sens de la Γ -convergence

Soit (X, d) un espace métrique, et soit $J_\varepsilon : X \rightarrow \overline{\mathbb{R}}$ une famille de fonctions. On dit que J_ε Γ -converge dans X vers $J : X \rightarrow \overline{\mathbb{R}}$ si :

$$\Gamma \text{ lim inf} : \quad \forall u_\varepsilon \rightarrow u \text{ dans } X, \quad \liminf_{\varepsilon \rightarrow 0} J_\varepsilon(u_\varepsilon) \geq J(u)$$

$$\Gamma \text{ lim sup} : \quad \exists u_\varepsilon \rightarrow u \text{ dans } X \text{ tel que } \limsup_{\varepsilon \rightarrow 0} J_\varepsilon(u_\varepsilon) \leq J(u)$$

- Convergence des suites minimisantes

Si $J_\varepsilon : X \rightarrow \overline{\mathbb{R}}$ Γ -converge vers $J : X \rightarrow \overline{\mathbb{R}}$ et si J_ε est équi-coercive, alors J est coercive et atteint son minimum sur X . De plus,

$$\min_{u \in X} \{J(u)\} = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \inf_{u \in X} \{J_\varepsilon(u)\}$$

Quel choix de topologie ?

- Définition de **la variation totale** $|Du|$ dans $L^1(\mathbb{R}^d)$:

$$|Du|(\mathbb{R}^d) = \sup \left\{ \int_{\mathbb{R}^d} u \operatorname{div}(\varphi) \, dx; \varphi \in C_c^1(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}^d) \text{ et } \|\varphi\|_\infty \leq 1 \right\}$$

- Si $u = \chi_\Omega$

$$P(\Omega) = \int_{\partial\Omega} 1 \, d\mathcal{H}^{d-1} = |D\chi_\Omega|(\mathbb{R}^d)$$

- **Périmètre généralisé** (au sens de Caccioppoli) dans $L^1(\mathbb{R}^d)$,

$$P(u) := \begin{cases} |Du|(\mathbb{R}^d) & \text{si } u = \chi_\Omega \\ +\infty & \text{sinon} \end{cases},$$

- **Semi-continuité inférieure** de P pour la topologie $L^1(\mathbb{R}^d)$.

Approximation du périmètre

- Energie de Cahn-Hilliard

$$P_\epsilon(u) = \int_{\mathbb{R}^d} \left(\epsilon \frac{|\nabla u|^2}{2} + \frac{1}{\epsilon} W(u) \right) dx$$

où $W(s) = \frac{1}{2}s^2(1-s)^2$.

- [Modica-Mortola77]

Γ -convergence de P_ϵ vers $c_W P$
 avec $c_W = \int_0^1 \sqrt{2W(s)} ds$

Γ -lim inf

Soit $(u_\epsilon)_\epsilon$ telle que $\liminf P_\epsilon(u_\epsilon) < \infty$.

- Comme **le potentiel W s'annule en $\{0, 1\}$** , et que $\int W(u_\epsilon) dx \rightarrow 0$, on en déduit que

$$u_\epsilon \rightarrow u = \chi_\Omega$$

- **Avec $a^2 + b^2 \geq 2ab$** , on vérifie que

$$P_\epsilon(u_\epsilon) \geq \int |\nabla u_\epsilon| \sqrt{2W(u_\epsilon)} dx = \int |D\phi(u_\epsilon)| dx,$$

$$\text{où } \phi(s) = \int_0^s \sqrt{2W(s)} ds$$

- **Semi-continuité inférieure de la variation totale**

$$\liminf \int |D\phi(u_\epsilon)| \geq \int |D\phi(\chi_\Omega)| = \phi(1)P(\chi_\Omega) = c_W P(\chi_\Omega)$$

Γ -lim sup

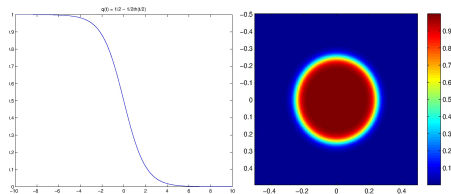
Soit $u = \chi_\Omega$ avec Ω régulier. L'objectif est d'expliciter une suite u_ϵ telle $u_\epsilon \rightarrow u$ dans $L^1(\mathbb{R}^d)$ et $\limsup_{\epsilon \rightarrow 0} P_\epsilon(u_\epsilon) \leq P(\Omega)$.

- Profil de champ de phase 1D

$$q = \arg \min_{\gamma \in H_{loc}^1(\mathbb{R})} \left\{ \int_{\mathbb{R}} \left(\frac{1}{2} |\gamma'(s)|^2 + W(\gamma(s)) \right) ds ; \gamma(-\infty) = 1, \gamma(0) = 1/2, \gamma(\infty) = 0 \right\}.$$

- Candidat possible

$$u_\epsilon(x) = q \left(\frac{\text{dist}(x, \Omega)}{\epsilon} \right)$$



- **Formule de la co-aire :**

$$\int_Q u(x) |\nabla \phi| dx = \int_{\mathbb{R}} \left(\int_{\phi^{-1}(s)} u(x) d\mathcal{H}^{n-1} \right) ds$$

- **Application avec** $\phi = \text{dist}(x, \Omega) = d$ (où $|\nabla d| = 1$), on déduit que

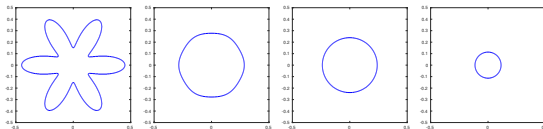
$$\begin{aligned} P_{\varepsilon}(u_{\varepsilon}) &= \frac{1}{\varepsilon} \int_{\mathbb{R}^d} \left(\frac{|q'(d/\varepsilon)|^2}{2} + \frac{1}{\varepsilon} W(q(d/\varepsilon)) \right) dx \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \textcolor{blue}{g(\varepsilon s)} \left[\frac{|q'(s)|^2}{2} + W(q(s)) \right] ds \end{aligned}$$

avec $\textcolor{blue}{g(s)} = |D\chi_{\{\text{dist}(x, \Omega) \leq s\}}|$.

- **La régularité de** g implique que $g(\varepsilon s) \rightarrow g(0) = P(\Omega)$.

Principe de la méthode de champ de phase

Flot géométrique d'une interface.



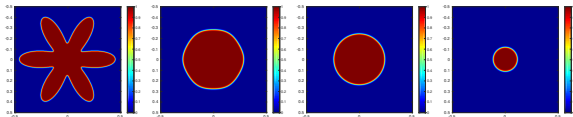
Approximation :

- Énergie de Cahn-Hilliard :

$$P_\varepsilon(u) = \int_Q \left(\frac{\varepsilon}{2} |\nabla u|^2 + \frac{1}{\varepsilon} W(u) \right) dx.$$

- Equation d'Allen-Cahn :

$$\partial_t u_\varepsilon = \Delta u_\varepsilon - \frac{1}{\varepsilon^2} W'(u_\varepsilon).$$



Un outil théorique et numérique très performant

- **Erreur d'approximation du modèle :**

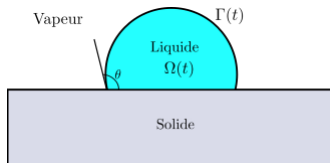
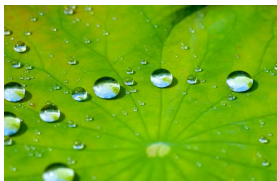
$$\text{dist}(\Gamma(t), \Gamma_\varepsilon(t)) \simeq \varepsilon^2$$

- **Équation très simple à discrétiser :**

$$\frac{u_\varepsilon^{n+1} - u_\varepsilon^n}{\delta_t} = \Delta u_\varepsilon^{n+1} - \frac{1}{\varepsilon^2} W'(u_\varepsilon^n).$$

- **Approche pouvant être étendue à de nombreux contextes :**
contraintes de volume, zones d'inclusion-exclusion, cadre multiphase, approximation de flots géométriques variés (courbure anisotrope, Willmore, diffusion de surface, etc.)
- **Outils d'analyse :** calcul des variations, Γ -convergence, développement asymptotique, analyse numérique

Démouillage ou mouillage d'une structure mince sur une structure solide rugueuse

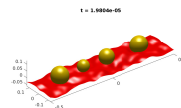
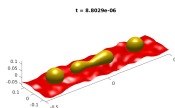
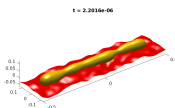
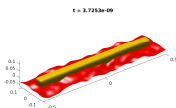


- Flot de gradient H^{-1} du périmètre P

$$V_n = \Delta_\Gamma H$$

- Loi de Young

$$\cos(\theta) = \frac{\sigma_{SV} - \sigma_{LS}}{\sigma_{VL}}$$



Approximation et équation de Cahn Hilliard

- **Energie de Cahn Hilliard**

$$P_\varepsilon(u) = \int_Q \left(\frac{\varepsilon}{2} |\nabla u|^2 + \frac{1}{\varepsilon} W(u) \right) dx.$$

- **Flot de gradient H^{-1} de P_ε**

$$\begin{cases} \partial_t u &= \Delta \mu \\ \mu &= -\Delta u + \frac{1}{\varepsilon^2} W'(u) \end{cases}$$

- **Modèle limite : flot de Mullins-Sekerka [Pego 89], [Alikakos 94]**

$$V_n = [\nabla_n \nu]_\pm \text{ where } \begin{cases} \Delta \nu = 0, \text{ on } Q \setminus \partial\Omega \\ \nu = H \text{ on } \partial\Omega \end{cases}$$

- **Propriétés physiques de la solution ?**

Ajout de mobilité

- Equation de Cahn Hilliard avec **mobilité dégénérée**

$$\begin{cases} \partial_t u &= \operatorname{div} (M(u) \nabla \mu), \text{ avec} \\ \mu &= -\Delta u + \frac{1}{\varepsilon^2} W'(u) \end{cases}$$

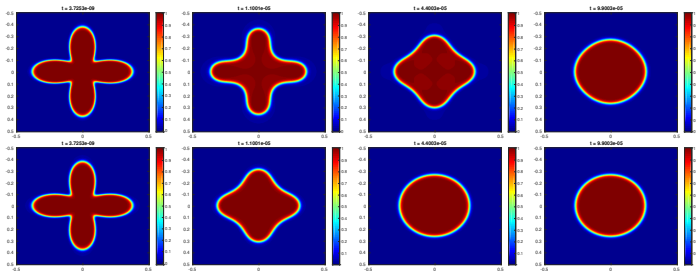
- Existence de solution faible dans $[0, 1]$ [Elliott, Garcke96]. Unicité?
- Convergence vers le flot de diffusion de surface avec $M(s) = 36 s^2(1 - s^2)$.

Ordre de convergence du modèle

- Développement asymptotique quand $\varepsilon \rightarrow 0$

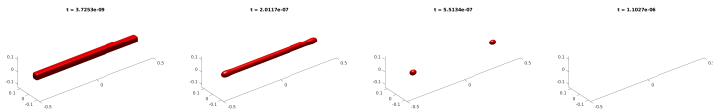
$$\begin{cases} u_\varepsilon(x, t) = q\left(\frac{d(x, \Omega(t))}{\varepsilon}\right) + \mathcal{O}(\varepsilon) \\ V_\varepsilon = \Delta_{\Gamma(t)} H(t) + \mathcal{O}(\varepsilon) \end{cases}$$

- Comparaison des modèles de Cahn-Hilliard



Application pour le problème de démouillage

- Evolution de structures fines



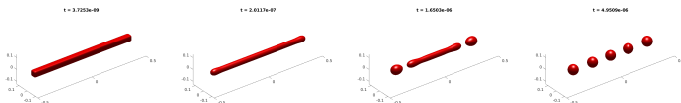
- Perte de volume observée en $O(\varepsilon)$!

Correction du modèle

- Equation de Cahn Hilliard avec **double mobilités dégénérées**

$$\begin{cases} \partial_t u &= N(u) \operatorname{div} (M(u) \nabla (N(u) \mu)) \\ \mu &= \Delta u - \frac{1}{\varepsilon^2} W'(u) \end{cases}$$

- Modèle d'approximation d'ordre 2 avec $M(s) = s^2(1-s)^2$ and $N(s) = 1/\sqrt{M(s)}$.



- Existence de solution ? [Cherfils, Miranville, 2023]

Approximation of surface diffusion flow : a second order variational Cahn–Hilliard model with degenerate mobilities, E. Bretin, S. Masnou, A. Sengers, G. Terii, *M3AS*, 2022.

Discrétisation numérique

- Cas de l'équation de **Cahn-Hilliard sans mobilité**

$$\begin{cases} \partial_t u &= \Delta \mu \\ \mu &= -\Delta u + \frac{1}{\epsilon^2} W'(u) = \frac{1}{\epsilon} \nabla P_\epsilon(u) \end{cases}$$

- Une approche **spectrale-Fourier** de type convexe-concave [Eyre 98]

$$\begin{cases} (u^{n+1} - u^n)/\delta_t &= \Delta \mu^{n+1} \\ \mu^{n+1} &= (-\Delta u^{n+1} + \frac{\alpha}{\epsilon^2} u^{n+1}) + (\frac{1}{\epsilon^2} (W'(u^n) - \alpha u^n)), \end{cases}$$

- **Stabilité énergétique inconditionnelle**

$$P_\epsilon(u^{n+1}) \leq P_\epsilon(u^n)$$

- **Traitement de la mobilité ?**

$$(u^{n+1} - u^n)/\delta_t = \operatorname{div} (M(u^n) \nabla \mu^{n+1})$$

Traitement numérique des termes de mobilités

- **Splitting d'opérateur appliqué à la mobilité :**

$$\operatorname{div}(M(u^n)\nabla\mu) = m\Delta\mu - \operatorname{div}((m - M(u^n))\nabla\mu)$$

- **Flot de gradient J^{-1} d'une fonction convexe E**

$$\begin{cases} u_t &= -\nabla J(\mu) = -L^*L\mu = -L_1^*L_1\mu + L_2^*L_2\mu \\ \mu &= \nabla E(u), \end{cases}$$

where $J(\mu) = \frac{1}{2}\|L\mu\|^2 = \frac{1}{2}\|L_1\mu\|^2 - \frac{1}{2}\|L_2\mu\|^2$

- Approche numérique de type **concave-convexe**

$$\begin{cases} (u^{n+1} - u^n)/\delta_t &= -L_1^*L_1\mu^{n+1} + L_2^*L_2\mu^n, \\ \mu^{n+1} &= \nabla E(u^{n+1}), \end{cases}$$

Efficace en pratique, mais la décroissance de E n'est pas garantie au cours de itérations.

Approche dite **SAV** de la mobilité

- **Variable scalaire auxiliaire** $r = \sqrt{J_2(\mu)} = \sqrt{\frac{1}{2} \|L_2 \mu\|^2}$:

$$\begin{cases} u_t &= -L_1^* L_1 \mu + \frac{r}{\sqrt{J_2(\mu)}} L_2^* L_2 \mu, \\ r_t &= \frac{1}{2\sqrt{J_2(\mu)}} \langle L_2 \mu, L_2 \mu_t \rangle \\ \mu &= \nabla E(u), \end{cases}$$

- **Discrétisation temporelle**

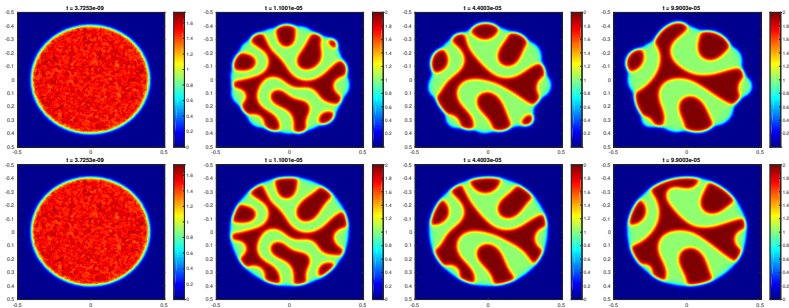
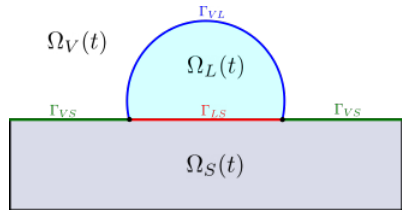
$$\begin{cases} \frac{u^{n+1} - u^n}{\delta t} &= -L_1^* L_1 \mu^{n+1} + \frac{r^{n+1}}{\sqrt{J_2(\mu^n)}} L_2^* L_2 \mu^n, \\ r^{n+1} - r^n &= \frac{1}{2\sqrt{J_2(\mu^n)}} \langle L_2 \mu^n, L_2(\mu^{n+1} - \mu^n) \rangle. \\ \mu^{n+1} &= \nabla E(u^{n+1}), \end{cases}$$

- **Stabilité énergétique** ($E(u^{n+1}) \leq E(u^n)$).

Application au mouillage : un problème multiphase

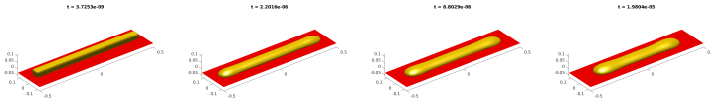
- Diffusion de surface

$$\frac{1}{\nu_{ij}} V_{ij} = \sigma_{ij} \Delta_{\Gamma_{ij}} H_{ij}$$

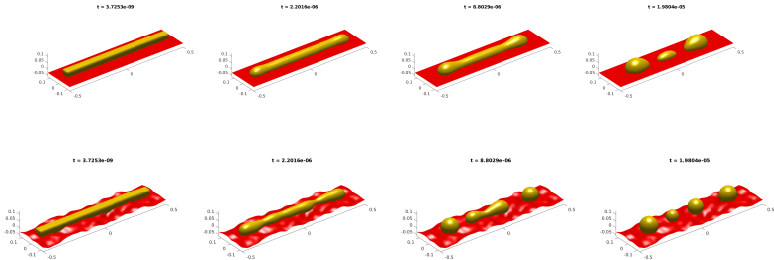


Influence de l'angle de contact solide/liquide

$$\sigma_{VS} = 1.7, \sigma_{LS} = \sigma_{LV} = 1$$



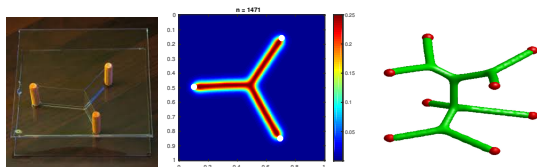
$$\sigma_{LS} = \sigma_{VS} = \sigma_{LV} = 1$$



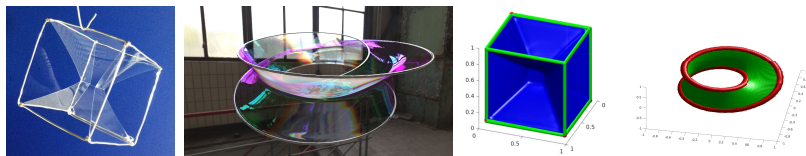
A multiphase Cahn–Hilliard system with mobilities for the simulation of wetting, E. Bretin, R. Denis, S. Masnou, A. Sengers, G. Terii, *M2AN* 2023.

Cas de surfaces non orientables, singulières ou de co-dimension supérieure à 1

Problème de Steiner : Trouver un ensemble compact, connexe K de longueur minimale qui contienne tous les points donnés $x_i \in \mathbb{R}^d$.



Problème de Plateau : Déterminer une surface d'aire minimale dont le bord est une courbe donnée $\Gamma \subset \mathbb{R}^3$.

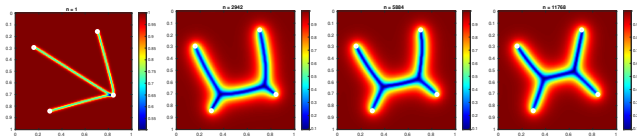


Modèle de champ de phase pour le problème de Steiner

Energie de Cahn-Hilliard + terme de contraintes géodésiques

[Lemenant, Santambrogio, Bonnivard ; 2015]

$$F_\varepsilon(u) = \int_Q \varepsilon |\nabla u|^2 + \frac{1}{\varepsilon} (1 - u)^2 dx + \frac{1}{\lambda_\varepsilon} \sum_{i=1}^N \mathbf{D}(u^2; x_0, x_i),$$

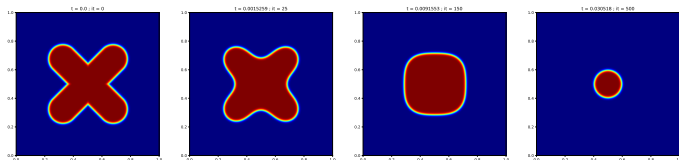


Difficultés : Analyse théorique du modèle, **régularité des solutions**, extension en dimension 3.

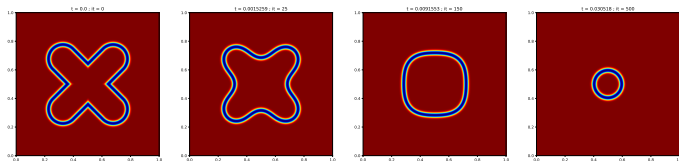
Numerical approximation of the Steiner problem in dimension 2 and 3, M. Bonnivard, E. Bretin, A. Lemenant, *Math. Comp.*, 89, 2020, 1–43.

Flot géométrique et interfaces non orientées

Le modèle d'Allen-Cahn permet d'approcher facilement le flot d'une interface orientée.



Il n'existe en revanche aucun modèle de champ de phase pour approcher l'évolution d'une interface lorsque sa **représentation n'est pas orientée !**



Apprentissage du flot à l'aide d'un réseau de neurones

Thèse de G. Terii, avec R. Denis et S. Masnou

- **Objectif du réseau** : effectuer un seul pas de temps

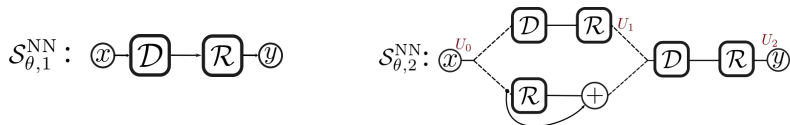
$$u^{n+1} = S_{\theta}^{\text{NN}}[u^n]$$

- **Approche** : définir une architecture de réseau inspirée des schémas numériques classiques pour l'**équation d'Allen-Cahn**.
- **Données d'entraînement** : évolutions connues de flots géométriques simples (*cercle, sphère, cylindre*).

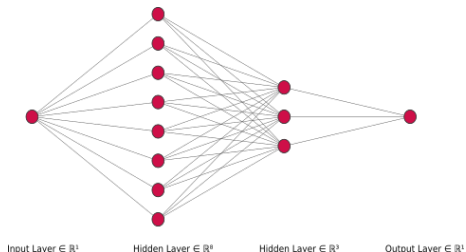
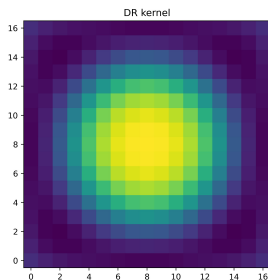
Learning phase field mean curvature flows with neural networks, E. Bretin, R. Denis, S. Masnou, G. Terii, *Journal of Computational Physics* (2022).

Structure de réseaux

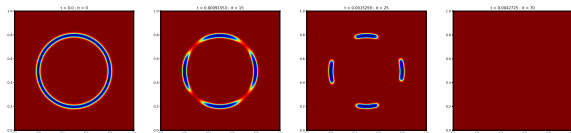
- **Réseaux d'ordre 1 et 2** : Combinaison de neurones de diffusion D et de neurones de réaction R



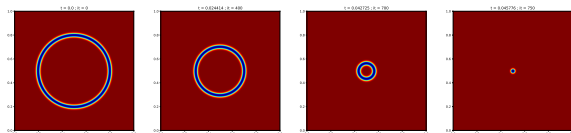
- **Neurone de diffusion** : **noyau de convolution K**
- **Neurone de réaction** : **perceptron multicouche 1D**



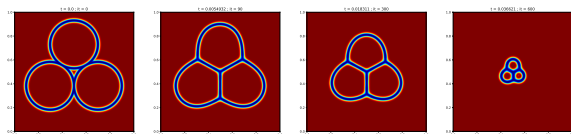
- Le premier réseau $S_{\theta,1}^{NN}$ **n'arrive pas** à déplacer l'interface



- Le second réseau $S_{\theta,2}^{NN}$ **réussit à reproduire** la loi d'évolution



- Excellente capacité de **généralisation** de $S_{\theta,2}^{NN}$ pour approcher des évolutions avec points triples !



Que peut-on apprendre de ces réseaux ?

- ANR Stoiques, PEPR EDP AI

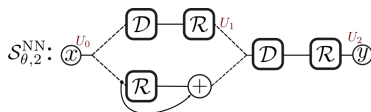
- **Impossibilité** d'entraîner un réseau d'ordre 1 $S_{\theta,1}^{\text{NN}}$!

$$S_{\theta,1}^{\text{NN}} : \textcircled{x} \text{---} \boxed{D} \text{---} \boxed{R} \text{---} \textcircled{y}$$

Il n'existe pas de modèle de champ phase de la forme

$$u_t = Du + R(u)$$

- **Entraînement possible** d'un réseau d'ordre 2 $S_{\theta,2}^{\text{NN}}$



Existence d'un modèle d'approximation de la forme

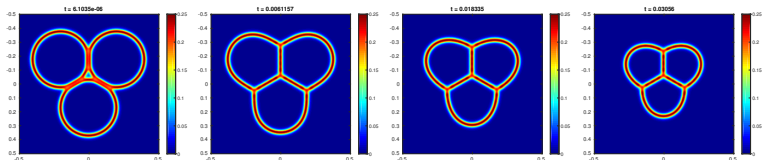
$$u_t = D_1 u + R_1(u) + R_2(D_2 u)$$

Identification d'un nouveau modèle de champ de phase

- Un modèle de type **Willmore-Cahn Hilliard**

$$\mathcal{E}_\varepsilon(u) = \int \varepsilon \frac{1}{2} |\nabla u|^2 + \frac{1}{\varepsilon} F(u) dx + \sigma_\varepsilon \int \frac{1}{2\varepsilon} \left(\varepsilon \Delta u - \frac{1}{\varepsilon} F'(u) \right)^2 dx,$$

avec **un potentiel F non lisse** (zéro double en $s = 0$ et obstacle en $s = 1/4$)



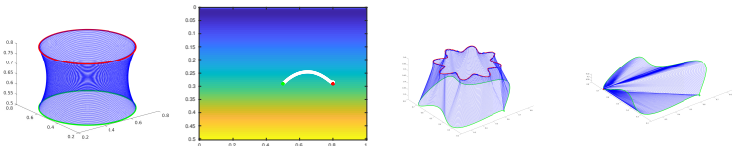
E. Bretin, A. Chambolle, S. Masnou, On a Cahn-Hilliard-Willmore phase field model with nonsmooth potential, *preprint (2024)*.

Application au problème de Plateau

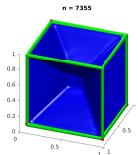
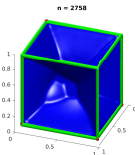
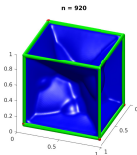
Thèse de E. Machefert avec A. Lemenant et M. Bonnivard

- Utilisation d'une **distance géodésique** entre lacets

$$D(u, \gamma_1, \gamma_2) := \inf_{\varphi: \gamma_1 \rightarrow \gamma_2} \int_{\varphi([0,1])} |u|^2 d\mathcal{H}^2,$$



- Modèle de champ de phase qui couple l'énergie de **Cahn-Hilliard-Willmore** avec ce terme de distance géodésique.



Apport des réseaux de neurones

- Nouvel outil de modélisation mathématique :

Identification des lois d'**anisotropie** pour les modèles de croissance cristalline, identification des lois de **mobilité** dans des problèmes de diffusion de surface...

- Nouvel outil de calcul scientifique :

Accélération de la résolution de modèles pour les **flots de Willmore**, développement de schémas numériques efficaces pour des **opérateurs de diffusion anisotrope**...

