# Approximation de flots géométriques d'interfaces : des méthodes de champ de phase aux réseaux de neurones

Simon Masnou

Institut Camille Jordan
Université Claude Bernard Lyon 1

SMAI 2021
10e biennale des mathématiques appliquées et industrielles
La Grande-Motte

# Travaux en collaboration avec


- Elie Bretin (Institut Camille Jordan, INSA Lyon)

et

- Roland Denis (Institut Camille Jordan, CNRS)
- Chih-Kang Huang (Institut Camille Jordan, Univ. Claude Bernard Lyon 1)
- Arnaud Sengers (Institut Camille Jordan, INSA Lyon)
- Garry Terii (Institut Camille Jordan, Univ. Claude Bernard Lyon 1)
- François Dayrens (Institut Camille Jordan, Univ. Claude Bernard Lyon 1)

# Motivation

Many physical systems or engineering models involve interfaces which tend to minimize a geometric energy, involving either the area or the curvatures of interfaces (under various constraints)

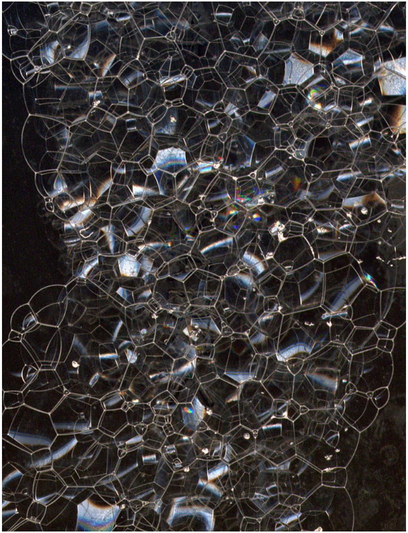
We are interested in the numerical simulation of such systems.

# Examples: Wetting

Droplet wetting on a lotus leaf
(energy = area)

# Bubbles

Bubbles



Soap foam

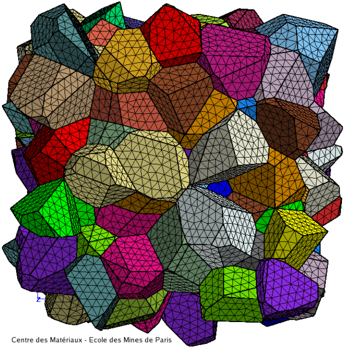
(energy = multiphase area)

# Honeycomb

Honeycomb
(energy = 2D multiphase perimeter)

# Polycrystalline materials


Silicon



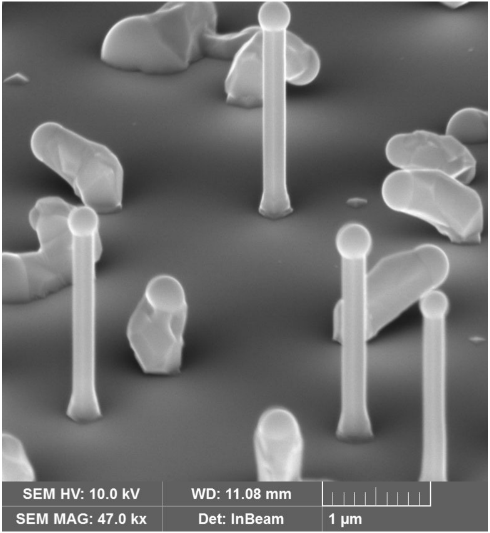

Polycrystalline material

(energy=multiphase inhomogenous area)

$$E(\Sigma_1, \dots, \Sigma_N) = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{N} \sigma_{i,j} \, \mathrm{Area}(\partial\Sigma_i \cap \partial\Sigma_j)$$

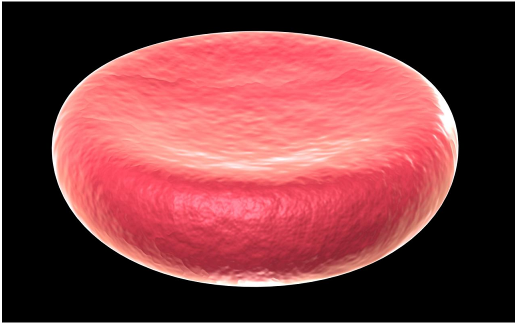
($\sigma_{i,j}$ are surface tensions)

# Nanowires




Nanowires
(energy = multiphase anisotropic area)

# Lipid bilayer



Blood cell

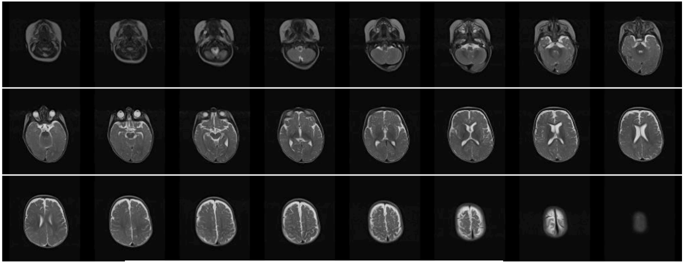
$$(\text{energy} = \text{Helfrich energy} \int (\frac{\kappa}{2}(H - H_0)^2 + \kappa_G K) d\sigma)$$

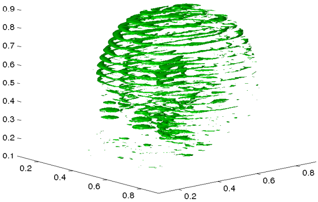
with $H$ = mean curvature, $H_0$ = spontaneous curvature and
$K$ = Gaussian curvature

$$W(S) = \int H^2 d\sigma \quad (-\int K d\sigma)$$ is the Willmore energy.

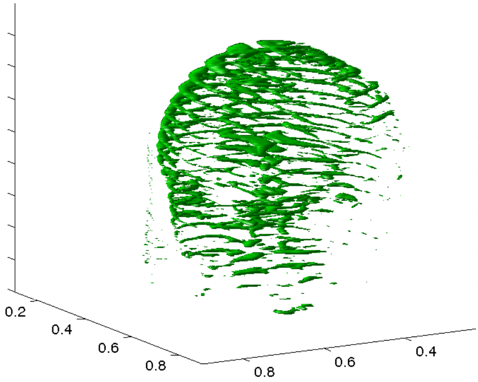
# Magnetic Resonance Imaging (MRI)

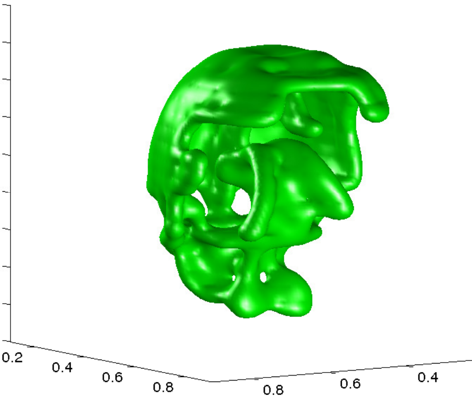
Problem: find a volume containing given slices and having boundary of minimal energy (area or Willmore)





# 3D reconstruction from 2D slices




Reconstruction of a 3D brain image from real MRI slices

# How to approximate the minimizers?

Pick a representation of the surface:

- Parametric "continuous" surface or graph surface
- Level set
- Phase field approximation

and try to minimize the energy, or an approximation of it using either:

- graph methods (e.g, min flow/max cut)
- a static Euler equation
- a time-dependent Euler equation

This talk focuses on phase field approximation and time-dependent Euler equations

# Énergie d'interface de Van der Waals, Cahn & Hilliard

- Van der Waals (1893) : énergie libre d'une interface liquide-vapeur
- Cahn & Hilliard (1958) : séparation des phases dans un mélange binaire

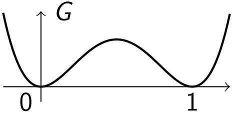
"phase"= composant d'un système inhomogène (ex : eau / huile)
ou fraction volumique de ce composant

Hypothèse commune à Van der Waals, Cahn & Hilliard : on ne passe pas brutalement d'un composant à un autre, la transition est régulière, l'interface est diffuse.

## Énergie de (Van der Waals)-Cahn-Hilliard

$$P_\varepsilon(u) = \int \left( \frac{\varepsilon}{2} |\nabla u|^2 + \frac{1}{\varepsilon} G(u) \right) \mathrm{d}x$$

où $u$ est la fraction volumique d'un des composants
et $G(s) = \frac{1}{2} s^2 (1-s)^2$ est un potentiel double-puits.

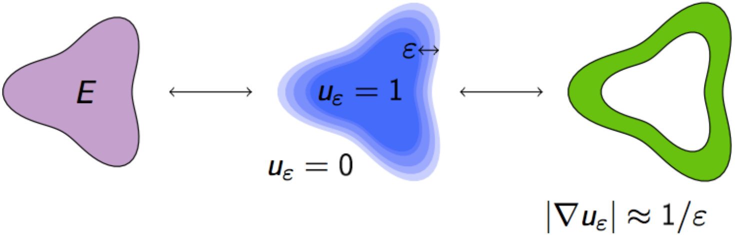


# Phase field approximation

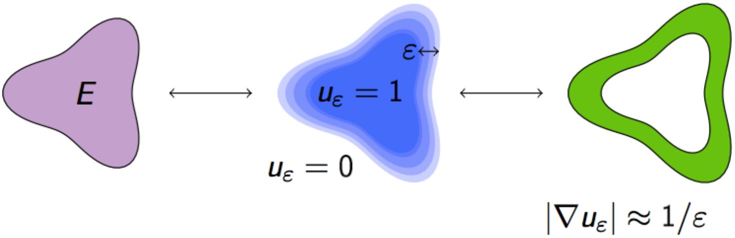
A phase field $u_\varepsilon : \mathbb{R}^d \to [0, 1]$ is a smooth function which approximates the characteristic function $\mathbb{1}_E$ of a set $E$.

The set $\{u_\varepsilon = \frac{1}{2}\}$ is an approximation of the boundary $\partial E$.

The area of $\partial E$ is the perimeter of $E$.



# Perimeter approximation



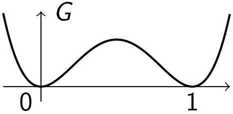

Thus, $\int \varepsilon |\nabla u_\varepsilon|^2 \mathrm{d}x \approx \frac{1}{\varepsilon} \textit{Area} \approx \frac{1}{\varepsilon} \varepsilon P(E) = P(E) \quad$ as $\varepsilon \to 0$.

Minimizing $\int \varepsilon |\nabla u_\varepsilon|^2 \mathrm{d}x$ is not a good idea: any constant function has zero energy...

How to constrain minimizers to be close to a characteristic function?

# Perimeter approximation

Use a double-well potential, for instance $G(s) = \frac{1}{2}s^2(1-s)^2$.



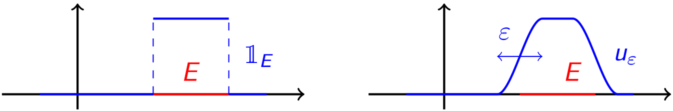

If $\sup_{\varepsilon} \left( \int \frac{1}{\varepsilon} G(u_\varepsilon) \mathrm{d}x \right) < +\infty$ then $u_\varepsilon \to 0$ or $1$ a.e. as $\varepsilon \to 0$, i.e. $u_\varepsilon$ approximates a characteristic function.

# The Cahn-Hilliard functional

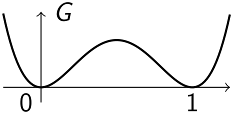
## (Van der Waals)-Cahn-Hilliard energy

The phase-field approximation of perimeter is

$$P_\varepsilon(u) = \int \left( \frac{\varepsilon}{2} |\nabla u|^2 + \frac{1}{\varepsilon} G(u) \right) \mathrm{d}x$$




where $G$ is a double-well potential.




e.g.,

$$G(s) = \frac{1}{2} s^2 (1-s)^2$$

# Phase-field approximation of perimeter

## Convergence of $P_\varepsilon$ (Modica, Mortola - 1977)

$P_\varepsilon$ $\Gamma$-converges to

$$P(u) = \begin{cases} \lambda P(E) & \text{si } u = \mathbb{1}_E \in BV \\ +\infty & \text{otherwise} \end{cases}$$

where $\lambda = cst$ depends only on potential $G$.

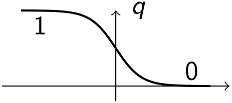
## $\Gamma$-convergence and minimizers

Let $(F_n)$ equicoercive, $\Gamma$-converging to $F$. If, $\forall n$, $u_n$ is a minimizer of $F_n$, then every cluster point $u$ of $(u_n)$ is a minimizer of $F$ and $F(u) = \lim F_n(u_n)$.

# Optimal profile

The phase-field optimal profile associated with $E$ and $P(E)$ is:

$$u_\varepsilon(x) = q\left(\frac{d_s(x,E)}{\varepsilon}\right) \qquad \text{with} \qquad q(s) = \frac{1}{2}(1-\tanh(\frac{s}{2}))$$




### Signed distance

$d_s(x,E) = d(x,E) - d(x,\mathbb{R}^N \setminus E)$

where $q = \text{argmin}_\varphi\{\int_{\mathbb{R}}[\frac{|\varphi'(t)|^2}{2} + G(\varphi(t))]dt,\ \varphi(-\infty)=1,\ \varphi(\infty)=0\}$

### Convergences

For a bounded set $E$

- $u_\varepsilon \to \mathbb{1}_E$
- $P_\varepsilon(u_\varepsilon) \to \lambda P(E)$ if $E$ has finite perimeter

as $\varepsilon \to 0$.

# Phase field approximation of the Willmore energy

The $L^2$-gradient of $P_\varepsilon$ satisfies

$$-\nabla_{L^2} P_\varepsilon(u) = \varepsilon \Delta u - \frac{1}{\varepsilon} G'(u).$$

The gradient flow of perimeter is the mean curvature flow and $-\nabla_{L^2} P_\varepsilon(u_\varepsilon)$ approximates the mean curvature of $\partial E$ in the transition zone of $u_\varepsilon$ when $u_\varepsilon \approx \mathbb{1}_E$.

## Approximation of the Willmore energy

In $\mathbb{R}^2$ and $\mathbb{R}^3$, the energy

$$u \mapsto P_\varepsilon(u) + W_\varepsilon(u) = P_\varepsilon(u) + \int \frac{1}{2\varepsilon} \left( \varepsilon \Delta u - \frac{1}{\varepsilon} G'(u) \right)^2 \mathrm{d}x$$

$\Gamma$-converges to $E \mapsto \lambda(P(E) + W(E))$ if $E$ is $C^2$ and compact

- De Giorgi + Bellettini, Paolini (1993) + Röger, Schätzle (2006)

# Optimal profile

With the same phase-field profile associated with $E$

$$u_\varepsilon(x) = q\left(\frac{1}{\varepsilon} d_s(x, E)\right)$$

one has

## Convergences

For a bounded set $E$

- $u_\varepsilon \to \mathbb{1}_E$
- $P_\varepsilon(u_\varepsilon) \to \lambda P(E)$ if $E$ has finite perimeter
- $W_\varepsilon(u_\varepsilon) \to \lambda W(E)$ if $\partial E$ is $C^2$

as $\varepsilon \to 0$.

# Phase field mean curvature flow: numerical approximation

The $L^2-$gradient flow of the Cahn-Hilliard energy gives the time-dependent Allen-Cahn equation:

$$u_t = \Delta u - \frac{1}{\varepsilon^2} G'(u)$$

Given a time-step $\delta_t$, solutions can be numerically approximated with the scheme

$$\frac{u^{n+1} - u^n}{\delta_t} = \Delta u^{n+1} - \frac{1}{\varepsilon^2} G'(u^{n+1})$$

$u^{n+1}$ can be computed using Picard iterations to find fixed points of the map

$$v \mapsto (I_d - \delta_t \Delta)^{-1} \left[ \left( u^n - \frac{\delta_t}{\varepsilon^2} G'(v) \right) \right]$$

Implementation with Fourier series and periodic boundary conditions, which guarantees a high spatial accuracy.

Video: Allen-Cahn flow

# Phase field Willmore flow: numerical approximation

- The classical phase field Willmore flow is

$$\begin{cases} \partial_t u = \Delta v - \frac{1}{\varepsilon^2} G''(u) v \\ v = \frac{1}{\varepsilon^2} G'(u) - \Delta u. \end{cases}$$

- Implicit discretization in time

$$\begin{cases} u^{n+1} = \delta_t \left[ \Delta v^{n+1} - \frac{1}{\varepsilon^2} G''(u^{n+1}) v^{n+1} \right] + u^n \\ v^{n+1} = \frac{1}{\varepsilon^2} G'(u^{n+1}) - \Delta u^{n+1}, \end{cases}$$

- Use Picard iterations for approximating a fixed point of:

$$\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I_d & -\delta_t \Delta \\ \Delta & I_d \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} u^n - \frac{\delta_t}{\varepsilon^2} G''(u) v \\ \frac{1}{\varepsilon^2} G'(u) \end{pmatrix}$$

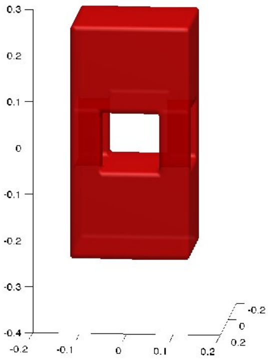
  Implement it with Fourier series in space.

- Stability :

$$\delta_t \leq C \min \left\{ \varepsilon^4, \delta_x^2 \varepsilon^2 \right\}.$$

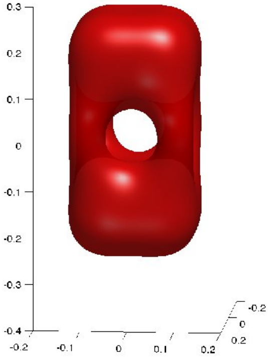
# Phase field Willmore flow

$$\partial_t u = -\Delta\left(\Delta u - \frac{1}{\varepsilon^2}G'(u)\right) + \frac{1}{\varepsilon^2}G''(u)\left(\Delta u - \frac{1}{\varepsilon^2}G'(u)\right),$$



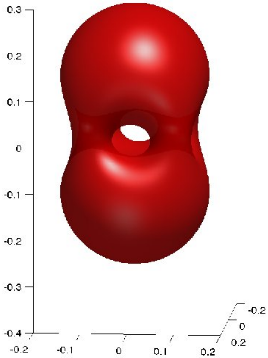
# Phase field Willmore flow

$$\partial_t u = -\Delta\left(\Delta u - \frac{1}{\varepsilon^2}G'(u)\right) + \frac{1}{\varepsilon^2}G''(u)\left(\Delta u - \frac{1}{\varepsilon^2}G'(u)\right),$$



# Phase field Willmore flow

$$\partial_t u = -\Delta\left(\Delta u - \frac{1}{\varepsilon^2}G'(u)\right) + \frac{1}{\varepsilon^2}G''(u)\left(\Delta u - \frac{1}{\varepsilon^2}G'(u)\right),$$



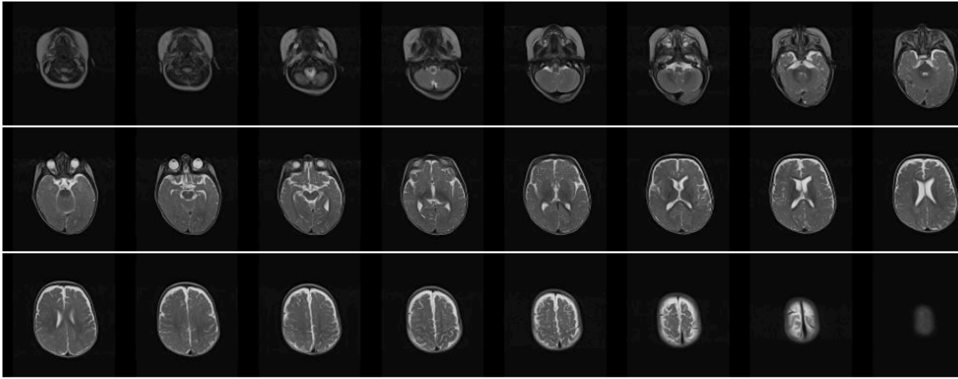

Lawson-Kusner surface of genus 4

# Key aspects of phase field approximation

- Replace singular energies with smooth energies
- $\Gamma$-convergence can be proven
  1. for area: Modica-Mortola'77
  2. for Willmore 2D, 3D: De Giorgi'91 Bellettini-Paolini'93, Röger-Schätzle'06, Nagase-Tonegawa'07
- Smooth minimizers approximate sharp minimizers
- Efficient numerical schemes can be designed
- Do phase field flows approximate sharp flows? (as long as they are smooth)
  1. for area: well-posedness, convergence $\longrightarrow$ YES [Chen'92, de Mottini-Schatzman'95, Bellettini-Paolini'95]
  2. for Willmore:
     - ⋆ well-posedness (YES [Colli-Laurençot'12], [Bretin-Huang-M.'19]),
     - ⋆ convergence (formally YES [Loreti-March'00, Bretin-M.-Oudet'17], rigorously YES [Fei-Liu'19])
       Willmore flow: $V_n = \Delta_S H + |A|^2 H - \frac{1}{2} H^3$ where $|A|^2 = \sum \kappa_i^2$.

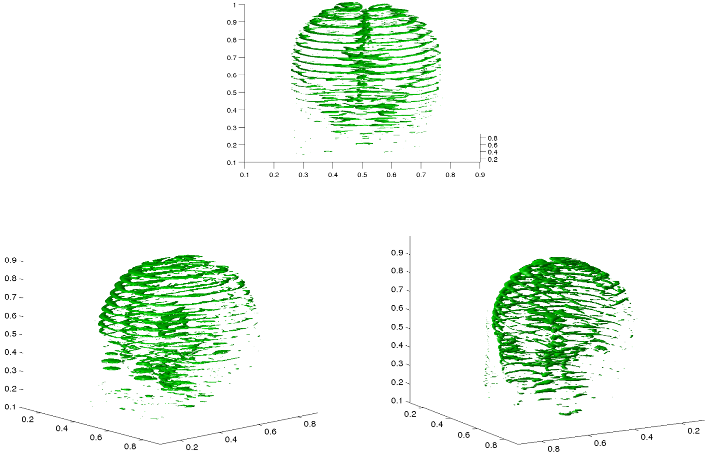
# Application 1 : reconstruction de volume sous contrainte de coupes

Collaboration avec E. Bretin et F. Dayrens

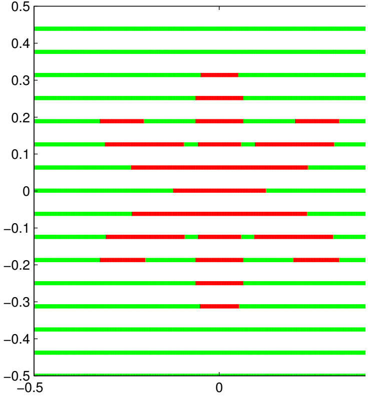


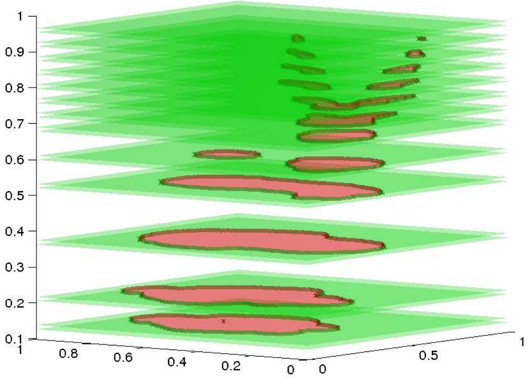
Problème récurrent en imagerie médicale (IRM, tomographie) et en géométrie computationnelle : comment reconstruire un volume à partir de coupes (ou plus généralement à partir de données partielles) ?

# Motivation


1
0.9
0.8
0.7
0.6
0.5
0.4
0.3
0.2
0.1
0.1 0.2 0.3 0.4 0.5 0.6 0.7 0.8 0.9
0.8
0.6
0.4
0.2
0.9
0.8
0.7
0.6
0.5
0.4
0.3
0.2
0.1
0.2 0.4 0.6 0.8
0.2 0.4 0.6 0.8
0.9
0.8
0.7
0.6
0.5
0.4
0.3
0.2
0.1
0.2 0.4 0.6 0.8
0.8 0.6 0.4 0.2

# Formulation avec contraintes intérieures / extérieures



# Contraintes d'inclusion-exclusion

Soit $\omega^{int}$ et $\omega^{ext}$ deux ensembles de $\mathbb{R}^N$

## Problème d'optimisation géométrique

$$\min\{J(E) \mid \omega^{int} \subset E \subset \mathbb{R}^N \setminus \omega^{ext}\}$$

où $J$ est soit le périmètre $P$, soit l'énergie de Willmore $W$

On définit des contraintes d'obstacle :

$$u_\varepsilon^{int}(x) = q\left(\frac{1}{\varepsilon} d_s(x, \omega^{int})\right) \quad \text{et} \quad u_\varepsilon^{ext}(x) = 1 - q\left(\frac{1}{\varepsilon} d_s(x, \omega^{ext})\right)$$

## Propriété clef

$$\omega^{int} \subset E \subset \mathbb{R}^N \setminus \omega^{ext} \qquad \Longleftrightarrow \qquad u_\varepsilon^{int} \leqslant u_\varepsilon \leqslant u_\varepsilon^{ext}$$

Dans l'approximation champ de phase, les contraintes se traduisent en un problème d'obstacle linéaire !

# Schéma numérique pour le périmètre

## Approximation de la solution du problème

$$\min\{P_\varepsilon(u) \mid u_\varepsilon^{int} \leqslant u \leqslant u_\varepsilon^{ext}\}$$

- On initialise $u_0$;
- Connaissant $u^n$ on trouve $u^{n+1/2}$ par une méthode de splitting pour réaliser un pas du flot gradient $L^2$ de $P_\varepsilon$

$$\partial_t u = \varepsilon \Delta u - \frac{1}{\varepsilon} G'(u) \qquad \text{(équation d'Allen-Cahn)}$$

- On obtient $u^{n+1}$ à partir de $u^{n+1/2}$ en projetant sur les contraintes

$$u_\varepsilon^{int} \leqslant u \leqslant u_\varepsilon^{ext}$$

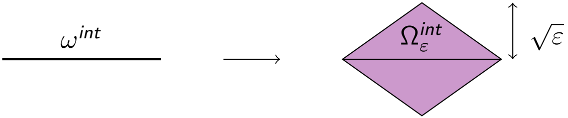
# Code matlab

```
%%%%%%%%%%%%%% Parameters  %%%%%%%%%%%%%%%%
epsilon = 2/N;
T =1;
delta_t = 1/N^2;
%%%%%%%%%%%%%% Heat Kernel %%%%%%%%%%%%%%%%%%
 K1  = ones(N,1)*[0:N/2,-N/2+1:-1];
 M = 1./(1+4*pi^2*delta_t*(K1.^2 + K1'.^2));
%%%%%%%%%%%%%% Minimization scheme %%%%%%%%%%%%
 for n=1:T/delta_t,
  U = U1_0;
  U1_0_fourier = fft2(U1_0);
  res = 1;

  %%%%%%%% fixed point iteration %%%%%%%%%%%%
  while res > 10^(-4),
  U_plus = ifft2( M.*(U1_0_fourier - delta_t/epsilon^2*fft2(U.*(U-1).*(2*U-1))));
  U_plus = max(min(1-U2,U_plus),U1);
  res = norm((U_plus-U));
  U = U_plus;
  end
  U1_0 = U;

end
```

et même principe pour Willmore !

# Contraintes épaissies et Γ-convergence

On épaissit les contraintes pour leur donner du volume



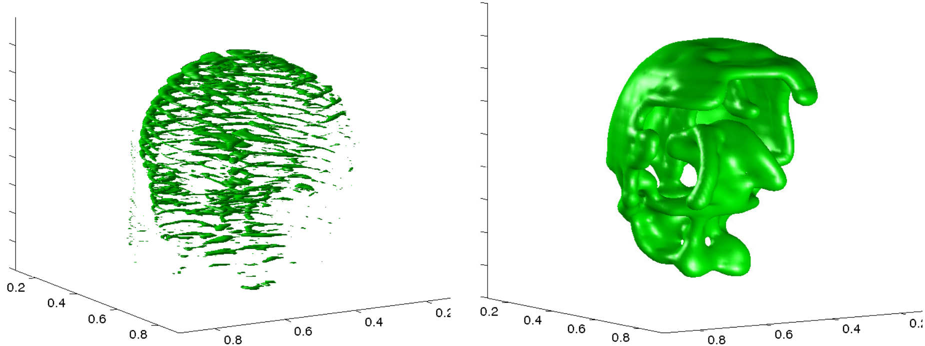

La fonction $U_\varepsilon^{int}(x) = q\left(\frac{1}{\varepsilon} d_s(x, \Omega_\varepsilon^{int})\right)$ est à valeurs dans $[0, 1]$.

**Théorème** (Bretin, Dayrens, M.)

L'énergie $P_{2,\varepsilon} : u \mapsto \begin{cases} P_\varepsilon(u) & \text{si } U_\varepsilon^{int} \leqslant u \leqslant U_\varepsilon^{ext} \\ +\infty & \text{sinon} \end{cases}$ Γ-converge lorsque $\varepsilon \to 0$ vers $F_2 : \mathbb{1}_E \mapsto \lambda P(E) +$ terme de pénalisation des erreurs de contrainte

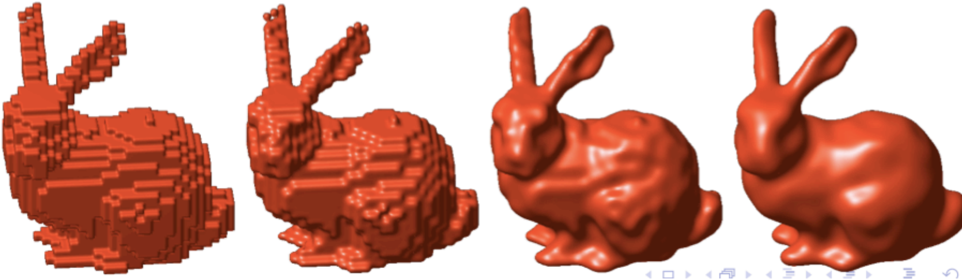
- Les ensembles minimaux de $F_2$ satisfont les contraintes d'inclusion-exclusion (dans les cas raisonnables)
- La caractérisation de la Γ-limite pour l'énergie de Willmore est délicate en raison de son caractère non local et des parties fantômes.

# Reconstruction 3D avec l'énergie de Willmore

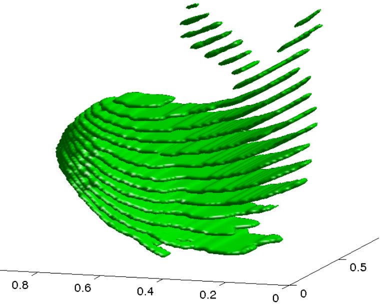


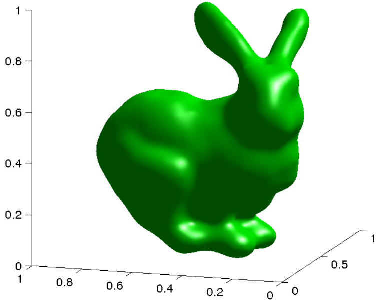

Reconstruction d'une image 3D de cerveau à partir de coupes réelles IRM

# Adaptable à la régularisation de surfaces pixellisées

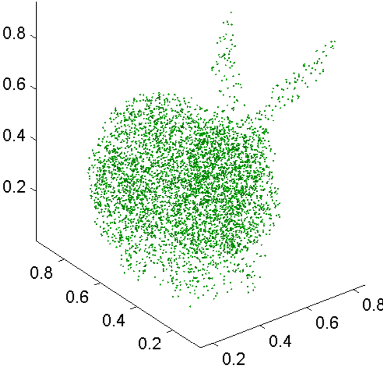


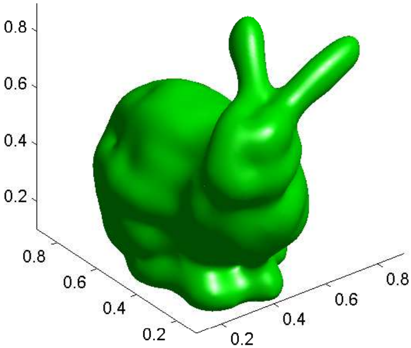
# Autres “coupes”



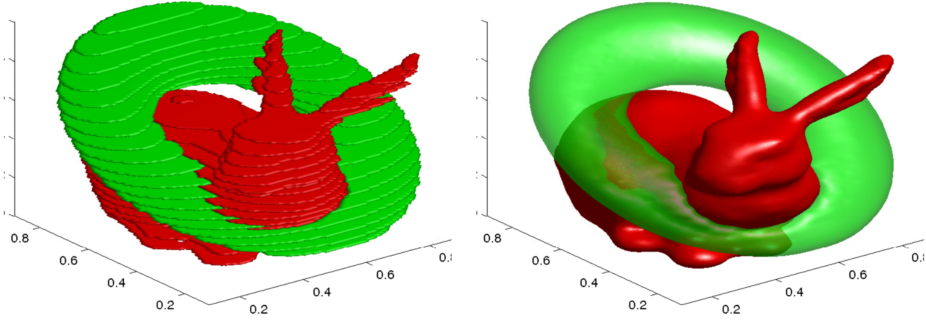



# Autres “coupes”



# Reconstruction conjointe de plusieurs domaines

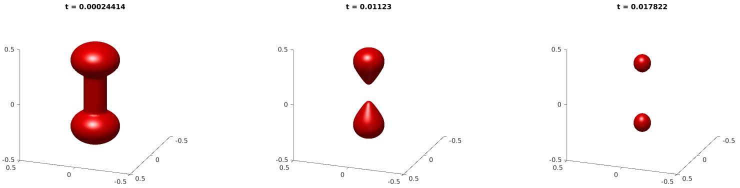



Deux domaines disjoints

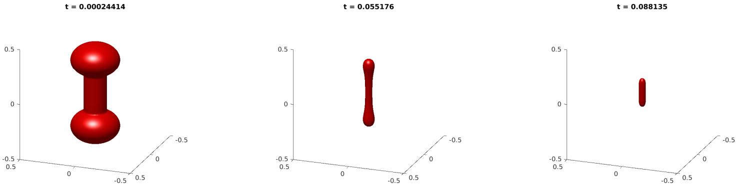
# Application 2 : flot de courbure moyenne avec auto-évitement (cf. exposé de C.-K. Huang)

Collaboration avec E. Bretin, C. K. Huang

**Flot classique**



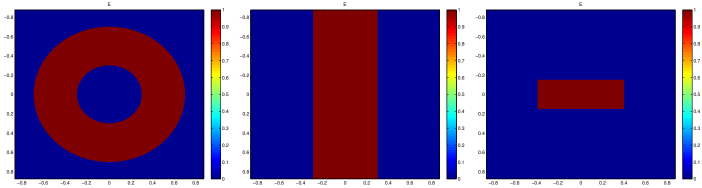

**Flot avec auto-évitement**



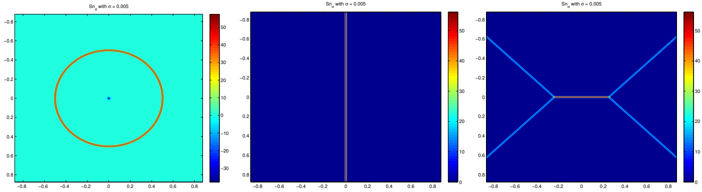
# Utilisation du squelette

Squelette = ensemble singulier de la fonction distance signée, i.e. là où elle n'est pas différentiable.

**Des ensembles...**




**et leurs squelettes**



# Localisation du squelette d'un ensemble $E$ en utilisant un terme de saut

- On considère le champ de normales associé à la fonction distance signée

$$n = \nabla \operatorname{dist}(\cdot, E)$$

- Soit $k$ un noyau régularisant, soit $\sigma > 0$, $k^\sigma = \frac{1}{\sigma^N} k\left(\frac{\cdot}{\sigma}\right)$ et

$$n^\sigma = k^\sigma * n$$

  On définit le *terme de saut* (régularisé) $Sn^\sigma$ de $n$ comme

$$Sn^\sigma = \langle n^\sigma, (\nabla n^\sigma) n^\sigma \rangle = \sum_{1 \leq i,j \leq N} n_i^\sigma (\partial_j n_i^\sigma) n_j^\sigma$$

- $\lim_{\sigma \to 0} Sn^\sigma \to 0$ aux points où $n$ est régulier.
  Que dire là où il ne l'est pas ? Est-ce que $\lim_{\sigma \to 0} Sn^\sigma$ charge les singularités de $n$, donc son squelette ?

# Limite du terme de saut régularisé

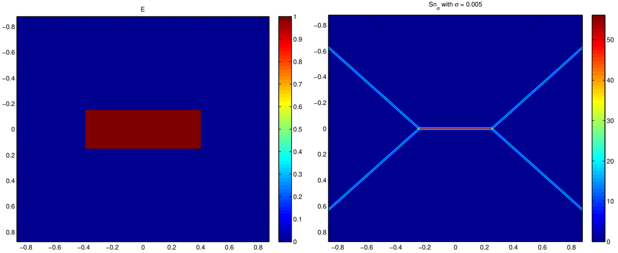
$\mathrm{SBV} =$ espace des fonctions spéciales à variation bornée

## Théorème (Bretin, Huang, M.)

*Soit $n \in SBV(\mathbb{R}^N, S^{N-1})$ tel que son ensemble de discontinuité $\Sigma$ soit $C^1$ et orienté par un vecteur normal unitaire $\nu$. Alors*

$$Sn^\sigma \to \frac{1}{12}|[n]|^2 \langle [n], \nu \rangle \, \mathcal{H}^{N-1} \llcorner \Sigma \qquad \textit{quand } \sigma \to 0, \tag{1}$$

*où $[n]$ désigne le saut de $n$.*



# Équation d'Allen-Cahn avec pénalisation topologique

- On considère l'équation d'Allen-Cahn avec un terme de réaction supplémentaire :

$$\partial_t u^\varepsilon = \Delta u^\varepsilon - \frac{G'(u^\varepsilon)}{\varepsilon^2}(1 + f^\sigma_{u^\varepsilon}),$$

  où

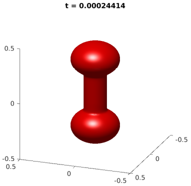
$$f^\sigma_{u^\varepsilon} = c(k^\sigma * |Sn^\sigma_{u^\varepsilon}|), \quad \text{et} \quad n^\sigma_{u^\varepsilon} = k^\sigma * \frac{\nabla u^\varepsilon}{|\nabla u^\varepsilon|}.$$

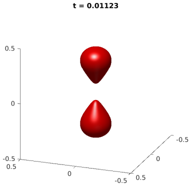
- Schéma numérique : on utilise une approche quasi-statique. On définit $u^{n+1} = v(\cdot, \delta t)$ où $v$ est une solution de

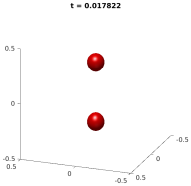
$$\begin{cases} \partial_t v & = \Delta v - \frac{G'(v)}{\varepsilon^2}(1 + f^\sigma_{u^n}) \\ v(\cdot, 0) & = u^n \end{cases}$$

# Exemple numérique : l'haltère

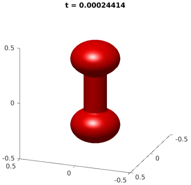
## Sans terme de saut :

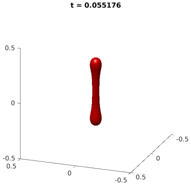


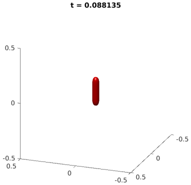




## Avec terme de saut :



# Evolution de filaments

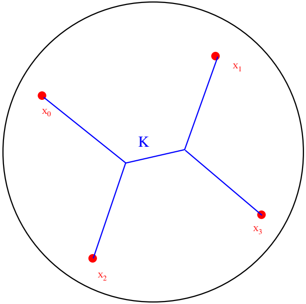
$\boxed{\text{Vidéo: évolution d'un filament \#1}}$

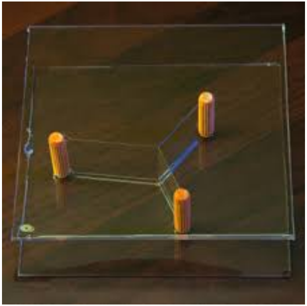
$\boxed{\text{Vidéo: évolution d'un filament \#2}}$

$\boxed{\text{Vidéo: évolution d'un filament \#3 (avec contrainte réduite)}}$

# Application au problème de Steiner

Problème de Steiner : trouver, pour un ensemble donné de points $x_0, \cdots, x_N$, un ensemble compact connexe $K$ contenant tous les $x_i$ et de longueur minimale



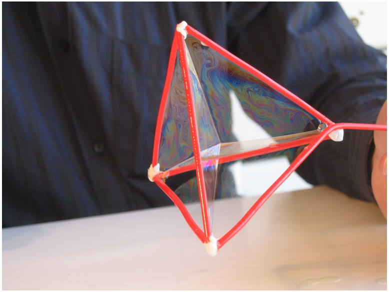
Certains modèles champ de phase ont été récemment introduits pour approcher des solutions des problèmes de Steiner ou de Plateau [Bonnivard-Lemenant-Santambrogio],[Chambolle-Ferrari-Merlet], [Bonafini-Orlandi-Oudet], [Bonnivard-Bretin-Lemenant]

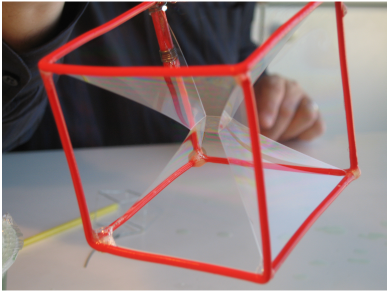
# Ensembles de Steiner

$\boxed{\text{Vidéo : ensemble de Steiner \#1}}$

$\boxed{\text{Vidéo : ensemble de Steiner \#2}}$

# Films de savon : problème de Plateau





# Surfaces minimales

Vidéo: solution approchée de Plateau #1

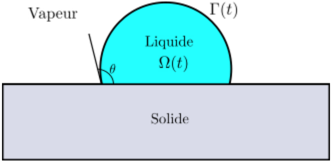
Vidéo: solution approchée de Plateau #2

# Un résultat hybride...

Vidéo: un résultat hybride...

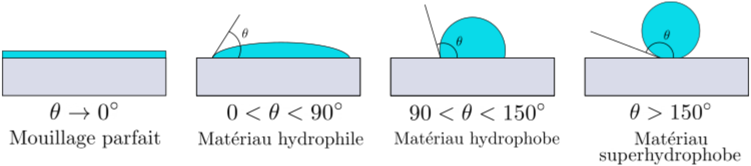
# Application 3 : diffusion de surface multiphasique (cf. exposé d'A. Sengers)

Collaboration avec E. Bretin, R. Denis, A. Sengers et G. Terii




## Loi de Young

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



# Loi d'évolution. Formulation biphasique

## Diffusion de surface

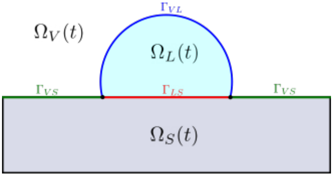
$$V(t) = \Delta_{\Gamma(t)} H(t)$$

- Minimisation du périmètre
- Flot de gradient $H^{-1}$ du périmètre
- Conservation locale de la masse

Comment éviter de traiter explicitement l'angle de contact ?

# Loi d'évolution. Formulation multiphase

$$E = \sigma_{SV}\text{Aire}(\Gamma_{SV}) + \sigma_{LS}\text{Aire}(\Gamma_{LS}) + \sigma_{VL}\text{Aire}(\Gamma_{VL})$$
$$= \frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{L} \sigma_{ij}\text{Aire}(\Gamma_{ij}) \qquad \text{Cas général à } L \text{ phases}$$




## Diffusion de surface. Version multiphase

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

# Nouveau modèle de Cahn-Hilliard d'ordre 2

Dérivation du flot de gradient $H^{-1}$ selon la structure induite par

$$< f, g >_{H_0^1} = \int M \nabla (N f) \cdot \nabla (N g) \, dx$$

où l'on introduit une dépendance en $u$ dans les mobilités $M$ et $N$.

## Système de Cahn-Hilliard avec deux mobilités

$$(\textbf{NMN-CH}) : \begin{cases} \varepsilon^2 \partial_t u = N(u) \operatorname{div} \left( M(u) \nabla \left( N(u) \mu \right) \right) \\ \mu = W'(u) - \varepsilon^2 \Delta u \end{cases}$$

avec $W(s) = \frac{s^2(1-s)^2}{2}$, $M(s) = s^2(1-s)^2$, $N(s) = \frac{1}{\sqrt{M(s)}}$.

## Propriétés du modèle

- Il est variationnel
- Il conserve la masse

# Comportement asymptotique

- Il est d'ordre 2 !

## Propriétés du modèle (**NMN-CH**)

$$\begin{cases} u_\varepsilon(x,t) = q\left(\dfrac{d(x,\Omega(t))}{\varepsilon}\right) + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \\ V_\varepsilon = \Delta_{\Gamma(t)} H(t) + \mathcal{O}(\varepsilon) \\ Vol(\Omega(t)) = Vol(\Omega(0)) + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \end{cases}$$

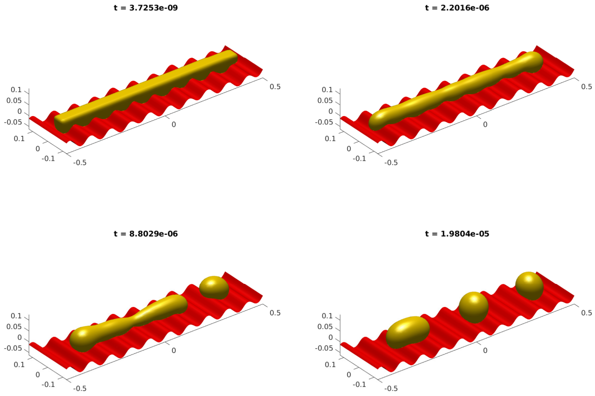
# Extensions et schéma numérique

- Extension au multiphase (cf. exposé d'A. Sengers)
- Schéma numérique efficace basé sur un splitting convexe-concave

# Application au mouillage

## Avantage de la méthode

Pas besoin de gérer l'angle de contact avec des conditions aux bords.

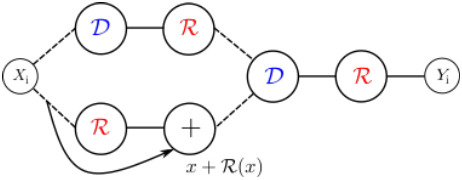


# Utilisation de réseaux de neurones (cf. exposé de G. Terii)

Collaboration avec E. Bretin, R. Denis et G. Terii

Objectifs :

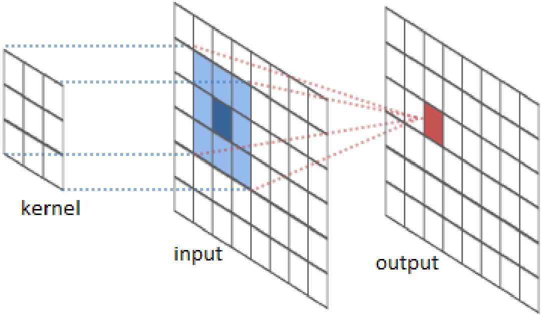
- Obtenir une méthode numérique plus rapide et plus précise.
- Traiter des cas pour lesquels la méthode champ de phase n'est pas adaptée (surfaces non orientées, surfaces à bord, ensembles de codimension $\geq 2$)
- Apprendre un flot géométrique et ses propriétés à partir d'observations



# Approximation par réseau de neurones : construction

On s'inspire du splitting de la méthode champ de phase et on construit un réseau $S$ obtenu comme composition d'un réseau convolutif ($\mathcal{D}$) et d'un perceptron multicouche ($\mathcal{R}$) utilisant des exponentielles $s \mapsto e^{-s^2}$.

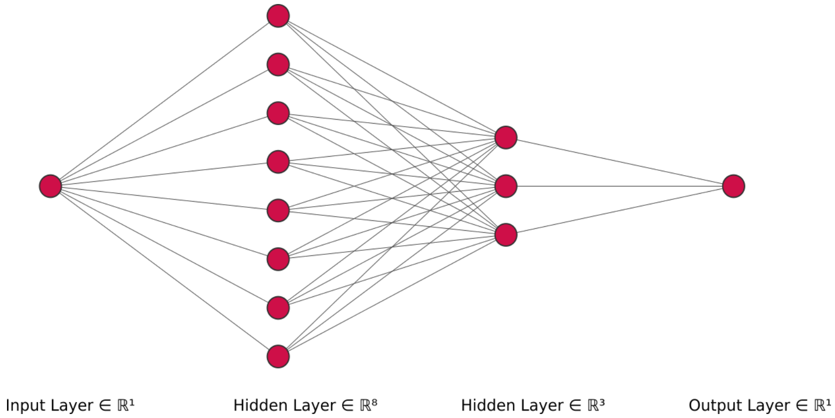
Réseau de Convolution: $u^{n+1} = \mathcal{D}u^n = K * u^n$.



# Approximation par réseau de neurones : construction

On s'inspire du splitting de la méthode champ de phase et on construit un réseau $S$ obtenu comme composition d'un réseau convolutif ($\mathcal{D}$) et d'un perceptron multicouche ($\mathcal{R}$) utilisant des exponentielles $s \mapsto e^{-s^2}$.

Perceptron multicouche: $u^{n+1} = \mathcal{R} u^n$.



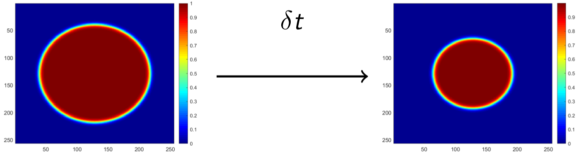
# Base de données et apprentissage

Données labellisées: On fixe $\varepsilon$ et $\delta t$.

$$(X_i, Y_i) = \left( q\left(\frac{d(.,\Omega_i(0))}{\varepsilon}\right), q\left(\frac{d(.,\Omega_i(\delta t))}{\varepsilon}\right) \right), \; i = 1, \ldots, N$$

où $\Omega_i(t)$ est un cercle de rayon $R_i(t) = \sqrt{r_i - 2t}$.

$X_i$ $\qquad\qquad$ $\delta t$ $\qquad\qquad$ $Y_i$



Apprentissage sur le risque empirique: Pour un réseau $S_\theta$ paramétré par $\theta$,

$$\inf_\theta \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \|S_\theta(X_i) - Y_i\|_{L^2}^2$$

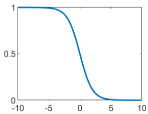
Implémentation à l'aide de la bibliothèque Pytorch avec $N = 100$

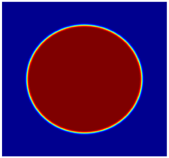
Schéma numérique rapide et plus précis que le schéma champ de phase

# Extension aux surfaces à bord, aux surfaces non orientables

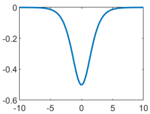
On utilise le même réseau mais on change la base d'entraînement.

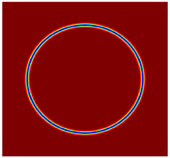
$q$ $\qquad$ $q(\frac{d(\cdot)}{\varepsilon})$ $\qquad\qquad$ $q'$ $\qquad$ $q'(\frac{d(\cdot)}{\varepsilon})$

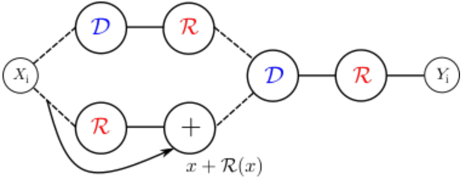


$\longrightarrow$





# Exemples numériques

Il n'existe pas de méthode champ de phase permettant d'approcher correctement l'évolution de $q'$ : la généralisation que permet l'approche par réseau est donc particulièrement intéressante.

$\boxed{\text{Partition 2D (sans apprendre les points triples !)}}$

$\boxed{\text{Surface minimale}}$

$\boxed{\text{Ruban de Möbius}}$

# Perspectives

- Qu'a-t-on appris ? Que représentent les $\mathcal{D}$ et $\mathcal{R}$ après apprentissage ?
- Peut-on prouver des résultats d'approximation ?
- Autres flots : Willmore, diffusion de surface, avec ou sans anisotropie, etc.
- Peut-on éviter les réseaux spécialisés ? Y a-t-il des réseaux "généralistes" ?
- Apprentissage de flots réels à partir de séquences d'images (exemple : développement du cerveau, propagation de fronts, etc.)