

Simulation multi-label phase-field

projet ANR DigitalSnow

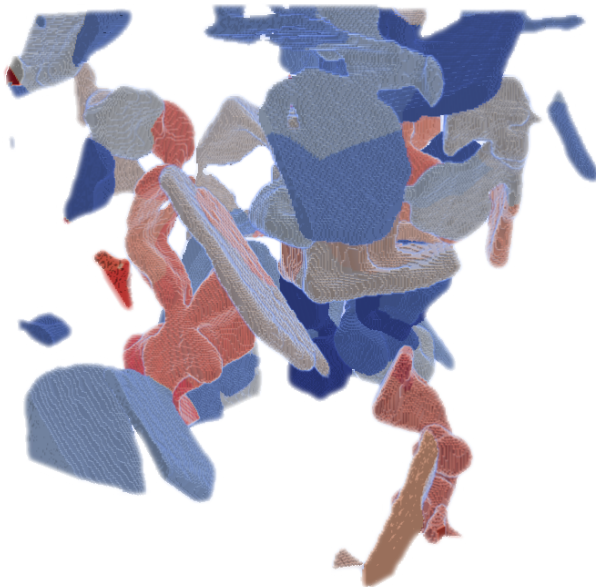
Roland DENIS

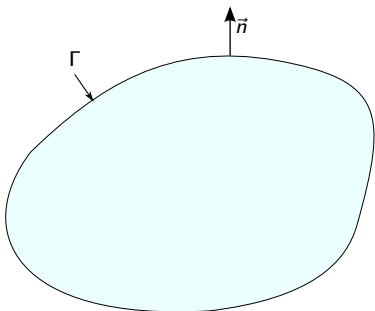
Université Savoie Mont Blanc

Journées DigitalSnow – 08 Juillet 2015

- 1 Modélisation phase-field de la croissance cristalline
- 2 Simulation de la métamorphose de la neige
- 3 Implantation
- 4 Applications

Métamorphose de blocs de neige





Level-Set

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

avec $\varphi(x, 0) = \text{dist}(x, \Gamma(0))$.

Propriétés géométriques de la fonction distance

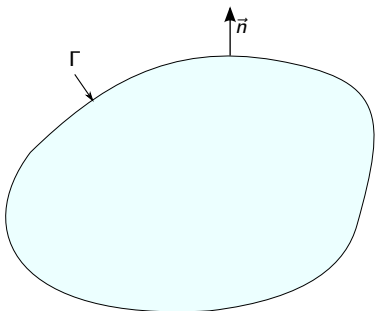
$$d(x, t) := \text{dist}(x, \Gamma(t))$$

Si $\Gamma(t)$ est de classe \mathcal{C}^2 :

- $\vec{n}(x, t) = \nabla d(x, t)$ sur $\Gamma(t)$,
- $K(x, t) = \Delta d(x, t)$ sur $\Gamma(t)$.

Dynamique de l'interface

$$\frac{\partial}{\partial t} d(x, t) = -v_n = C \frac{\rho_{v0} - \rho_{vs0} (1 + \delta_0 \Delta d(x, t))}{\rho_{ice}}$$



Level-Set

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

avec $\varphi(x, 0) = \text{dist}(x, \Gamma(0))$.

Propriétés géométriques de la fonction distance

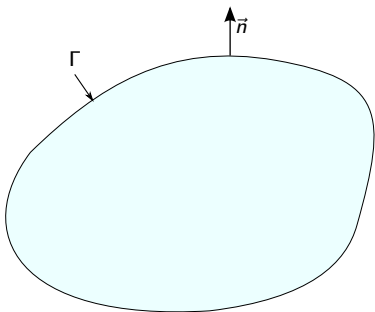
$$d(x, t) := \text{dist}(x, \Gamma(t))$$

Si $\Gamma(t)$ est de classe \mathcal{C}^2 :

- $\vec{n}(x, t) = \nabla d(x, t)$ sur $\Gamma(t)$,
- $K(x, t) = \Delta d(x, t)$ sur $\Gamma(t)$.

Dynamique de l'interface

$$\frac{\partial}{\partial t} d(x, t) = -v_n = C \frac{\rho_{v0} - \rho_{vs0} (1 + \delta_0 \Delta d(x, t))}{\rho_{ice}}$$



Level-Set

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

avec $\varphi(x, 0) = \text{dist}(x, \Gamma(0))$.

Propriétés géométriques de la fonction distance

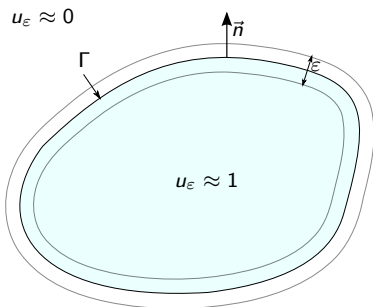
$$d(x, t) := \text{dist}(x, \Gamma(t))$$

Si $\Gamma(t)$ est de classe \mathcal{C}^2 :

- $\vec{n}(x, t) = \nabla d(x, t)$ sur $\Gamma(t)$,
- $K(x, t) = \Delta d(x, t)$ sur $\Gamma(t)$.

Dynamique de l'interface

$$\frac{\partial}{\partial t} d(x, t) = -v_n = C \frac{\rho_{v0} - \rho_{vs0} (1 + \delta_0 \Delta d(x, t))}{\rho_{ice}}$$



Champ de phase

$$u_\epsilon(x, t) := q\left(\frac{d(x, t)}{\epsilon}\right)$$

$$\text{avec } q(s) := \frac{1}{2} \left(1 - \tanh\left(\frac{s}{2}\right)\right).$$

Interface

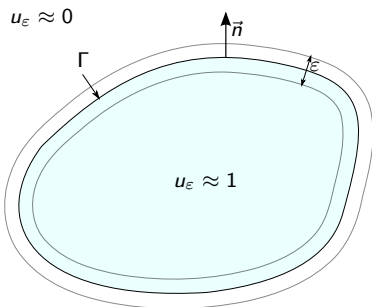
$$\Gamma(t) = \left\{x ; u_\epsilon(x, t) = \frac{1}{2}\right\}$$

Profil et potentiel double-puits

$$\min \left\{ \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\frac{1}{2} |\gamma'(s)|^2 + W(\gamma(s)) \right] ds ; \gamma(-\infty) = 0, \gamma(0) = \frac{1}{2}, \gamma(\infty) = 1 \right\}$$

$$\text{avec } W(s) := \frac{1}{2} s^2 (1-s)^2.$$

$$\bullet \quad q'(s) = -\sqrt{2W(q(s))}, \quad q''(s) = W'(q(s)).$$



Champ de phase

$$u_\epsilon(x, t) := q\left(\frac{d(x, t)}{\epsilon}\right)$$

$$\text{avec } q(s) := \frac{1}{2} \left(1 - \tanh\left(\frac{s}{2}\right)\right).$$

Interface

$$\Gamma(t) = \left\{x ; u_\epsilon(x, t) = \frac{1}{2}\right\}$$

Profil et potentiel double-puits

$$\min \left\{ \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\frac{1}{2} |\gamma'(s)|^2 + W(\gamma(s)) \right] ds ; \gamma(-\infty) = 0, \gamma(0) = \frac{1}{2}, \gamma(\infty) = 1 \right\}$$

$$\text{avec } W(s) := \frac{1}{2} s^2 (1-s)^2.$$

$$\bullet \quad q'(s) = -\sqrt{2W(q(s))}, \quad q''(s) = W'(q(s)).$$

Dérivation

$$u_\varepsilon(x, t) := q \left(\frac{d(x, t)}{\varepsilon} \right)$$

$$\frac{\partial u_\varepsilon}{\partial t}(x, t) = \frac{1}{\varepsilon} q' \left(\frac{d}{\varepsilon} \right) \frac{\partial d}{\partial t}(x, t)$$

$$\nabla u_\varepsilon(x, t) = \frac{1}{\varepsilon} q' \left(\frac{d}{\varepsilon} \right) \nabla d(x, t)$$

$$\Delta u_\varepsilon(x, t) = \frac{1}{\varepsilon^2} q'' \left(\frac{d}{\varepsilon} \right) + \frac{1}{\varepsilon} q' \left(\frac{d}{\varepsilon} \right) \Delta d(x, t)$$

Équation d'évolution du champ de phase

$$\frac{\partial u_\varepsilon}{\partial t}(x, t) = \delta_0 C \frac{\rho_{vs0}}{\rho_{ice}} \left(\Delta u_\varepsilon(x, t) - \frac{1}{\varepsilon^2} W'(u_\varepsilon) \right) + C \frac{\rho_{v0} - \rho_{vs0}}{\rho_{ice}} \frac{1}{\varepsilon} \sqrt{2W(u_\varepsilon)}$$

Équation d'évolution pour N grains

$$\frac{\partial u_{\varepsilon,i}}{\partial t}(x, t) = \delta_0 C \frac{\rho_{vs0}}{\rho_{ice}} \left(\Delta u_{\varepsilon,i}(x, t) - \frac{1}{\varepsilon^2} W'(u_{\varepsilon,i}) \right) + C \frac{\rho_{v0} - \rho_{vs0}}{\rho_{ice}} \frac{1}{\varepsilon} \sqrt{2W(u_{\varepsilon,i})}, \quad i = 1, \dots, N$$

Dérivation

$$u_\varepsilon(x, t) := q \left(\frac{d(x, t)}{\varepsilon} \right)$$

$$\frac{\partial u_\varepsilon}{\partial t}(x, t) = \frac{1}{\varepsilon} q' \left(\frac{d}{\varepsilon} \right) \frac{\partial d}{\partial t}(x, t)$$

$$\nabla u_\varepsilon(x, t) = \frac{1}{\varepsilon} q' \left(\frac{d}{\varepsilon} \right) \nabla d(x, t)$$

$$\Delta u_\varepsilon(x, t) = \frac{1}{\varepsilon^2} q'' \left(\frac{d}{\varepsilon} \right) + \frac{1}{\varepsilon} q' \left(\frac{d}{\varepsilon} \right) \Delta d(x, t)$$

Équation d'évolution du champ de phase

$$\frac{\partial u_\varepsilon}{\partial t}(x, t) = \delta_0 C \frac{\rho_{vs0}}{\rho_{ice}} \left(\Delta u_\varepsilon(x, t) - \frac{1}{\varepsilon^2} W'(u_\varepsilon) \right) + C \frac{\rho_{v0} - \rho_{vs0}}{\rho_{ice}} \frac{1}{\varepsilon} \sqrt{2W(u_\varepsilon)}$$

Équation d'évolution pour N grains

$$\frac{\partial u_{\varepsilon,i}}{\partial t}(x, t) = \delta_0 C \frac{\rho_{vs0}}{\rho_{ice}} \left(\Delta u_{\varepsilon,i}(x, t) - \frac{1}{\varepsilon^2} W'(u_{\varepsilon,i}) \right) + C \frac{\rho_{v0} - \rho_{vs0}}{\rho_{ice}} \frac{1}{\varepsilon} \sqrt{2W(u_{\varepsilon,i})}, \quad i = 1, \dots, N$$

Dérivation

$$u_\varepsilon(x, t) := q \left(\frac{d(x, t)}{\varepsilon} \right)$$

$$\frac{\partial u_\varepsilon}{\partial t}(x, t) = \frac{1}{\varepsilon} q' \left(\frac{d}{\varepsilon} \right) \frac{\partial d}{\partial t}(x, t)$$

$$\nabla u_\varepsilon(x, t) = \frac{1}{\varepsilon} q' \left(\frac{d}{\varepsilon} \right) \nabla d(x, t)$$

$$\Delta u_\varepsilon(x, t) = \frac{1}{\varepsilon^2} q'' \left(\frac{d}{\varepsilon} \right) + \frac{1}{\varepsilon} q' \left(\frac{d}{\varepsilon} \right) \Delta d(x, t)$$

Équation d'évolution du champ de phase

$$\frac{\partial u_\varepsilon}{\partial t}(x, t) = \delta_0 C \frac{\rho_{vs0}}{\rho_{ice}} \left(\Delta u_\varepsilon(x, t) - \frac{1}{\varepsilon^2} W'(u_\varepsilon) \right) + C \frac{\rho_{v0} - \rho_{vs0}}{\rho_{ice}} \frac{1}{\varepsilon} \sqrt{2W(u_\varepsilon)}$$

Équation d'évolution pour N grains

$$\frac{\partial u_{\varepsilon,i}}{\partial t}(x, t) = \delta_0 C \frac{\rho_{vs0}}{\rho_{ice}} \left(\Delta u_{\varepsilon,i}(x, t) - \frac{1}{\varepsilon^2} W'(u_{\varepsilon,i}) \right) + C \frac{\rho_{v0} - \rho_{vs0}}{\rho_{ice}} \frac{1}{\varepsilon} \sqrt{2W(u_{\varepsilon,i})}, \quad i = 1, \dots, N$$

Simplification $\rho_{v0} = \rho_{vs0}$

$$\frac{\partial u_i}{\partial t}(x, t) = \delta_0 C \frac{\rho_{vs0}}{\rho_{ice}} \left(\Delta u_i(x, t) - \frac{1}{\varepsilon^2} W'(u_i) \right), \quad i = 1, \dots, N \quad (1)$$

Propriétés attendues

- ① Conservation du volume de chaque grain : $V_i(t) := \int_{\Omega} u_i(x, t) dx \equiv V(0), \quad \forall i = 1, \dots, N,$
- ② Non-chevauchement des grains : $\sum_i u_i(x, t) = 1, \quad \forall x \in \Omega.$

Multiplicateur de Lagrange

$$\frac{\partial u_i}{\partial t}(x, t) = \Delta u_i(x, t) - \frac{1}{\varepsilon^2} W(u_i(x, t)) + \mu_i \sqrt{2W(u_i(x, t))} + \lambda(x) \quad (2)$$

- ① $\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} u_i(x, t) dx = 0, \quad \forall i,$
 - ② $\sum_i u_i(x, t) = 1, \quad \forall x \in \Omega \iff \frac{\partial}{\partial t} \sum_i u_i(x, t) = 0, \quad \text{si } \sum_i u_i(x, t_0) = 1$
- \implies système linéaire sur μ_i à résoudre.

Simplification $\rho_{v0} = \rho_{vs0} \Leftrightarrow$ Allen-Cahn

$$\frac{\partial u_i}{\partial t}(x, t) = \Delta u_i(x, t) - \frac{1}{\varepsilon^2} W'(u_i), \quad i = 1, \dots, N \quad (1)$$

Propriétés attendues

- ① Conservation du volume de chaque grain : $V_i(t) := \int_{\Omega} u_i(x, t) dx \equiv V(0), \quad \forall i = 1, \dots, N,$
- ② Non-chevauchement des grains : $\sum_i u_i(x, t) = 1, \quad \forall x \in \Omega.$

Multiplicateur de Lagrange

$$\frac{\partial u_i}{\partial t}(x, t) = \Delta u_i(x, t) - \frac{1}{\varepsilon^2} W(u_i(x, t)) + \mu_i \sqrt{2W(u_i(x, t))} + \lambda(x) \quad (2)$$

- ① $\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} u_i(x, t) dx = 0, \quad \forall i,$
 - ② $\sum_i u_i(x, t) = 1, \quad \forall x \in \Omega \iff \frac{\partial}{\partial t} \sum_i u_i(x, t) = 0, \quad \text{si } \sum_i u_i(x, t_0) = 1$
- \Rightarrow système linéaire sur μ_i à résoudre.

Simplification $\rho_{v0} = \rho_{vs0} \Leftrightarrow$ Allen-Cahn

$$\frac{\partial u_i}{\partial t}(x, t) = \Delta u_i(x, t) - \frac{1}{\varepsilon^2} W'(u_i), \quad i = 1, \dots, N \quad (1)$$

Propriétés attendues

- ① Conservation du volume de chaque grain : $V_i(t) := \int_{\Omega} u_i(x, t) dx \equiv V(0), \quad \forall i = 1, \dots, N,$
- ② Non-chevauchement des grains : $\sum_i u_i(x, t) = 1, \quad \forall x \in \Omega.$

Multiplicateur de Lagrange

$$\frac{\partial u_i}{\partial t}(x, t) = \Delta u_i(x, t) - \frac{1}{\varepsilon^2} W(u_i(x, t)) + \mu_i \sqrt{2W(u_i(x, t))} + \lambda(x) \quad (2)$$

- ① $\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} u_i(x, t) dx = 0, \quad \forall i,$
 - ② $\sum_i u_i(x, t) = 1, \quad \forall x \in \Omega \iff \frac{\partial}{\partial t} \sum_i u_i(x, t) = 0, \quad \text{si } \sum_i u_i(x, t_0) = 1$
- \implies système linéaire sur μ_i à résoudre.

Simplification $\rho_{v0} = \rho_{vs0} \Leftrightarrow$ Allen-Cahn

$$\frac{\partial u_i}{\partial t}(x, t) = \Delta u_i(x, t) - \frac{1}{\varepsilon^2} W'(u_i), \quad i = 1, \dots, N \quad (1)$$

Propriétés attendues

- ① Conservation du volume de chaque grain : $V_i(t) := \int_{\Omega} u_i(x, t) dx \equiv V(0), \quad \forall i = 1, \dots, N,$
- ② Non-chevauchement des grains : $\sum_i u_i(x, t) = 1, \quad \forall x \in \Omega.$

Multiplicateur de Lagrange

$$\frac{\partial u_i}{\partial t}(x, t) = \Delta u_i(x, t) - \frac{1}{\varepsilon^2} W(u_i(x, t)) + \mu_i \sqrt{2W(u_i(x, t))} + \lambda(x) \quad (2)$$

- ① $\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} u_i(x, t) dx = 0, \quad \forall i,$
 - ② $\sum_i u_i(x, t) = 1, \quad \forall x \in \Omega \iff \frac{\partial}{\partial t} \sum_i u_i(x, t) = 0, \quad \text{si } \sum_i u_i(x, t_0) = 1$
- \Rightarrow système linéaire sur μ_i à résoudre.

Simplification $\rho_{v0} = \rho_{vs0} \Leftrightarrow$ Allen-Cahn

$$\frac{\partial u_i}{\partial t}(x, t) = \Delta u_i(x, t) - \frac{1}{\varepsilon^2} W'(u_i), \quad i = 1, \dots, N \quad (1)$$

Propriétés attendues

- ① Conservation du volume de chaque grain : $V_i(t) := \int_{\Omega} u_i(x, t) dx \equiv V(0), \quad \forall i = 1, \dots, N,$
- ② Non-chevauchement des grains : $\sum_i u_i(x, t) = 1, \quad \forall x \in \Omega.$

Multiplicateur de Lagrange

$$\frac{\partial u_i}{\partial t}(x, t) = \Delta u_i(x, t) - \frac{1}{\varepsilon^2} W(u_i(x, t)) + \mu_i \sqrt{2W(u_i(x, t))} + \lambda(x) \quad (2)$$

- ① $\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} u_i(x, t) dx = 0, \quad \forall i,$
 - ② $\sum_i u_i(x, t) = 1, \quad \forall x \in \Omega \iff \frac{\partial}{\partial t} \sum_i u_i(x, t) = 0, \quad \text{si } \sum_i u_i(x, t_0) = 1$
- \implies système linéaire sur μ_i à résoudre.

Simplification $\rho_{v0} = \rho_{vs0} \Leftrightarrow$ Allen-Cahn

$$\frac{\partial u_i}{\partial t}(x, t) = \Delta u_i(x, t) - \frac{1}{\varepsilon^2} W'(u_i), \quad i = 1, \dots, N \quad (1)$$

Propriétés attendues

- ① Conservation du volume de chaque grain : $V_i(t) := \int_{\Omega} u_i(x, t) dx \equiv V(0), \quad \forall i = 1, \dots, N,$
- ② Non-chevauchement des grains : $\sum_i u_i(x, t) = 1, \quad \forall x \in \Omega.$

Multiplicateur de Lagrange

$$\frac{\partial u_i}{\partial t}(x, t) = \Delta u_i(x, t) - \frac{1}{\varepsilon^2} W(u_i(x, t)) + \mu_i \sqrt{2W(u_i(x, t))} + \lambda(x) \quad (2)$$

- ① $\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} u_i(x, t) dx = 0, \quad \forall i,$
- ② $\sum_i u_i(x, t) = 1, \quad \forall x \in \Omega \iff \frac{\partial}{\partial t} \sum_i u_i(x, t) = 0, \quad \text{si } \sum_i u_i(x, t_0) = 1$

\implies système linéaire sur μ_i à résoudre.

Simplification $\rho_{v0} = \rho_{vs0} \Leftrightarrow$ Allen-Cahn

$$\frac{\partial u_i}{\partial t}(x, t) = \Delta u_i(x, t) - \frac{1}{\varepsilon^2} W'(u_i), \quad i = 1, \dots, N \quad (1)$$

Propriétés attendues

- ① Conservation du volume de chaque grain : $V_i(t) := \int_{\Omega} u_i(x, t) dx \equiv V(0), \quad \forall i = 1, \dots, N,$
- ② Non-chevauchement des grains : $\sum_i u_i(x, t) = 1, \quad \forall x \in \Omega.$

Multiplicateur de Lagrange

$$\frac{\partial u_i}{\partial t}(x, t) = \Delta u_i(x, t) - \frac{1}{\varepsilon^2} W(u_i(x, t)) + \mu_i \sqrt{2W(u_i(x, t))} + \lambda(x) \quad (2)$$

- ① $\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} u_i(x, t) dx = 0, \quad \forall i,$
 - ② $\sum_i u_i(x, t) = 1, \quad \forall x \in \Omega \iff \frac{\partial}{\partial t} \sum_i u_i(x, t) = 0, \quad \text{si } \sum_i u_i(x, t_0) = 1$
- \Rightarrow système linéaire sur μ_i à résoudre.

Occupation mémoire

Pour un domaine 3D de 1000^3 points de discrétisation, chaque fonction champ de phase occupe 8Go de mémoire en double précision.

Idée

On considère u_i négligeable loin du grain qu'il représente ($= \{x ; u_i(x) \geq 0.5\}$).

On ne stocke donc que les valeurs de u_i supérieures à une tolérance $\tau \geq 0$ et on arrondit à 0 celles qui sont inférieures.

Occupation mémoire

Pour un domaine 3D de 1000^3 points de discrétisation, chaque fonction champ de phase occupe 8Go de mémoire en double précision.

Idée

On considère u_i négligeable loin du grain qu'il représente ($= \{x ; u_i(x) \geq 0.5\}$).

On ne stocke donc que les valeurs de u_i supérieures à une tolérance $\tau \geq 0$ et on arrondit à 0 celles qui sont inférieures.

Occupation mémoire

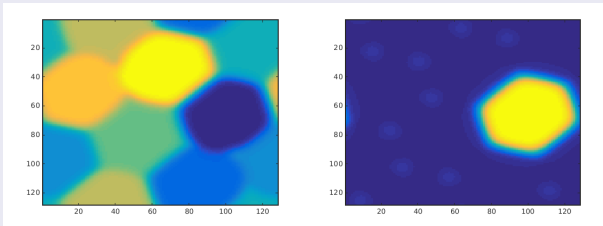
Pour un domaine 3D de 1000^3 points de discrétisation, chaque fonction champ de phase occupe 8Go de mémoire en double précision.

Idée

On considère u_i négligeable loin du grain qu'il représente ($= \{x ; u_i(x) \geq 0.5\}$).

On ne stocke donc que les valeurs de u_i supérieures à une tolérance $\tau \geq 0$ et on arrondit à 0 celles qui sont inférieures.

Problème



- Résurgence des phase-field à chaque points de contact multiple \Rightarrow occupation mémoire élevée.
- Présence de valeurs négatives significatives à l'échelle du domaine \Rightarrow perte de volume si troncature à $\tau > 0$.

Formulation

Idée : on pondère le multiplicateur λ par la valeur du champ de phase, afin qu'il soit négligeable loin du grain.

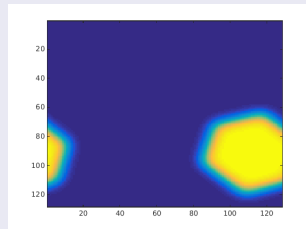
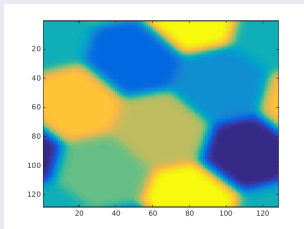
$$\frac{\partial u_i}{\partial t}(x, t) = \Delta u_i(x, t) - \frac{1}{\varepsilon^2} W(u_i(x, t)) + \mu_i \sqrt{2W(u_i(x, t))} + u_i(x, t) \lambda(x) \quad (3)$$

Formulation

Idée : on pondère le multiplicateur λ par la valeur du champ de phase, afin qu'il soit négligeable loin du grain.

$$\frac{\partial u_i}{\partial t}(x, t) = \Delta u_i(x, t) - \frac{1}{\varepsilon^2} W(u_i(x, t)) + \mu_i \sqrt{2W(u_i(x, t))} + u_i(x, t) \lambda(x) \quad (3)$$

Résultat



Sur un problème 2D de mouvement par courbure moyenne sur $\Omega = [0, 1]^n$ sous contraintes $V_i = \frac{1}{N}$ pour $i = 1 \dots N$, avec une résolution de 512^2 , $N = 16$, $\varepsilon = 2$, il y a en moyenne et en chaque point du domaine, moins de 1.56 phases significatives pour $\tau = 10^{-8}$, 1.31 pour $\tau = 10^{-4}$.

LabelledMap (DGtal)

V[0] is the data of the first set label.
V[1] is the data of the second set label.
...

if less than 4 datas and N = 3

```
+-----+-----+-----+-----+
|labels| V[0] | V[1] | ... | 0 |
+-----+-----+-----+-----+
```

if only 4 datas and N = 3

```
+-----+-----+-----+-----+
|labels| V[0] | V[1] | V[2] | V[3] |
+-----+-----+-----+-----+
```

if more than 4 datas and N = 3, M = 4

```
+-----+-----+-----+-----+ +-----+-----+-----+-----+
|labels| V[0] | V[1] | V[2] | ptr -----> | V[3] | V[4] | V[5] | V[6] | ptr -----> ...
+-----+-----+-----+-----+ +-----+-----+-----+-----+
```


Coefficient de condensation

$$\frac{\partial u_i}{\partial t}(x, t) = \delta_0 C \frac{\rho_{vs0}}{\rho_{ice}} \left(\Delta u_i(x, t) - \frac{1}{\varepsilon^2} W'(u_i) \right) \quad (4)$$

avec

$$C = \alpha \sqrt{\frac{kT_0}{2\pi m}} \quad (5)$$

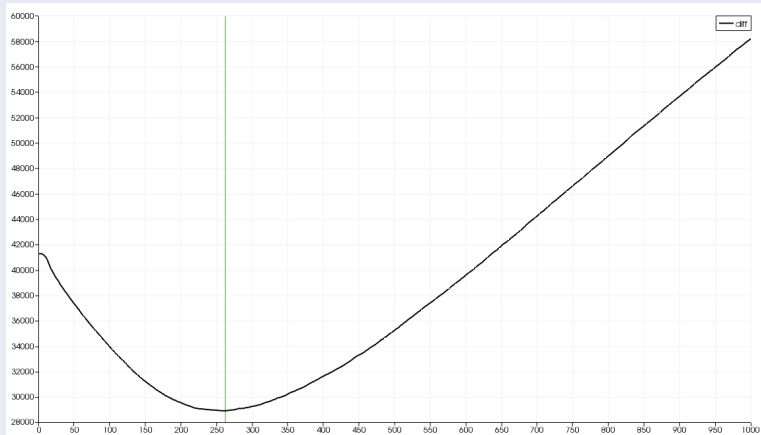
où on ne connaît qu'une approximation grossière du coefficient de condensation α :
 $10^{-3} \leq \alpha \leq 10^{-1}$.

Adimensionnement

$$\tilde{t} = \frac{\Delta x^2}{\delta_0 C \frac{\rho_{vs0}}{\rho_{ice}}}$$
$$\tilde{\varepsilon} = \frac{\varepsilon}{\Delta x}$$

On connaît u_i au temps $t = 0$ et $t = 28h$. On simule avec le temps adimensionnalisé et on cherche à minimiser l'erreur L_1 à l'observation. La relation ci-dessus nous donne alors une estimation de α .

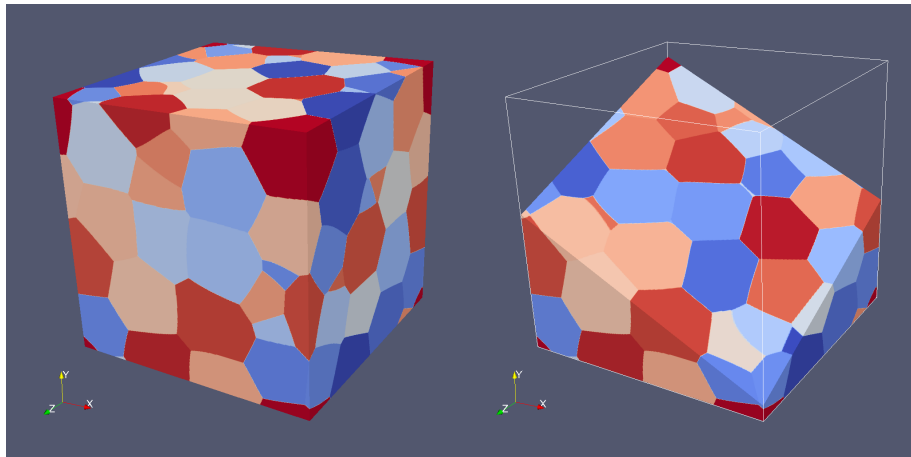
Estimation



$$\alpha \approx 2.62 \times 10^{-2}$$

Autre application : pavage de \mathbb{R}^3 (problème de Kelvin).

On cherche un pavage de \mathbb{R}^3 par des cellules de volume identique et de surface minimale.
On peut s'en approcher en étudiant les partitions périodiques de $[0, 1]^3$ par N cellules, avec N grand.



Merci de votre attention !