Proposition suite thèse

Marius Duvillard

15 février 2024

Table des matières

1 Objectifs

Plusieurs possibilités s'offrent pour la suite de ma thèse. Celles-ci s'intègrent dans le sujet *Assimilation de Données pour des méthodes Lagrangiennes*. Une possibilité est de proposer des méthodes qui permettent de modifier la position des particules.

Jusqu'à présent, les méthodes proposées ne tenaient compte que d'une correction des intensités, ou bien d'une génération d'une nouvelle discrétisation de particules. Or, dans certains cas, ce type de correction n'est pas du tout possible. C'est le cas par exemple de la DEM où l'ajout et la génération de particules ne peuvent être regardés de la même manière. Une possibilité dans ce cas serait de modifier la configuration actuelle d'une simulation tout en tenant compte des contraintes liées aux interactions inter-particules.

2 Contexte

Dans la littérature, on retrouve des méthodes d'assimilation qui vont chercher à corriger la position de l'ébauche. Pour ce faire, différentes métriques ont été proposées et que j'ai résumées dans une petite note.

— Un premier type de méthode consiste à déterminer un champ de déformation pour corriger la position de l'ébauche. C'est ce qu'a proposé Ravela via sa méthode de *Data Assimilation by Field Alignment* [4]. Également, Rosenthal [5] propose, dans un cas de simulation vortex, de définir une suite de fonctions courant à appliquer pour modifier l'ébauche. Dans les deux cas, une étape de correction classique des intensités est enfin réalisée.

— Un second type de formulation consiste à corriger l'erreur de position grâce à la définition d'une norme différente pour évaluer formuler le problème de variationnel. C'est ce qu'ont proposé, par exemple, Feyeux [3] et [1]. Dans le dernier cas, afin de tenir compte du fait que les distributions pouvaient avoir des masses différentes, une formulation définie à l'aide de deux états x_b et x_o a été développée. Avec ces états définis, un Barycentre doit être déterminé tel que $x_a = \arg\min_x W(x_b, x) + W(x_o, x)$.

Dans les deux cas, les états sont définis sur des discrétisations Eulériennes, l'état est un champ continu. Dans les deux cas, il est donc possible de modifier les intensités.

3 Propositions

Suite à l'analyse de ces travaux, voici plusieurs propositions d'adaptations à notre cas.

3.1 Déplacement de vortex

Dans le cas de la méthode vortex, il semble assez raisonnable de pouvoir proposer une nouvelle version de l'implémentation du problème d'assimilation de données pour une discrétisation particulaire. En effet, on peut, déterminer la suite de fonctions courant Ψ, et donc définir une transformation finale qui respecte les conditions d'incompressibilité.

La formulation serait exprimée, à l'aide d'une formulation incrémentale du problème (3DVar-inc ou EKF-inc)

— À l'itération m, je calcule, sur un ensemble, une correction Ψ_m paramétrée par A_m, ses valeurs nodales.

— La fonction coût à minimiser est

$$\mathcal{L}(a) = \frac{1}{2}\|d_v - h(a; \omega^f)\|^2_{R^{-1}} + \frac{1}{2}\|a - a^f\|^2_{P_a^{-1}}$$

— Pour cela, on doit calculer la matrice d'observation linéarisée par rapport à A_m, $H_{p,m}$ autour de $A_m = 0$. La matrice de covariance de A_m peut-être obtenue à partir du calcul des statistiques de Ψ_m grâce à un ensemble.

— On en déduit le gain de Kalman L_k et ainsi A_m.

— On applique le champ de vitesse induit par $\Psi(A_m)$ pour un pas de temps dt (à fixer) et on advecte les particules.

— On répète la procédure pour chaque membre, jusqu'à convergence.

Ici, l'ingrédient essentiel est de définir la transformation à partir d'une succession Ψ_m, permettant de vérifier, sous une forme explicite, les propriétés d'incompressibilité de l'écoulement.

Ici, la différence avec l'alignement proposé par Rosenthal est uniquement de réaliser l'advection des particules. La fonction de courant était déjà définie sur une grille via l'approche VIC.

3.2 Déplacement configuration DEM

En s'inspirant du cas précédent, on souhaiterait proposer une formulation de la mise à jour de la position des particules, qui soit admissible avec les contraintes de la DEM. On rappelle qu'en DEM le problème est résolu grâce à la résolution de l'équation fondamentale de la dynamique comme $\frac{dx_p}{dt} = f_v + m_p F_{ip}(x_1, ..., x_p; k)$. La force à appliquer F_{ip} à la particule p dépend d'une part des forces volumiques f_v (gravitation) et des forces d'interactions F_{ip} appliquées à la particule. Ces dernières sont déterminées à l'aide de loi d'interaction qui vont pénaliser les interpénétrations δ entre chaque particule, ainsi qu'avec la paroi. Les lois les plus simples sont la loi de Hooke par exemple (pénalisation linéaire), mais d'autres prennent également en compte le taux de pénétration $\dot{\delta}$.

Ainsi, la mise à jour de la position des particules, pour être admissible dans le problème DEM, ne peut venir que par la définition d'une force complémentaire F_{assim} qui doit s'ajouter aux forces d'interaction. On peut imaginer la définir localement pour chaque particule, ou bien globalement, via un champ et qui sera ensuite interpolé par la particule.

La question dans cette proposition est de définir une formulation du problème variationnel tel que

$$\mathcal{L}(F) = \arg\min_F \|d_v - h_F(X^b(F))\| + \|F - F^b\|^2_{P_F}$$

où $X = (m^b, x^b, v^b, a^b)$ est l'état de la simulation DEM, qui peut comprendre la position, la vitesse, l'accélération des particules.

Ici, on aurait donc $h_F = v^b + d\tau F$ pour un schéma explicite très simple. Pour proposer quelque chose de similaire avec ce qui est fait précédemment, il faut définir la linéarisation de h_F en fonction de F. De plus, l'opérateur d'observation nécessite de projeter les vitesses sur une grille (faisable en reprenant des méthodes d'assignement p2g).

Un problème intermédiaire pour la DEM serait de définir la mise à jour sur un autre problème Lagrangien de dynamique des solides par exemple en MPM. En effet, l'étape de projection sur la grille est déjà implémentée. Le problème est plus simple car il n'y a pas de souci dans la mise à jour des positions. F est directement défini sur une grille, et les étapes d'advection et de projection sont déjà plus ou moins accessibles.

Dans les deux cas, une question réside toujours sur le moyen de calculer P_F ainsi que F^b. Dans un premier temps, F^b peut être choisi égal à 0. Quant à P_F, il est plus difficile de le définir. Une possibilité est de proposer une régularisation de F et remplacer le prior par un terme $S(F)$. La question pourrait être de savoir selon quelle considération ? C'est en effet ce qui avait pu être proposé par les deux précédents papiers, afin de minimiser les déformations de la grille. Peut-être proposer une régularisation qui minimise justement l'interpénétration ?

3.3 Transport Optimal

Une implémentation dans un autre paradigme serait de partir d'une formulation du problème sous la forme du transport optimal.

Tout comme Bocquet, on reprendrait le problème en deux étapes.

— Détermination des états x_b et x_o, deux distributions positives obtenues à partir de la résolution du problème dual régularisé par la divergence de KL

$$\mathcal{L}_\varepsilon = \max_{\boldsymbol{f}_b \in \boldsymbol{R}^{\mathcal{N}_b}, \boldsymbol{f}_o \in \boldsymbol{R}^{\mathcal{N}_o}} \boldsymbol{f}_b^T \boldsymbol{y}^b + \boldsymbol{f}_o^T \boldsymbol{y}^o - \zeta_b^*(\boldsymbol{f}_b) + \zeta_o^*(\boldsymbol{f}_o) + \min_{P \in \mathcal{O}^+_{b,o}} \left(\varepsilon \sum_{ij} \left\{ P_{ij} \ln \frac{P_{ij}}{\nu_{ij}} - Pij + \nu_{ij} \right\} + Pij \left\{ C^{ij}_{bo} - f^i_b 1^j_o - H^j_l f^l_o 1^i_b \right\} \right)$$

En déterminant $_\mathbf{b}$ et $_\mathbf{o}$, le plan optimal $\boldsymbol{P}$ peut être obtenu, et $\boldsymbol{x}_b$ et $\boldsymbol{x}_o$ en prenant les marginales.

— Détermination du barycentre x_a par minimization du problème

$$J = \min_{\boldsymbol{x}^a \in \mathcal{O}^+_{N_a}} \left\{ W_{\boldsymbol{C}_{ba}}(\boldsymbol{x}^b, \boldsymbol{x}^a) + W_{\boldsymbol{C}_{oa}}(\boldsymbol{x}^o, \boldsymbol{x}^a) \right\}.$$

Dans notre cas, les adaptations majeurs serais dans le choix des espaces des états $\boldsymbol{x}_b, \boldsymbol{x}_a, \boldsymbol{x}_o$ à savoir respectivement $\mathcal{O}^+_{N_b}, \mathcal{O}^+_{N_a}, \mathcal{O}^+_{N_o}$. En effet, s'il est naturel d'utiliser l'espace issu de la discrétisation du forward pour $\boldsymbol{x}_b$, cela est moins évident en ce qui concerne $\boldsymbol{x}_a, \boldsymbol{x}_o$. Une proposition que je fais serai d'utiliser une discrétisation particulaire uniforme pour $\boldsymbol{x}_o$, afin d'être certain de capturer toutes les observations. Enfin utiliser une mise à jour de la discrétisation de $\boldsymbol{x}_b$ pour obtenir $\boldsymbol{x}_a$. La méthode de recherche du Barycentre se ferait par optimization des positions des particules en partant de la discrétization de $\boldsymbol{x}_b$.

Ainsi, après détermination de $\boldsymbol{x}_b$ et $\boldsymbol{x}_o$, on cherche $\boldsymbol{x}_a$ alternativement dans l'espace $P(X, \Theta)$ où $X \in \Omega^n$ est une liste de n particules avec des poids dans un sous ensemble $\Theta = \{\theta \in \mathbb{R}^+, \sum_i^n = m\}$, ou bien dans l'espace $P_n(\Omega, \Theta)$ qui est l'espace de mesures supporté par n particules et avec des poids toujours dans l'espace Θ. On est bien dans un cas ou les mesures $\boldsymbol{x}_o$ et $\boldsymbol{x}_b$ peuvent être vu comme des mesures empiriques. A partir de ce cadre je propose d'utiliser les algorithmes présentés dans l'article de Cuturi et al. [2]. Ceux-ci se base sur la descente de gradient de la fonction coût alternativement en fonction de la position et des intensités.

Dans ce cas on proposerai une formulation qui va modifier la position et l'intensité des particules en corrigeant l'ébauche.

Dans une méthode Lagrangienne continue, où les particules sont plus où moins indépendantes, c'est un schéma qui peut être mis en place.

Dans un cadre où les particules sont discrètes, alors comment prendre en compte les contraintes d'interpénétraiton lors du déplacement ?

Références

[1] Marc Bocquet, Pierre Vanderbecken, Alban Farchi, Joffrey Dumont Le Brazidec, and Yelva Roustan. *Bridging classical data assimilation and optimal transport.* December 2023.

[2] Marco Cuturi and Arnaud Doucet. Fast Computation of Wasserstein Barycenters, June 2014. arXiv :1310.4375 [stat].

[3] Nelson Feyeux. Transport optimal pour l'assimilation de données images. page 182.

[4] Sai Ravela, Kerry Emanuel, and Dennis McLaughlin. Data assimilation by field alignment. *Physica D : Nonlinear Phenomena*, 230(1-2) :127–145, June 2007.

[5] W. Steven Rosenthal, Shankar Venkataramani, Arthur J. Mariano, and Juan M. Restrepo. Displacement data assimilation. *Journal of Computational Physics*, 330 :594–614, February 2017.