

# Data assimilation for Meshless Simulations for the Digital Twin of a Fuel Manufacturing Process.

Ecole Polytechnique / CEA Cadarache

Marius Duvillard

7 février 2024

# Table des matières

<b>1</b>	<b>Introduction</b>	<b>2</b>
1.1	Contexte industriel . . . . .	2
1.1.1	Estimation . . . . .	3
1.1.2	Chaîne de Markov cachée . . . . .	3
1.1.3	Méthode séquentielle - Approche Probabiliste . . . . .	3
1.1.4	Filtrage bayésien . . . . .	3
1.1.5	Material Point Method (MPM) . . . . .	5

# Chapitre 1

## Introduction

### 1.1 Contexte industriel

- 2023 la filière nucléaire produit X% de la quantité d'énergie totale d'électricité en France.
- Le parc est constitué de 56 tranches réacteurs à eau pressurisée (REP) répartis sur 18 centrales.
- Source d'énergie de bon rapport qualité prix et qui est faiblement émettrice en gaz à effet de serre
- En effet, le facteur d'émission nette la définition, est estimé à 12 gCO<sub>2</sub>eq/kWh. Il serait même encore plus faible en France.
- Même ordre de grandeur que l'éolien et le solaire. 100 à 1000 fois plus faible que l'énergie émise par les centrales à énergie fossiles.
- Face à l'urgence climatique, l'énergie nucléaire est une aide pour la transition énergétique et la sortie des énergies fossiles.
- Mais il y a des questions à répondre.
- Outre les questions relatives à la sûreté des installations, ou bien le risque de prolifération nucléaire il faut aussi tenir compte des déchets à vie longues et à forte activité. Ceux-ci se forment à l'intérieur des réacteurs durant toute la durée de leur fonctionnement.
- Finalement 2kg de déchet par an et par habitant sont générés pour la fabrication de l'électricité. Parmi eux les déchets à vie longue qui représentent 0.2% des stocks pour 95% de l'activité.
- De plus on souhaiterait préserver les ressources en combustible.
- Ainsi le retraitement et la fermeture du cycle.

En 2023, l'industrie nucléaire a représenté X% de la production totale d'électricité en France, avec un parc composé de 56 réacteurs à eau pressurisée (REP) répartis sur 18 centrales. Cette source d'énergie est saluée pour son rapport qualité-prix avantageux et ses faibles émissions de gaz à effet de serre, avec un facteur d'émission estimé à 12 gCO<sub>2</sub>eq/kWh, une valeur encore plus basse en France. Comparativement à d'autres sources telles que l'éolien et le solaire, les émissions de CO<sub>2</sub> du nucléaire sont du même ordre de grandeur, mais jusqu'à 1000 fois inférieures à celles des centrales à énergie fossile. Dans le contexte de l'urgence climatique, l'énergie nucléaire est perçue comme un atout pour la transition énergétique et la réduction des énergies fossiles, bien que des questions subsistent, notamment sur la sûreté des installations et le risque de prolifération nucléaire. De plus, la gestion des déchets radioactifs à vie longue et à forte activité, ainsi que la préservation des ressources en combustible, sont des défis à relever, d'où l'importance du retraitement et de la fermeture du cycle du combustible nucléaire. s

## Le combustible Nucléaire

### La fabrication du combustible

#### Broyeur à boulets

##### 1.1.1 Estimation

##### 1.1.2 Chaîne de Markov cachée

##### 1.1.3 Méthode séquentielle - Approche Probabiliste

##### 1.1.4 Filtrage bayésien

Le filtrage bayésien consiste à écrire la récurrence sur les lois de probabilité, pour estimer, en fonction des observations passées et courante  $y_{1:k}$  l'état courant  $\mathbf{x}_k$  et de prédire l'état future  $\mathbf{x}_{k+1}$ .

Pour simplifier les notations, l'exposant  $^{|k}$  qui conditionne la densité par les observations  $\mathbf{y}_{1:N}$ . La densité de l'état est initialisée par la densité a priori de l'état initial  $p_{X_0}$ .

Puis pour tout  $k \geq 0$  les lois de probabilité sont propagées.

L'étape de propagation ou *forecast* loi *a priori* est obtenue grace à la loi des probabilité totales

$$p_{\mathbf{X}_{k+1}}^{|k}(\mathbf{x}) = \int p_{\mathbf{X}_{k+1}|\mathbf{X}_k=\mathbf{x}'}(\mathbf{x}) p_{\mathbf{X}_k}^{|k}(\mathbf{x}') d\mathbf{x}' \quad (1.1)$$

La loi *a priori* de la  $k+1$  observations peut être obtenue de nouveau grace à la loi de probabilité totale

$$p_{\mathbf{Y}_{k+1}}^{|k}(\mathbf{y}) = \int p_{\mathbf{Y}_{k+1}|\mathbf{X}_{k+1}=\mathbf{x}}(\mathbf{y}) p_{\mathbf{X}_{k+1}}^{|k}(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$$

Après la  $k+1$  observation  $\mathbf{y}_{k+1}$ , l'étape d'*analyse* permet de déterminer la loi *a posteriori* de l'état avec la loi de Bayes appliquées après mesure de  $\mathbf{Y}_n$

$$p_{\mathbf{X}_{k+1}}^{|k+1}(\mathbf{x}) = p_{\mathbf{X}_{k+1}|\mathbf{Y}_{k+1}=\mathbf{y}_{k+1}}^{|k}(\mathbf{x}) = \frac{p_{\mathbf{Y}_{k+1}|\mathbf{X}_{k+1}=\mathbf{x}}(\mathbf{y}) p_{\mathbf{X}_{k+1}}^{|k}(\mathbf{x})}{p_{\mathbf{Y}_{k+1}}^{|k}(\mathbf{y})}.$$

la loi de Bayes après mesure de  $\mathbf{Y}_n$

#### Filtre de Kalman

Le filtre de Kalman introduit en 1960 [?] est une version du filtre Bayésien appliqué à un modèle linéaire Gaussien. Dans ces conditions, la distribution de l'état a priori de l'état et des observations sont défini par leur deux premiers moment tel que la propagation devient

$$\begin{aligned} \hat{m}_X &= \mathbb{E}[\mathbf{X}_{k+1}^{|k}] = M\mathbb{E}[\mathbf{X}_k^{|k}], \\ \hat{P}_{k+1} &= \mathbb{V}[\mathbf{X}_{k+1}^{|k}] = M\mathbb{E}[\mathbf{X}_k^{|k}]M^T + Q, \end{aligned}$$

et le modèle d'observation donne

$$\begin{aligned} m_Y &= \mathbb{E}[\mathbf{Y}_{k+1}^k] = \mathbf{H}\mathbb{E}[\mathbf{X}_{k+1}^k], \\ \mathbf{C}_{Y,Y} &= \mathbb{V}[\mathbf{Y}_{k+1}^k] = \mathbf{H}\mathbb{V}[\mathbf{X}_{k+1}^k]\mathbf{H}^T + \mathbf{R}, \\ \mathbf{C}_{X,Y} &= \mathbb{C}[\mathbf{X}_{k+1}^k, \mathbf{Y}_{k+1}^k] = \mathbf{P}_{k+1}\mathbf{H}^T, \end{aligned}$$

De telle sorte que la distribution conditionnelle de  $\mathbf{Y}_{k+1}$  par  $^k$  et  $\mathbf{Y}_{k+1} = \mathbf{y}_{k+1}$ , si cette dernière est non-dégénérée (ce qui est le cas si  $\mathbf{R}$  n'est pas singulière), est défini par ses deux premiers moments qui sont

$$\begin{aligned} m_X &= \mathbb{E}[\mathbf{X}_{k+1}^k | \mathbf{Y}_{k+1}^k] = \hat{m}_X + \mathbf{C}_{X,Y}\mathbf{C}_{Y,Y}^{-1}(\mathbf{y}_{k+1} - m_Y), \\ \mathbf{P}_{k+1} &= \mathbb{V}[\mathbf{X}_{k+1}^k | \mathbf{Y}_{k+1}^k] = \hat{\mathbf{P}}_{k+1} - \mathbf{C}_{X,Y}\mathbf{C}_{Y,Y}^{-1}\mathbf{C}_{X,Y}^T. \end{aligned}$$

Ainsi la distribution a posteriori est défini comme un produit matriciel où l'estimateur a priori  $\hat{m}_X$  et sa variance  $\hat{\mathbf{P}}_{k+1}$  sont mis à jour à partir du *gain de Kalman*  $\mathbf{K} = \mathbf{C}_{X,Y}\mathbf{C}_{Y,Y}^{-1}$  et du *terme d'innovation*  $(\mathbf{y}_{k+1} - m_Y)$  de telle sorte que les précédentes équations s'écrivent

$$\begin{aligned} m_X &= \hat{m}_X + \mathbf{K}(\mathbf{y}_{k+1} - m_Y), \\ \mathbf{P}_{k+1} &= (\mathbf{I} - \mathbf{K}\mathbf{H})\hat{\mathbf{P}}_{k+1} \end{aligned}$$

Finalement, on peut réécr

**Données :** Initialisation de l'état  $m_x$  et de sa covariance  $\mathbf{P}$ ;  
**pour**  $k \geq 1$  **faire**

- Prédiction;
- $\hat{m}_x = \mathbf{M}m_x$ ;
- $\hat{\mathbf{P}} = \mathbf{M}\mathbb{E}[\mathbf{X}_{k+1}^k]\mathbf{M}^T + \mathbf{Q}$ ;
- Observation de  $\mathbf{Y} \rightarrow \mathbf{y}$  Analyse;
- Calcul du gain de Kalman :  $\mathbf{K} = \hat{\mathbf{P}}\mathbf{H}^T(\mathbf{H}\hat{\mathbf{P}}\mathbf{H}^T + \mathbf{R})^{-1}$  ;
- Calcul de l'analyse;
- $m_x = \hat{m}_x + \mathbf{K}(\mathbf{y} - \mathbf{H}\hat{m}_x)$ ;
- Calcul de la matrice de covariance de l'état;

**Algorithme 1 :** Filtre de Kalman

## Filtre Particulaire

Le filtre particulaire est une implémentation du filtre bayésien qui approxime la PDF à l'aide d'une distribution empirique. Les transformations du filtre, *forecast* et *analysis* sont appliquées sur les membres de cet échantillon. Cette méthode converge vers la distribution exacte lorsque le nombre de particule  $N \rightarrow \infty$ .

Le prior de l'état  $p(\mathbf{x})$  à l'instant  $k$  est représenté par un ensemble de  $N$  réalisations  $\{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N\}$  de tel sorte que

$$p_{\mathbf{X}_k}(\mathbf{x}) \simeq \sum_{i=1}^N \omega_k^i \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_k^i) \quad \text{with} \quad \sum_{i=1}^N \omega_k^i = 1, \quad \omega_k^i > 0.$$

où  $\delta$  est la masse de Dirac et  $\omega_k^i$  les poids associés à chaque membre. Initialement, les échantillons sont supposés tirés de manière uniforme de tel sorte que  $\omega_k^i = 1/N$ .

Lors de l'étape de *propagation*, les particules sont propagées par le modèle de manière déterministe. Pour s'en convaincre, le loi de probabilité totale 1.1 peut être réécrite

$$\begin{aligned} p_{\mathbf{X}_{k+1}}^{(k)}(\mathbf{x}) &= \int p_{\mathbf{X}_{k+1}|\mathbf{X}_k=\mathbf{x}'}(\mathbf{x}) p_{\mathbf{X}_k}^{(k)}(\mathbf{x}') d\mathbf{x}' \\ &\simeq \int p_{\mathbf{X}_{k+1}|\mathbf{X}_k=\mathbf{x}'}(\mathbf{x}) \sum_{i=1}^N \omega_k^i \delta(\mathbf{x}' - \mathbf{x}_k^i) d\mathbf{x}' \\ &\simeq \sum_{i=1}^N \omega_k^i \int p_{\mathbf{X}_{k+1}|\mathbf{X}_k=\mathbf{x}'}(\mathbf{x}) \delta(\mathbf{x}' - \mathbf{x}_k^i) d\mathbf{x}' \\ &\simeq \sum_{i=1}^N \omega_k^i \delta(\mathbf{x} - \mathcal{M}_{k,k+1}(\mathbf{x}_k^i) - \boldsymbol{\eta}_{k,k+1}) = \sum_{i=1}^N \omega_k^i \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{k+1}^i). \end{aligned}$$

Quant à l'étape d'analyse, elle correspond à une mise à jour du poids de chaque membre, qui correspond à sa vraisemblance conditionnée aux données

$$\begin{aligned} p_{\mathbf{X}_{k+1}}^{(k+1)}(\mathbf{x}) &\propto p_{\mathbf{Y}_{k+1}|\mathbf{X}_{k+1}=\mathbf{x}}^{(k)}(\mathbf{y}) \sum_{i=1}^N \omega_k^i \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{k+1}^i) \\ &\propto \sum_{i=1}^N \omega_k^i p_{\mathbf{Y}_{k+1}|\mathbf{X}_{k+1}=\mathbf{x}_{k+1}^i}^{(k)}(\mathbf{y}) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{k+1}^i) \end{aligned}$$

Leading to

$$\omega_{k+1}^i = \frac{\omega_k^i p_{\mathbf{Y}_{k+1}|\mathbf{X}_{k+1}=\mathbf{x}_{k+1}^i}^{(k)}(\mathbf{y}_{k+1})}{\omega_k^j \sum_j^N p_{\mathbf{Y}_{k+1}|\mathbf{X}_{k+1}=\mathbf{x}_{k+1}^j}^{(k)}(\mathbf{y}_{k+1})}$$

Où le dénominateur est simplement un terme de normalisation.

Cependant, lorsque la dimension est grande, le nombre de poids non nulle à tendance à tendre vers 0. Pour éviter cela, des méthodes de rééchantillonnage du *posterior* ont été développé. Le filtre bootstrap [?] consiste à sélectionner les membres de poids les plus élevé, de les cloner de manière proportionnelle à leurs poids. Après échantillonnage,  $N$  particules sont rassemblées, dont certaines sont identiques avec des approximativement égaux. Un exemple d'algorithme suivant

### 1.1.5 Material Point Method (MPM)

La méthode MPM est une version de FLIP pour résoudre le problème de mécanique des solides. Elle consiste, comme en élément finis, à résoudre le problème aux valeurs sous sa forme faible, en utilisant conjointement deux discrétisations, une grille et des particules.

Le problème aux conditions limites, sous sa forme forte, se composent des équations d'équilibre, des lois matériaux, de l'équation cinématique et des conditions limites et initiales donnant

**pour** *membre*  $n$  **do faire**

    Tirer  $u$  dans  $\mathcal{U}[0, 1[$ ;

    Initialiser  $j = 1$ ;

    Affecter  $S_w = w^1$ ;

**tant que**  $S_w < u$  **faire**

$j = j + 1$ ;

$S_w = S_w + w(j)$

    Le membre  $j$  est conservé et remplace le membre  $n$ .

**Algorithme 2 :** Implémentation du rééchantillonnage par *bootstrap*.

$$\left\{ \begin{array}{ll} \frac{D\rho}{Dt} + \rho \nabla \cdot \mathbf{v} = 0, & \text{(conservation de la masse)} \\ \rho \frac{D\mathbf{v}}{Dt} = \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \rho \mathbf{b}, & \text{(conservation de la quantité de mouvement)} \\ \boldsymbol{\sigma} = LdC(\mathbf{F}), & \text{(loi de comportement)} \\ \mathbf{u}(\mathbf{z}, t) = \bar{\mathbf{u}}, \quad \forall \mathbf{z} \in \Gamma_u, \quad \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{z}) \cdot \mathbf{n} = \mathbf{t}, \quad \forall \mathbf{z} \in \Gamma_t, & \text{(conditions limites)} \\ \mathbf{v}(\mathbf{z}, t = 0), \quad \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{z}, t = 0) = \boldsymbol{\sigma}_0. & \text{(conditions initiales)} \end{array} \right.$$

La forme faible de l'équation de conservation du moment est, en introduisant une fonction test  $\mathbf{q}$

$$\int_{\Omega} \rho \mathbf{a} \cdot \mathbf{q} d\mathbf{z} + \int_{\Omega} \boldsymbol{\sigma} : \nabla \cdot \mathbf{q} d\mathbf{z} = \int_{\Omega} \rho \mathbf{b} d\mathbf{z} + \int_{\partial\Omega_t} \mathbf{t} dS.$$

Le schéma MPM peut être obtenu en utilisant une discrétisation particulière de la densité sur les particules et en utilisant un  $\Omega = \bigcup_p \Omega_p$ .

En concentrant la masse sur la position de chaque particule, on peut représenter la densité comme une somme de dirac tel que

$$\rho(\mathbf{z}) = \sum_p V_p \rho_p \delta(\mathbf{z} - \mathbf{z}_p) = \sum_p m_p \delta(\mathbf{z} - \mathbf{z}_p)$$

De même, on discrétise la contrainte  $\boldsymbol{\sigma}$

$$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) = \sum_p \boldsymbol{\sigma}_p \delta(\mathbf{z} - \mathbf{z}_p).$$

Une généralisation a été proposée avec la méthode GIMP [?] en définissant une représentation particulière de la densité en introduisant une fonction caractéristique  $\chi_p$  tel que

$$\rho(\mathbf{z}) = \sum_p m_p \chi(\mathbf{z} - \mathbf{z}_p)$$

Ce qui donne en choisissant  $i$  comme indice de dimension d'espace

$$\sum_p m_p q_i(\mathbf{z}_p) a_i(\mathbf{z}_p) + \sum_p \sigma_{ij} \partial_j u_i + \int_{\partial\Omega_t} t_i q_i dS.$$

## Interprétation 1

## Interprétation 2

### Schéma classique

La méthode MPM est implémentée généralement en trois phases. Dans un premier temps, les quantités définies sur les particules sont transférées sur les noeuds de la grille  $p2g$ . Le principe fondamentale de la dynamique est alors résolu permettant de déterminer une grille déformée. Finalement, les nouvelles quantités nodales permettent de mettre à jour les quantités particulières dans une phase de transfert grille à particule ( $g2p$ ).

**p2g** La grille de positions de noeuds  $x_I$  est initialisée avec des valeurs nulles.

La masse  $m_p$ , la quantité de mouvement  $m_p \mathbf{v}_p$  et les forces  $\mathbf{f}_p$  sont transférées à la grille à l'aide des fonctions de forme  $\phi_I$  associé à chaque noeuds

$$\begin{aligned} m_I &= \sum_p \phi_{Ip} m_p, \\ m_I \mathbf{v}_I &= \sum_p \phi_{Ip} m_p \mathbf{v}_p, \\ \mathbf{f}_I &= \sum_p \phi_{Ip} \mathbf{f}_p. \end{aligned}$$

Des transferts plus complexes capable de préserver les moments angulaires ont été développés comme APIC [?], Poly-PIC [?], et MLS-MPM [?].

**Mise à jour sur la grille** La grille à chaque étape est initialisée dans un état non déformée. A l'aide du principe fondamentale de la dynamique, la vitesse sur la grille est mise à jour de manière explicite tel que

$$\begin{aligned} m_I \mathbf{a}_I &= \mathbf{f}_I + \mathbf{f}_g, \\ m_I \mathbf{v}^{n+1} &= \mathbf{v}^n + \Delta t (\mathbf{f}_I + \mathbf{f}_g)/m_I, \\ \mathbf{x}_I^{n+1} &= \mathbf{x}_I^n + \Delta t \mathbf{v}^{n+1}. \end{aligned}$$

C'est durant cette étape que les conditions limites ou les collisions avec un objet peuvent être prise en compte.

**g2p** Les particules vont suivre la déformation de la grille. Cela aura deux conséquence : La mise à jour de la matrice de déformation  $\mathbf{F}_p$  et de leurs positions  $\mathbf{x}_p$  et leur vitesses  $\mathbf{v}_p$ .

La mise à jour de  $\mathbf{F}_p$  est réalisé avec la déformée de la grille  $\mathbf{x}_I^{n+1}$  de manière implicite en utilisant  $\mathbf{v}^{n+1}$  de telle sorte que

$$\mathbf{F}_p^{n+1} = \left( \mathbf{I} + \Delta t \sum_I \mathbf{v}_I^{n+1} (\nabla \phi_{Ip}^T) \right) \mathbf{F}_p^n.$$

En ce qui concerne l'étape d'advection des particules, le schéma PIC suggérerait l'interpolation des vitesses tel que



$$\mathbf{v}_{PIC}^{n+1} = \sum_I \varphi_{Ip} \mathbf{v}_I^{n+1}$$

Si ce schéma est stable, il est toutefois dissipatif. Inversement la mise à jour FLIP propose de mettre à jour la vitesse  $\mathbf{v}_{PIC}^n$  en interpolant l'accélération tel que

$$\mathbf{v}_{FLIP}^{n+1} = \mathbf{v}_p^n \sum_I \varphi_{Ip} (\mathbf{v}_I^{n+1} - \mathbf{v}_I^n)$$

Dans ce cas, le transfert est conservatif mais instable. Ainsi, il est recommandé d'utiliser pour mettre à jour la vitesse  $\mathbf{v}^{n+1}$  une combinaison linéaire des deux formulations tel que

$$\mathbf{v}_p^{n+1} = \alpha \left( \mathbf{v}_p^n \sum_I \varphi_{Ip} (\mathbf{v}_I^{n+1} - \mathbf{v}_I^n) \right) + (1 - \alpha) \sum_I \varphi_{Ip} \mathbf{v}_I^{n+1}$$

avec  $\alpha \in [0, 1]$ .

Les schémas de type APIC, PolyPIC ou MLS-MPM, utilisant de plus un transfert du gradient de  $v$ , utilise une mise à jour PIC tout en restant conservatif.

La position est elle mise jour en interpolant la déformation de la grille de telle sorte que

$$\mathbf{x}_p^{n+1} = \mathbf{x}_p^n + \sum_I \varphi_{Ip} \mathbf{v}^{n+1}$$

Finalement, la grille de calcul peut être effacée et réinitialisée.

La force interne de la particule  $\mathbf{f}_p$  dépend de la loi de comportement qui lui est associée.

Elle dépend généralement de la contrainte  $\boldsymbol{\sigma}_p$  qui peut être mise à jour au début ou à la fin du schéma donnant deux formulations différence USF (*Update Stress First*) et USL (*Update Stress Last*).