

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

Ecole Polytechnique / CEA Cadarache

Marius Duvillard

25 février 2024

Table des matières

1	Introduction	2
1.1	Contexte industriel	2
1.2	Assimilation de données	3
1.2.1	Introduction	3
1.2.2	Définition du problème	3
1.2.3	Filtrage bayésien	4
1.2.4	Estimation du maximum a posteriori	6
1.2.5	Filtre de Kalman	6
1.3	Méthodes particulières	7
1.3.1	Material Point Method (MPM)	7

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 gCO₂eq/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 gCO₂eq/kWh, une valeur encore plus basse en France. Comparativement à d'autres sources telles que l'éolien et le solaire, les émissions de CO₂ 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.

Le combustible classique utilisé dans les REP est constitué d'oxide uranium enrichi

Le combustible Nucléaire

La fabrication du combustible

Broyeur à boulets

1.2 Assimilation de données

1.2.1 Introduction

L'assimilation peut être décrit comme la combinaison des informations a priori d'un modèle de simulation numérique avec les données issues de l'observation afin d'obtenir une estimation optimale d'un système dynamique et de ses incertitudes.

L'assimilation de données trouve son origine en prédiction météorologique ou en océanographie [citer Bocquet](#). Cependant, sa formulation mathématique se base sur l'inférence Bayésienne, la théorie du contrôle et le calcul variationnel.

Plus que l'estimation d'un état, l'assimilation de données est aussi une formulation appropriée pour mettre à jour les paramètres d'un système.

1.2.2 Définition du problème

Nous décrirons le problème d'assimilation sous sa forme d'inférence Bayésienne. Suivant différentes hypothèses, nous montrerons qu'elle s'exprime alors sous des formes variées.

Définition de l'état

Nous définissons un état \mathbf{x}_k comme la variable d'état qui définit complètement l'état du système à l'instant $t_k \in \mathbb{R}^+$. L'état du système est obtenu grâce un modèle \mathcal{M} qui décrit l'évolution du système. Nous noterons $\mathcal{X}_k = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_k\}$ la trajectoire du modèle jusqu'au pas de temps t_k . Nous supposons que le modèle admet des incertitudes. Celle-ci sont issues de

- [Revoir le travail de la formation DA de grenoble](#)

Ainsi nous traiterons l'état comme une variable aléatoire tel que à laquelle nous lui associerons une incertitude à la prédiction $\boldsymbol{\eta}_k$

$$\mathbf{x}_k \mathcal{M}(x_0, t_k; \boldsymbol{\theta}) + \boldsymbol{\eta}_k.$$

où $\boldsymbol{\theta}$ sont l'ensemble des paramètres du modèle et \mathbf{x}_0 l'ensemble des

Définition des observations

A une formulation dynamique, nous supposons également connue une formule d'émission ou équation d'observation. Celle-ci relie l'état et l'espace de mesure. On définit \mathcal{D}_k les mesures prédites par la fenêtre d'état \mathcal{X}_k . Tout comme l'état, les mesures sont sujettes à des incertitudes issues de plusieurs sources

- [idem pour les observations.](#)

Ainsi, on définit la formule suivante

$$\mathcal{D} = \mathcal{H}(\mathcal{X}_k) + \varepsilon_k$$

où ε_k définit l'incertitude sur l'observation \mathcal{D}_k relatif à la prédiction \mathcal{X}_k .

Inférence Bayésienne

Formulation réursive

1.2.3 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 grâce à la loi des probabilités 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 grâce 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 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 δ est la masse de Dirac et ω_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

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

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 selectionner 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

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 1 : Implémentation du rééchantillonnage par *bootstrap*.

1.2.4 Estimation du maximum a posteriori

La loi a posteriori précédemment défini peut permettre de déterminer l'estimateur MAP (*Maximum A Posteriori*). Il est la meilleure estimation de l'état connaissant les données mesurées. Il est défini comme

$$\mathbf{x}_{\text{MAP}} = \arg \max_{\mathbf{x}} p(\mathbf{x} \mid \mathbf{y}).$$

Cette estimateur peut directement être estimé en suivant complètement la distribution comme dans le filtre particulaire 1.2.3. Autement, une manière de déterminer cet estimateur est d'introduire que la distribution a priori de l'état et des observations sont Gaussiennes.

Nous supposons donc ici que les variables aléatoire introduites dans la section 1.2.2 sont définies comme

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\eta} &\sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, P), & p(\mathbf{x}) &= \mathcal{N}(\mathbf{x}^f, P) \\ \boldsymbol{\varepsilon} &\sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, R), & p(\mathbf{x}) &= \mathcal{N}(\cdot, R) \end{aligned}$$

Ainsi la distribution a posteriori peut être réécrite comme

$$p(\mathbf{x} \mid \mathbf{y}) \propto \exp(-\mathcal{L}(\mathbf{x})),$$

avec $\mathcal{L}(\mathbf{x})$

$$\mathcal{L}(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \|(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}^f\|_{P^{-1}} + \frac{1}{2} \|\mathbf{h}(\mathbf{x}) - d\|_{R^{-1}}.$$

De plus, le logarithme étant une fonction strictement croissante, la maximisation de la posterior est équivalente à minimiser \mathcal{L} . D'où la nouvelle expression de \mathbf{x}_{MAP}

$$\mathbf{x}_{\text{MAP}} = \arg \min_{\mathbf{x}} \mathcal{L}(\mathbf{x}).$$

Cette définition de l'estimateur nous permet d'introduire un ensemble de méthode variationnelles pour l'assimilation de données. Le minimum de cette fonction peut être obtenue en annulant son gradient

$$\nabla \mathcal{L}(\mathbf{x}_{\text{MAP}}) = \mathbf{0}.$$

On peut ainsi faire plusieurs remarque

- La dérivée seconde de la fonction coût \mathcal{L} , la Hessienne, est une approximation à l'ordre 1 de la matrice de covariance a posteriori,
- Si l'opérateur d'observation h est non linéaire alors, le problème n'est pas convexe et une méthode itérative de minimisation est souvent mis en place. Même dans le cas où h est linéaire, le stockage de matrice de grande dimension peut encourager à utiliser ces méthodes.

1.2.5 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

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

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 2 : Filtre de Kalman

1.3 Méthodes particulières

1.3.1 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

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

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 un 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 χ_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 transférés 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 ϕ_I associé à chaque noeuds

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

Des transferts plus complexes capable de préserver les moments angulaires ont été développé 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

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

En ce qui concerne l'étape d'advection des particules, le schéma PIC suggérait 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*).

Bibliographie