

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

Ecole Polytechnique / CEA Cadarache

Marius Duvillard

4 mars 2024

Table des matières

1	Introduction	3
1.1	Contexte industriel	3
1.1.1	Le combustible Nucléaire	4
1.1.2	La fabrication du combustible	4
1.2	Données mesurées	4
1.3	Jumeau Numérique	5
1.3.1	Apport du jumeau numérique pour le broyeur à boulet	5
1.3.2	Défis associés à la construction du jumeau numérique	5
1.4	Objectif	6
2	Assimilation de Données	7
2.1	Introduction	7
2.2	Définition du problème	7
2.2.1	Définition de l'état	7
2.2.2	Définition des observations	8
2.2.3	Inférence Bayésienne récursive	8
2.2.4	Estimation des paramètres du modèle par augmentation de l'état	9
2.3	Filtrage bayésien	10
2.4	Propagation	10
2.5	Hypothèses et filtres	11
2.6	Filtre particulaire	11
2.7	Filtre de Kalman	12
2.7.1	Loïc redaction	12
2.7.2	My redaction	13
2.8	Méthodes Variationnelles d'ensemble	14
2.9	Estimation du maximum a posteriori	14
2.10	Méthodes de minimisation	15
2.11	Méthode 3DVar	15
2.12	Equivalence avec la mise à jour de Kalman	15
2.13	Filtre de Kalman d'Ensemble (EnKF)	16
2.14	Méthode variationnelle d'ensemble	17
2.15	Conclusion	17
3	Simulation du tambour et Assimilation de données	18
3.1	Ecoulement granulaire dans un tambour en rotation	18
3.2	Méthode des éléments discrets (DEM)	18
3.2.1	DEM et la DA	19

3.3	Méthode des points matériaux (material point method, MPM)	19
3.3.1	La MPM et la DA	20
3.4	Vortex-In-Cell : un modèle grille-particules simplifié	20

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. [7].
- 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'oxyde uranium enrichi

1.1.1 Le combustible Nucléaire

1.1.2 La fabrication du combustible

Broyeur à boulets

Nous nous intéressons à l'étape de mélange-broyage dans le procédé de fabrication du MOX à l'aide du broyeur à boulet. Un mélange d'oxyde d'uranium, d'oxyde de plutonium et de chamotte est concassé dans un broyeur à boulet. Ce dispositif cylindrique, rempli de boules de broyage, met en oeuvre un processus de rotation pour broyer finement le mélange de poudres d'oxyde. Sa performance est critique pour la qualité du produit final et sa sûreté d'utilisation dans les réacteurs nucléaires.

1.2 Données mesurées

Si le procédé de tambour en rotation a pu être simulé via des méthodes numériques, la validation et la compréhension du procédé se voient renforcés par l'utilisation accrue de méthodes de mesure durant la phase de fonctionnement. Issue de capteurs, nous les classerons en deux types. Tout d'abord l'instrumentation sans contact *Off-Shell*, qui ne sont pas solidaire du tambour en rotation. Dans cette famille de capteurs, on trouve des mesures par imagerie dans le visible et l'infrarouge. Via l'utilisation d'une paroi transparente, l'écoulement peut être filmé pour analyser le déplacement du milieu granulaire et des corps broyants. De plus, les mesures par corrélation d'image comme la méthode de *Particle Image Velocimetry* (PIV) permettent, par l'analyse des variations de motifs ou de structures entre des images successives, d'extraire des informations sur les déplacements, et ainsi d'en déduire le champ de vitesse. Ainsi, dans [4] des caméras ont permis d'extraire les profils de température granulaire et de vitesse d'écoulement pour un tambour en rotation. Egalement, dans [?], une caméra thermique permet qu'en a elle de mesurer la température lors de l'écoulement.

Un autre type de mesure se base sur des analyse acoustiques. En particulier dans les travaux de [?] des mesures acoustiques ont été réalisées sur un broyeur à boulets pour prédire la broyabilité du minerai et ajuster les densités de pulpe, montrant que l'émission acoustique varie selon la dureté des matériaux broyés. Dans [?], la charge d'un broyeur est corrélée pour suivre les mouvements et les différents régimes à l'intérieur du tambour.

Finalement, des mesures vibratoires peuvent être acquis instrumentant des corps broyants pour évaluer la charge solide à l'intérieur du broyeur à boulets, en capturant les signaux d'accélération à l'aide d'un accéléromètre triaxial intégré [?].

Une seconde classe d'instrumentation consiste à réaliser des mesures avec contact (*On-Shell*) c'est à dire directement sur la paroi du tambour. Dans ce cadre, l'analyse de données vibratoires à partir d'accéléromètres permettent de mieux comprendre la position de la charge du broyeur, son niveau global ainsi que l'impact sur les revêtements [?]. Des jauges de contraintes peuvent aussi être appliquées. Dans [9] celle-ci permettent d'étudier la position du pied et de l'épaule de l'écoulement. Enfin, les données issues du moteur peuvent être utilisées tel que le couple moteur, la vitesse de rotation ou sa puissance. Ainsi, dans [6], l'analyse dans le domaine fréquentiel du couple a été calibré pour prédire le taux de remplissage.

Une large gamme de mesures sont donc disponibles. La qualité des résultats analysée reste néanmoins très variable. En effet, l'interprétabilité de bon nombre ce fait au travers de méthode de corrélation et non pas via des approches inductives.

Deux types de données sont disponibles au SA3E pour alimenter ce modèle virtuel.

Mesures du champ de vitesse Nous disposons de mesures du champ de vitesse capturées à travers la face avant d'un hublot transparent. Ces données offrent un aperçu direct du comportement dynamique des matériaux à l'intérieur du broyeur, permettant notamment d'observer le profil d'écoulement du mélange et le champ de vitesse du mélange.

Mesures acoustiques L'analyse du son émis par le broyeur peut révéler des informations sur divers aspects du processus, tels que les conditions de fonctionnement, les anomalies potentielles, ou encore l'usure des éléments du broyeur.

1.3 Jumeau Numérique

Le jumeau numérique est une réplique virtuelle d'un système physique, permettant de simuler, d'analyser et de prédire le comportement du système physique en temps réel. Ce modèle numérique intègre des données dynamiques et historiques, permettant une représentation précise et synchronisée dans le temps. Dans le contexte industriel, les jumeaux numériques utilisent l'intelligence artificielle (IA), l'analyse de données, et les capteurs physiques pour améliorer la compréhension des processus et faciliter la prise de décisions.

1.3.1 Apport du jumeau numérique pour le broyeur à boulet

Apport 1 : compréhension du procédé Le jumeau numérique permet de comprendre les phénomènes se déroulant à l'intérieur du broyeur à boulets, sans avoir à l'ouvrir. Il permet ainsi d'extraire de l'information quant aux mécanismes se déroulant lors de la comminution.

Apport 2 : optimisation du processus de broyage Le jumeau numérique du broyeur à boulets permet d'analyser et de simuler le processus de broyage en temps réel. Il peut prédire l'efficacité du broyage, le degré de mélange des matériaux, et les impacts des variables opérationnelles comme la vitesse de rotation et le taux de remplissage des boules. Cela aide à optimiser les paramètres de fonctionnement pour obtenir un mélange homogène et efficace. En particulier, un apprentissage par renforcement permet de construire un modèle capable d'optimiser les paramètres du procédé en temps réel.

Apport 3 : maintenance prédictive En surveillant l'état du broyeur à boulets, le jumeau numérique peut prédire les besoins de maintenance avant que les défaillances ne surviennent. Cela réduit les temps d'arrêt imprévus, augmente la durée de vie de l'équipement et assure une production continue et fiable.

Apport 4 : contrôle de la qualité du produit La précision du jumeau numérique dans la modélisation du processus de broyage aide à garantir que le combustible MOX répond aux normes de qualité attendues.

1.3.2 Défis associés à la construction du jumeau numérique

Défi 1 : données physiques La première difficulté réside dans la collecte des données physiques. Le broyeur à boulets étant un système complexe, il nécessite un suivi détaillé des paramètres tels que la vitesse de rotation, des mesures acoustiques, ou d'un champ de vitesse. La collecte de ces données en temps réel et de manière fiable est cruciale pour assurer la représentativité du jumeau numérique.

Défi 2 : modélisation et simulation numérique Le deuxième défi est la modélisation précise du broyeur à boulets. Ce processus nécessite une compréhension approfondie des mécanismes du broyage. La création de modèles numériques qui capturent fidèlement ces phénomènes est complexe et exige une expertise en mécanique. De plus, pour une utilisation en temps réel, ces

modèles doivent être suffisamment efficaces pour permettre de suivre le procédé. Ce problème de rapidité de calcul peut néanmoins être évité par l'utilisation d'un métamodèle.

Défi 3 : assimilation de données (data assimilation, DA) Le dernier défi concerne l'intégration des données réelles dans les modèles numériques. La DA implique l'ajustement des modèles basés sur les données physiques collectées, pour améliorer leur précision et leur fiabilité. Cela nécessite des algorithmes avancés capables de traiter de grandes quantités de données, souvent hétérogènes, tout en gérant les incertitudes et les erreurs inhérentes aux mesures. Le développement de ces algorithmes doit tenir compte des spécificités du processus de broyage dans le contexte du MOX, ce qui représente un véritable défi en matière de fusion de données et d'apprentissage automatique.

La construction d'un jumeau numérique pour un broyeur à boulets dans la fabrication du MOX est une activité multidisciplinaire, exigeant une expertise en modélisation et simulation, en expérimentation, et en sciences des données.

1.4 Objectif

Pour aborder efficacement l'assimilation de données avec la MPM, il est essentiel de maîtriser d'abord l'assimilation de données dans des contextes plus simples, comme celui offert par la méthode VIC. Avec sa structure plus basique impliquant une grille de calcul et des particules transportant des quantités scalaires, l'approche VIC sert de préalable pour développer et affiner les techniques d'assimilation de données nécessaires pour des approches plus complexes comme la MPM.

À ce jour, deux méthodes principales ont été développées pour l'assimilation de données dans le cadre de la méthode VIC. Ces méthodes visent à intégrer efficacement les observations dans le modèle de simulation pour améliorer la précision et la fiabilité des prédictions.

Remesh-EnKF

La première approche, nommée **Remesh-EnKF** (Remeshing Ensemble Kalman Filter), se concentre sur l'assimilation de données au niveau de la grille. Dans cette méthode, l'assimilation de données est effectuée en premier sur la grille. Ensuite, un maillage de particules est régénéré, ce qui permet de transférer les informations mises à jour de la grille vers les particules. Cette étape est cruciale pour maintenir la cohérence entre les données sur la grille et les caractéristiques physiques des particules. Enfin, un processus de troncature est appliqué pour éliminer les particules ayant une intensité trop faible, permettant ainsi d'optimiser les ressources de calcul et de conserver uniquement les particules significatives pour la dynamique du fluide.

Part-EnKF

La seconde approche, appelée **Part-EnKF** (Particle Ensemble Kalman Filter), propose une stratégie différente en effectuant l'assimilation directement sur les intensités des particules, sans nécessiter de remaillage. Cette méthode met l'accent sur la mise à jour des caractéristiques des particules individuelles, en tenant compte de leurs intensités et positions. Contrairement à la Remesh-EnKF, la Part-EnKF évite les difficultés liées au remaillage de particules, en se concentrant uniquement sur la mise à jour des attributs des particules existantes.

Chapitre 2

Assimilation de Données

2.1 Introduction

La DA est un processus permettant d'intégrer des informations issues de différentes sources pour obtenir une compréhension plus précise et plus complète d'un système ou d'un phénomène. Cette méthode combine des données observées (mesures réelles) avec des prévisions issues de modèles numériques. L'objectif est de corriger et d'améliorer les modèles en fonction des observations, réduisant ainsi les incertitudes et améliorant la précision des prévisions. Dans ce processus, les observations, qui peuvent être incomplètes ou entachées d'erreurs, sont confrontées aux prévisions du modèle au cours du temps. Le modèle est ensuite ajusté pour mieux correspondre aux données réelles. Il s'agit donc de résoudre un problème inverse en prenant en compte l'aspect dynamique du phénomène. Cette méthode est largement utilisée dans divers domaines tels que la météorologie, l'océanographie, la géophysique, et l'ingénierie environnementale. Par exemple, en météorologie, la DA est essentielle pour les prévisions météorologiques en intégrant des données satellites et des mesures au sol dans les modèles atmosphériques.

L'assimilation peut être décrite 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.

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.

2.2.1 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 $\mathcal{X}_k = \{\mathbf{x}_0, \dots, \mathbf{x}_k\}$ la trajectoire du modèle jusqu'au pas de temps t_k . Nous supposons que le modèle admet des incertitudes. Celle-ci sont issues de

- L'erreur de discrétisation dans l'espace et le temps. Soit \mathbf{x}^c l'état réel continu. Le modèle numérique ne traite que des représentations discrètes du champ physique. Ainsi, c'est non pas l'état \mathbf{x}^c qui est estimé mais une projection dans l'espace de discrétisation. Ainsi on estimera $\mathbf{x}^t = \Pi(\mathbf{x}^c)$, où Π est un projecteur sur l'espace de discrétisation. On parle ici d'erreur de représentativité.
- L'erreur de modèle. C'est un modèle numérique qui calcule l'évolution de l'état simulé. Tout modèle étant imparfait, toutes les physiques ne peuvent être prises en compte. C'est une erreur qui tient compte de la mauvaise représentation de l'évolution du système mais également de la discrétisation.

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

$$\mathbf{x}_k \mathcal{M}(\mathbf{x}_0, t_k; \boldsymbol{\theta}) + \boldsymbol{\eta}_k.$$

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

2.2.2 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

- Erreur de mesure. L'observable \mathbf{y}^c est issue d'un signal réel fonction de l'état continu \mathbf{x}^c . Or ce signal est mesuré par un capteur sujet à des erreurs instrumentales $\boldsymbol{\varepsilon}^{mu}$.
- Erreur de représentativité. L'observation est prédite par un opérateur d'observation numérique \mathcal{H} via \mathbf{x}_k . Ainsi une erreur supplémentaire est induite par la représentation de l'opérateur \mathcal{H} et celle de la projection de l'état continu avec Π .

En supposant que ces erreurs sont additives, on définit la formule suivante

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

où $\boldsymbol{\varepsilon}_k = \boldsymbol{\varepsilon}^\mu + \boldsymbol{\varepsilon}^r$ définit l'incertitude sur l'observation \mathcal{D}_k relatif à la prédiction \mathcal{X}_k .

2.2.3 Inférence Bayésienne récursive

Le problème d'assimilation de données peut être formulé sous une approche d'inférence Bayésienne. Celle-ci est une méthode statistique pour estimer l'état \mathcal{X}_k en utilisant à la fois une information a priori et les données observées. Cette méthode repose sur le théorème de Bayes qui décrit la relation entre la distribution a priori de l'état $p(\mathcal{X}_k)$, la vraisemblance des données $p(\mathcal{D}_k \mid \mathcal{X}_k)$ conditionnellement à l'état et la distribution a posteriori de l'état étant donné les données observées, donnant alors

$$p(\mathcal{X}_k \mid \mathcal{D}_k) = \frac{(\mathcal{D}_k \mid \mathcal{X}_k) p(\mathcal{X}_k)}{p(\mathcal{D}_k)}$$

où $p(\mathcal{D}_k)$ est la distribution marginale des observations. Elle agit comme constante de normalisation afin d'assurer que l'intégrale de la distribution a posteriori vaut bien un

$$p(\mathcal{D}_k) = \mathbb{E}_{\mathcal{X}_k}[\mathcal{D}_k \mid \mathcal{X}_k]$$

Nous souhaitons résoudre le problème d'assimilation de manière séquentielle. C'est à dire, mettre à jour l'état à chaque nouvelle observation à l'instant t_k . Pour ce faire, nous utilisons deux approximations

- Le modèle dynamique est une chaîne de Markov d'ordre 1. Cette hypothèse suppose que l'état futur \mathbf{x}_{k+1} est indépendant des états passé \mathcal{X}_{k-1} conditionnellement à l'état présent \mathbf{x}_k . Le modèle dynamique s'écrit alors

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

ce qui implique mathématiquement que

$$p(\mathbf{x}_{k+1} \mid \mathbf{x}_k, \mathbf{x}_{k-1} \dots \mathbf{x}_0) = p(\mathbf{x}_{k+1} \mid \mathbf{x}_k).$$

Ainsi, la probabilité de l'état $p(\mathcal{X}_k) = p(\{\mathbf{x}_0, \dots, \mathbf{x}_k\})$ devient

$$\begin{aligned} p(\mathcal{X}_k) &= p(\mathbf{x}_0)p(\mathbf{x}_1 \mid \mathbf{x}_0)p(\mathbf{x}_2 \mid \mathbf{x}_1) \dots p(\mathbf{x}_k \mid \mathbf{x}_{k-1}) \\ &= p(\mathbf{x}_0)p(\mathbf{x}_1 \mid \mathbf{x}_0) \prod_{l=1}^k p(\mathbf{x}_l \mid \mathbf{x}_{l-1}). \end{aligned}$$

- Les observations sont indépendantes entre chaque assimilation. Cette hypothèse suppose que les observations présentes \mathbf{y}_k est indépendante des états et observations passé conditionnellement à \mathbf{x}_k . Ceci correspond à définir une loi d'émission local

$$\mathbf{y}_k = \mathcal{H}(\mathbf{x}_k) + \boldsymbol{\varepsilon}_k$$

et une vraisemblance comme le produit de vraisemblance locale

$$p(\mathcal{D}_k \mid \mathcal{Z}_k) = \prod_{l=1}^k p(\mathbf{y}_l \mid \mathbf{x}_l)$$

Ainsi la trajectoire de l'état et des observation suis les hypothèses d'un modèle de Markov cachés, ici à temps discret, et qui peut être schématisé par le schéma Figure 2.1.

FIGURE 2.1 – Chaîne de Markov cachée **Mettre un graph Bayésien.**

2.2.4 Estimation des paramètres du modèle par augmentation de l'état

Nous avons supposé que le système était complètement décrit par la variable d'état \mathbf{x} que nous souhaitons estimé. Cependant, nous avons aussi supposé que le modèle était imparfait car ne modélisant pas toute la physique de la dynamique mais parce que les paramètres du modèle $\boldsymbol{\theta}$ ne sont pas connu avec certitude. L'estimation ou calibration de ces paramètres est possible en définissant un état augmenté $\mathbf{z} = (\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta})$.

Le modèle d'évolution est toutefois différent car les paramètres du modèle sont supposé constant dans le temps tel que

$$\begin{cases} \mathbf{x}_{k+1} &= \mathcal{M}(\hat{\mathbf{x}}_k) + \boldsymbol{\eta}_{k+1} & , \\ \mathbf{y}_{k+1} &= \mathcal{H}(\mathbf{x}_{k+1}) + \boldsymbol{\varepsilon}_{k+1} & , \\ \boldsymbol{\theta}_{k+1} &= \boldsymbol{\theta}_{k+1} + \boldsymbol{\xi}_{k+1} & . \end{cases}$$

L'ajout des paramètres dans la variable d'état a pu être utilisé pour résoudre des problèmes inverses sans avoir besoin de calcul de gradient [3].

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 courantes $y_{1:k}$ 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

$$p_{\mathbf{X}_{k+1}}^{[k]}(\mathbf{x}) = \int p_{\mathbf{X}_{k+1}|\mathbf{X}_k=\mathbf{x}'}(\mathbf{x}) p_{\mathbf{X}_k}^{[k]}(\mathbf{x}') d\mathbf{x}' \quad (2.1)$$

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 appliquée après mesure de \mathbf{Y}_n

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

2.4 Propagation

En pratique, il est difficile de réaliser la propagation de la distribution de l'état. En effet, l'évolution du prior nécessite de propager entièrement la distribution à l'aide de l'équation de Fokker-Planck, celle-ci ne pouvant être résolue qu'en dimension faible [1].

Une première alternative consiste à uniquement considérer l'évolution pour les deux premiers moments. Dans ce cas, il s'agit de considérer que l'erreur de l'état \mathbf{x}_k suit une distribution Gaussienne $\mathcal{N}(0, \mathbf{P}_k)$. Si le modèle d'évolution $\mathcal{M} = \mathbf{M}$ est linéaire, alors la matrice de covariance de l'état \mathbf{x}_{k+1} devient

$$\mathbf{P}_{k+1} = \mathbf{M} \mathbf{P}_k \mathbf{M}^T + \mathbf{Q}_k$$

où \mathbf{Q}_k est la matrice de covariance de l'erreur de modèle.

Cette proposition est un des éléments utilisés dans le filtre de Kalman [?]. Dans le cas où le modèle n'est pas linéaire, alors une approximation peut être obtenue par linéarisation du modèle.

Une autre possibilité consiste à utiliser un ensemble pour représenter la distribution de l'état. L'état est représenté par un ensemble d'échantillons ou particules tel que $p(\mathbf{x}_k) = \sum_{i=1}^N$

2.5 Hypothèses et filtres

Dans les parties suivantes, nous présenterons quatre familles de méthode de filtrage.

présenter les différentes méthodes

- le filtre particulaire - filtre bayésien non linéaire sur distributions empirique
- filtre de Kalman - filtre bayésien modèle linéaire, distributions gaussienne
- Méthode Variationnelle d'ensemble - filtre non linéaire, distribution gaussienne
- filtre de Kaman d'Ensemble - filtre non linéaire, distribution gaussienne

Celles-ci diffèrent par un certains nombres d'hypothèses que nous avons regroupé dans la Table et représenté sur la Figure Faire un schéma des différentes méthodes de filtrage avec les hypothèses associées.

2.6 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 2.1 peut être réécrite

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

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 développées. Le filtre bootstrap [2] consiste à sélectionner les membres de poids les plus élevés, de les cloner de manière proportionnelle à leurs poids. Après échantillonnage, N particules sont rassemblées, dont certaines sont identiques avec des approximatifs 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*.

2.7 Filtre de Kalman

2.7.1 Loïc redaction

Le filtre de Kalman est une méthode algorithmique efficace pour estimer l'état d'un système dynamique en présence d'incertitudes. Il est largement utilisé dans divers domaines tels que le contrôle de processus, la navigation et le traitement du signal. Le filtre de Kalman est une approche séquentielle permettant de mettre à jour l'état estimé au cours du temps, au fur et à mesure que les observations sont collectées.

L'une des hypothèses fondamentales du filtre de Kalman est la linéarité. Le système est supposé être décrit par des équations linéaires, tant pour l'évolution de son état que pour la relation entre les mesures et l'état du système. Cette hypothèse de linéarité est cruciale pour l'application directe du filtre de Kalman, car elle simplifie significativement les calculs impliqués.

Une autre hypothèse clé est que les erreurs, à la fois dans le processus et dans les mesures, suivent une distribution gaussienne. Cette hypothèse permet de décrire entièrement l'incertitude par la moyenne et la covariance, rendant le traitement des incertitudes soluble.

L'équation du filtre de Kalman peut être présentée en deux étapes principales : la ****prédiction**** et la ****mise à jour****. Dans la phase de ****prédiction****, l'état actuel du système est estimé à partir de son état précédent. On prédit l'état futur à partir du code de calcul noté F pour "Forward" :

$$\begin{aligned}x^f &= Fx^a, \\P_k^f &= FP_{k-1}^a F^T + B,\end{aligned}$$

où x^f est l'estimation de l'état à l'instant k sachant l'information jusqu'à l'instant $k-1$, et P_k^f est la covariance de l'estimation de l'erreur. B est la covariance du bruit du processus. Les indices f et a indiquent respectivement les états prédits ("forecast") et assimilés ou analysés.

Dans la phase de mise à jour, l'estimation est affinée à l'aide des nouvelles mesures :

$$\begin{aligned}K &= P_k^f H^T (H P_k^f H^T + R)^{-1} \\x^a &= x^f + K(y - Hx^f) \\P_k^a &= (I - KH)P_k^f\end{aligned}$$

Ici, K est le gain de Kalman, y est la mesure à l'instant k , H est la matrice qui relie l'état aux mesures, R est la covariance du bruit de mesure, et I est la matrice identité. P_k^a est la covariance mise à jour de l'erreur d'estimation.

En résumé, le filtre de Kalman fournit une méthode systématique pour intégrer de manière optimale les informations issues des mesures et des modèles dans des systèmes linéaires et gaussiens, offrant ainsi des estimations précises de l'état des systèmes dynamiques. Tout en fournissant une estimation de l'état d'un système, intègre intrinsèquement les incertitudes associées à cette estimation à travers la matrice de covariance P_k^a , reflétant ainsi la variabilité et l'imprécision inhérentes aux données et au modèle utilisé.

2.7.2 My redaction

Le filtre de Kalman introduit en 1960 [5] 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{P}_{k+1} sont mis à jour à partir du *gain de Kalman* $K = C_{X,Y}C_{Y,Y}^{-1}$ et du *terme d'innovation* ($y_{k+1} - m_Y$) de telle sorte que les précédentes équations s'écrivent

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

Finalement, on peut réécrire

Données : Initialisation de l'état m_x et de sa covariance P ;

pour $k \geq 1$ **faire**

 Prédiction;

$\hat{m}_x = Mm_x$;

$\hat{P} = M\mathbb{E}[X_{k+1}^k]M^T + Q$;

 Observation de $Y \rightarrow y$ Analyse;

 Calcul du gain de Kalman : $K = \hat{P}H^T(H\hat{P}H^T + R)^{-1}$;

 Calcul de l'analyse;

$m_x = \hat{m}_x + K(y - H\hat{m}_x)$;

 Calcul de la matrice de covariance de l'état;

Algorithme 2 : Filtre de Kalman

2.8 Méthodes Variationnelles d'ensemble

2.9 Estimation du maximum a posteriori

La distribution a posteriori précédemment définie permet dans un premier temps de pouvoir définir l'estimateur 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 particulière 2.6.

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}

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

Le MAP peut être obtenu par des méthodes d'optimisation numérique en fonction de la complexité de la distribution.

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 précédentes sont définies comme

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\eta} &\sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, P_{k+1}), & p(\mathbf{x}_{k+1}) &= \mathcal{N}(\mathbf{x}_{k+1}^f, P_{k+1}) \\ \boldsymbol{\varepsilon} &\sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, R), & p(\mathbf{y}_{k+1}) &= \mathcal{N}(\mathbf{g}(\mathbf{x}_{k+1}^f), R_{k+1})\end{aligned}$$

où $\mathbf{x}_{k+1}^f = \mathcal{M}(\mathbf{x}_k)$ l'état prédit par le modèle. Nous nous intéressons maintenant à l'étape de mise à jour à l'instant $k+1$, l'indice temporel sera implicite pour le reste de la section.

La distribution a posteriori peut être réécrite comme

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

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

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

Le problème à minimiser devient alors

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

Cette définition est à l'origine d'un ensemble de méthodes variationnelles pour l'assimilation de données dont la méthode 3DVar ou 4DVar couramment utilisé en météorologie [8]. Le minimum de cette fonction est obtenue en annulant son gradient qui se trouve être

$$\nabla_{\mathbf{x}} \mathcal{L}(\mathbf{x}^a) = \mathbf{P}^{-1}(\mathbf{x}^a - \mathbf{x}^f) + \nabla_{\mathbf{x}^a} \mathbf{h}(\mathbf{x}^a) \mathbf{R}^{-1}(\mathbf{h}(\mathbf{x}^a) - \mathbf{d}) = \mathbf{0}.$$

On peut aussi faire plusieurs remarques :

- L'inverse de la dérivée seconde de la fonction coût \mathcal{L} , 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 itérative,

2.10 Méthodes de minimisation

2.11 Méthode 3DVar

La méthode 3DVar est un cas particulier de l'équation précédente qui permet de résoudre le problème de minimisation de la solution itérative à faible coût. Elle consiste à supposer fixe et connu les matrices de covariance \mathbf{P} et \mathbf{R} . Ainsi, la matrice Hessienne \mathbf{B} est donnée par \mathbf{P}

2.12 Equivalence avec la mise à jour de Kalman

Elle se place dans le cas où la fonction d'observation est linéaire $\mathbf{h}(\mathbf{x}) = \mathbf{H}\mathbf{x}$.

$$\mathcal{L}_{3D}(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_b\|_{\mathbf{P}^{-1}}^2 + \frac{1}{2} \|\mathbf{y} - \mathbf{H}(\mathbf{x})\|_{\mathbf{R}^{-1}}^2$$

Dans ce cas, l'annulation du gradient de la fonction coût se réduit à l'expression suivante

$$\mathbf{P}^{-1}(\mathbf{x}^a - \mathbf{x}^f) + \mathbf{H}^T \mathbf{R}^{-1}(\mathbf{H}\mathbf{x}^a - \mathbf{d}) = \mathbf{0},$$

Ce qui nous permet d'obtenir une expression à l'estimateur MAP

$$\mathbf{x}^a = \mathbf{x}^f + (\mathbf{P}^{-1} + \mathbf{H}^T \mathbf{R}^{-1} \mathbf{H})^{-1} \mathbf{H}^T \mathbf{R}^{-1}(\mathbf{d} - \mathbf{H}\mathbf{x}^f),$$

qui est l'expression de la mise à jour dans l'espace d'état. Il peut être coûteux d'inverser la matrice $(\mathbf{P}^{-1} + \mathbf{H}^T \mathbf{R}^{-1} \mathbf{H})^{-1}$ si l'espace d'état est de grande dimension. En appliquant deux fois la formule de Sherman-Morrisson-Woodbury, si \mathbf{P}^{-1} et \mathbf{R}^{-1} sont inversibles, la mise à jour peut être réécrite dans l'espace de mesure

$$(\mathbf{P}^{-1} + \mathbf{H}^T \mathbf{R}^{-1} \mathbf{H})^{-1} = \mathbf{P} \mathbf{H}^T (\mathbf{H} \mathbf{P} \mathbf{H}^T + \mathbf{R})^{-1}$$

Ainsi la matrice de covariance d'état \mathbf{P} ne nécessite pas d'être inversée. De plus on retrouve le gain de Kalman $\mathbf{K} = \mathbf{P} \mathbf{H}^T (\mathbf{H} \mathbf{P} \mathbf{H}^T + \mathbf{R})^{-1}$ précédemment défini. Cette estimateur ainsi obtenu est également le BLUE (*Best Linear Unbiased Estimator*). C'est en effet, l'expression est la combinaison linéaire de \mathbf{x}^f et \mathbf{d} dont l'erreur ε^a est non biaisée ($\mathbb{E}[\varepsilon^a] = 0$), et dont la variance est minimale ($\text{Tr}(\mathbf{P}^a)$).

Finalement, sachant que la posterior est Gaussienne, en prenant l'inverse de dérivée seconde de la fonction coût, la matrice de covariance peut être obtenue

$$(\mathbf{P}^a)^{-1} = \mathbf{P}^{-1} + \mathbf{H} \mathbf{R}^{-1} \mathbf{H}^T$$

De nouveau avec l'identité de SMW

$$(\mathbf{I} - \mathbf{K} \mathbf{H}) \mathbf{P}$$

qui n'est autre que la mise à jour de la covariance avec le filtre de Kalman.

2.13 Filtre de Kalman d'Ensemble (EnKF)

Pour surmonter les limitations du filtre de Kalman classique et du filtre particulaire, le filtre de Kalman d'ensemble (EnKF) a été développé. L'EnKF est une méthode d'assimilation de données qui utilise un ensemble de prévisions pour estimer l'état et les incertitudes d'un système. Contrairement au filtre de Kalman classique, qui est optimal pour des systèmes linéaires et des erreurs gaussiennes, l'EnKF est plus robuste quant aux non-linéarités et aux distributions non gaussiennes.

L'EnKF fonctionne en générant un ensemble de prévisions (ou états) $(x_i^f)_{i=1}^N$ à partir du modèle. Chaque membre de l'ensemble est ensuite mis à jour indépendamment en utilisant les observations disponibles. Les équations de l'EnKF peuvent être présentées comme suit :

- **Étape de Prédiction** :

$$x_i^f = F(x_i^a),$$

où x_i^f est la prévision du i-ème membre de l'ensemble, et M est le modèle du système.

- **Étape de Mise à Jour** :

$$x_i^a = x_i^f + K(y_i - h_i^f),$$

avec K le gain de Kalman, calculé comme :

$$K = \text{cov}(x^f, h^f)(\text{cov}(h^f, h^f) + R)^{-1}$$

où cov est l'opérateur de covariance, $(h_i^f)_{i=1}^N$ est l'ensemble d'observations prédites, et R est la covariance du bruit de mesure.

Dans l'EnKF, x_i^a est l'état analysé (ou mis à jour) pour le i -ème membre de l'ensemble, et y_i représente les observations. Cette méthode permet de capturer la distribution de probabilité de l'état du système de manière plus efficace et avec moins de charge de calcul que le filtre particulier, surtout dans les systèmes de grande dimension.

Cette version de l'EnKF est parfois appelé EnKF stochastique car les observations y_i correspondent aux données mesurées bruitées, i.e. $y_i = y + \varepsilon_i$ où ε_i correspond au bruit de mesure. Ce bruit numérique permet de supprimer un biais statistique sur l'estimation de l'état.

2.14 Méthode variationnelle d'ensemble

Tout comme l'équivalence entre forme variationnelle

2.15 Conclusion

Nous avons proposer différentes formulation du problème de filtrage. Après un rappel de la formulation Bayésienne du problème, nous avons montrer que des formulations séquentielles

Chapitre 3

Simulation du tambour et Assimilation de données

Nous avons vu dans le chapitre précédent que l'assimilation dépendait de la définition d'un modèle et de son état pour définir le prior et la vraisemblance. Nous nous intéressons à simuler l'écoulement dans le broyeur à boulets. La physique de l'écoulement granulaire sera dans un premier temps décrite puis différentes modélisations seront introduites. Celle-ci seront mise au regard des méthodes d'assimilation de données.

3.1 Ecoulement granulaire dans un tambour en rotation

3.2 Méthode des éléments discrets (DEM)

La méthode des éléments discrets (DEM, pour Discrete Element Method) est une technique de simulation numérique utilisée pour étudier le comportement des systèmes de particules, tels que lors du mélange broyage à l'intérieur du broyeur à boulets. Cette approche est particulièrement pertinente pour modéliser les interactions complexes entre les particules dans ces systèmes, où la dynamique individuelle de chaque particule peut avoir un impact significatif sur le processus global.

Dans un mélangeur-broyeur, les particules interagissent entre elles, avec les parois du broyeur, et avec le corps broyant. La DEM modélise chaque particule individuellement, en tenant compte de ses propriétés physiques telles que la taille, la forme, la masse, la rigidité, et le modèle de fragmentation. Les interactions incluent les forces de contact, les forces de frottement, et les forces de cohésion.

Le processus de simulation DEM dans un mélangeur-broyeur commence par la définition des propriétés des particules et des conditions initiales du système. Le mouvement de chaque particule est ensuite calculé en résolvant les équations de Newton pour le mouvement et la rotation. Ces calculs tiennent compte des forces et des moments résultant des collisions et des interactions entre particules, ainsi que de l'interaction des particules avec les parois du broyeur.

L'un des principaux avantages de la DEM est sa capacité à fournir des informations détaillées sur le mélange et le broyage des particules à l'échelle microscopique. Elle permet d'analyser comment les variations dans la configuration des particules, la vitesse de rotation du broyeur, et d'autres paramètres opérationnels influencent l'efficacité du broyage et l'homogénéité du mélange.

Cependant, l'utilisation de la DEM pour la simulation de mélangeurs-broyeurs peut être exigeante en termes de ressources informatiques, en particulier pour les systèmes avec un grand nombre de particules.

3.2.1 DEM et la DA

L'assimilation de données, lorsqu'elle est appliquée à des systèmes simulés par la méthode des éléments discrets (DEM), se heurte à plusieurs limites importantes présentées ci-dessous en plus du temps de calculs élevé pour des systèmes de grande taille.

Limites de la DEM avec les méthodes variationnelles

Dans le cadre des méthodes variationnelles d'assimilation de données, telles que 3D-Var et 4D-Var, le principal défi est la grande dimensionnalité du problème d'optimisation.

La DEM simule le comportement de chaque particule individuellement, ce qui signifie que l'état du système comprend la position et la vitesse de chaque particule. Pour un système avec des milliers voire des millions de particules, cela conduit à un problème d'optimisation de très grande dimension.

De plus, il existe un nombre extrêmement élevé de contraintes, notamment l'interdiction de l'interpénétration des particules. Ces contraintes doivent être prises en compte pour assurer que la solution d'optimisation soit physiquement admissible.

L'application des méthodes 3D-Var et 4D-Var est donc trop exigeante d'un point de vue des temps de calcul.

Limites de la DEM avec EnKF

Pour l'EnKF, l'état estimé du système est une combinaison linéaire des états prédits par les différents membres de l'ensemble. Cependant, dans le contexte de la DEM, cette combinaison linéaire des états n'est pas nécessairement physiquement admissible. Par exemple, elle pourrait conduire à des situations où les particules s'interpénètrent ou violent d'autres lois physiques.

Un autre problème avec l'EnKF dans le contexte de la DEM est la difficulté de faire correspondre les particules entre les différents membres de l'ensemble. Chaque particule a sa propre trajectoire unique, et aligner ces trajectoires à travers les différents membres de l'ensemble pour une assimilation de données cohérente est un défi complexe. Cette difficulté est exacerbée par le nombre élevé de particules et par la nature dynamique et chaotique de leurs interactions.

3.3 Méthode des points matériaux (material point method, MPM)

La méthode des points matériaux (MPM) est une technique de simulation numérique innovante, particulièrement adaptée à la modélisation de phénomènes complexes comme ceux rencontrés dans les mélangeurs-broyeurs. Cette méthode représente un compromis entre les approches par éléments finis et par particules, offrant ainsi une modélisation efficace des interactions matérielles dans des environnements dynamiques et déformables.

Dans la MPM, l'intérieur du tambour d'un mélangeur-broyeur est conceptualisé comme un milieu continu, adoptant une perspective macroscopique. La réponse du milieu est alors représentée par une loi de comportement mécanique telle que la loi de Drucker-Prager. Cela contraste avec la méthode des éléments discrets (DEM), qui se concentrent sur les interactions particule-particule.

Le processus de simulation avec la MPM implique des itérations entre une grille de calculs et des particules matérielles. Chaque particule porte des informations essentielles associées au matériau, telles que la masse, le volume, et les propriétés mécaniques (variables internes, gradient de déformation...). Ces particules sont utilisées pour transférer des informations sur et hors d'une grille de calculs, où les équations de mouvement et de comportement du matériau sont résolues.

Cette approche hybride permet à la MPM de capturer efficacement les déformations importantes, les ruptures, et d'autres comportements complexes du milieu qui sont fréquents dans les opérations de mélange et de broyage. En revanche, la description fine du phénomène proposée par la DEM n'est plus disponible.

En termes de temps de calculs, la MPM est plus efficace que la DEM.

3.3.1 La MPM et la DA

La MPM offre un cadre exploitable pour mettre en place une méthode de DA. La structure de grille sous-jacente à la MPM permet une modélisation l'utilisation des méthodes variationnelles ou des méthodes d'ensemble. La structure de particules est aussi plus flexible dans le sens où elles représentent une densité de matière : elles peuvent donc s'interpénétrer.

MPM et méthodes variationnelles

Le principal défi est de gérer la dimension du problème d'optimisation pour la 3D-Var, ainsi que construire un modèle adjoint pour la 4D-Var. Deux pistes sont envisageables : mettre à jour les champs nodaux et les champs particuliers. Comparativement à la DEM, le nombre de variables et le nombre de contraintes sont drastiquement réduits au prix d'une représentation plus grossière.

MPM et EnKF

Pour l'EnKF, l'état estimé est une combinaison linéaire des états prédits. Dans le contexte de la MPM, cela signifie que la mise à jour de l'état peut être directement effectuée sur la grille de calcul, plutôt que sur les particules individuelles. Cette approche réduit la complexité des calculs et facilite l'assimilation de données dans des systèmes à grande échelle.

Cependant, l'intégration de la MPM avec l'EnKF soulève plusieurs questions importantes :

1. ****Transfert d'Informations de Particules à la Grille**** : La première question concerne le transfert efficace des informations des particules vers la grille. Cela nécessite des algorithmes précis pour garantir que les informations pertinentes sur les propriétés des matériaux, telles que la densité, la contrainte, et le gradient de déformation, sont correctement représentés sur la grille de calcul.
2. ****Remaillage de Particules pour Représenter l'État Mécanique**** : Une autre question clé est de savoir comment effectuer un remaillage des particules pour représenter fidèlement l'état mécanique du système après assimilation. Cela est crucial pour maintenir la cohérence et l'exactitude du modèle MPM, en particulier après des mises à jour successives de l'état du système.

3.4 Vortex-In-Cell : un modèle grille-particules simplifié

La méthode Vortex-In-Cell (VIC) est une technique de simulation numérique, considérée ici comme une version simplifiée de la MPM. Cette méthode est particulièrement utilisée pour

simuler les écoulements de fluides et les dynamiques de vortex. La VIC combine l'utilisation d'une grille de calcul avec des particules pour modéliser le mouvement des fluides.

Dans la méthode VIC, la grille sert de structure pour effectuer les calculs numériques liés à la dynamique des fluides, tandis que les particules, dispersées dans le fluide, transportent une quantité scalaire, la vorticité. Cette approche diffère de la MPM dans le sens où les particules portent des informations complexes sur les propriétés mécaniques du matériau.

Le processus de simulation avec la VIC implique d'abord le calcul des champs de vitesse sur la grille. Ces champs sont ensuite utilisés pour déplacer les particules dans le fluide, qui à leur tour transportent la vorticité à travers le domaine de simulation. L'avantage de cette méthode est sa capacité à modéliser avec précision les phénomènes complexes d'écoulement de fluides, tels que la formation et l'évolution de tourbillons, tout en maintenant une structure de calcul relativement simple.

Bibliographie

- [1] 4 Stochastic Differential Equations. In Andrew H. Jazwinski, editor, *Mathematics in Science and Engineering*, volume 64 of *Stochastic Processes and Filtering Theory*, pages 93–141. Elsevier, January 1970.
- [2] N.J. Gordon. Novel approach to nonlinear/non-gaussian bayesian state estimation. *IEEE Proceedings F (Radar and Signal Processing)*, 140 :107–113(6), April 1993.
- [3] Marco A. Iglesias, Kody J. H. Law, and Andrew M. Stuart. Ensemble Kalman methods for inverse problems. *Inverse Problems*, 29(4) :045001, March 2013. Publisher : IOP Publishing.
- [4] Ahmed Jarray, Vanessa Magnanimo, and Stefan Luding. Wet granular flow control through liquid induced cohesion. *Powder Technology*, 341 :126–139, January 2019.
- [5] R. E. Kalman. A New Approach to Linear Filtering and Prediction Problems. *Journal of Basic Engineering*, 82(1) :35–45, March 1960.
- [6] Francisco Pedrayes, J.G. Norniella, Manuel Melero, Juan Menendez-Aguado, and Juan Jose Díaz. Frequency domain characterization of torque in tumbling ball mills using DEM modeling : Application to filling level monitoring. *Powder Technology*, 323, October 2017.
- [7] Steffen Schlömer, Gesine Hänsel, David de Jager, and Maarten Neelis. Technology-specific Cost and Performance Parameters.
- [8] O. Talagrand. Assimilation of observations, an introduction. *Journal of the Meteorological Society of Japan*, 75(1B) :191–209, 1997.
- [9] Kent T. Tano, Bertil I. Pålsson, and Anders Sellgren. On-line lifter deflection measurements showing flow resistance effects in grinding mills. *Minerals Engineering*, 18(11) :1077–1085, September 2005.