

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

Ecole Polytechnique / CEA Cadarache

Marius Duvillard

14 juin 2024

Table des matières

0.1	Introduction	2
0.2	Ecoulement granulaire dans un tambour en rotation	4
0.2.1	Ecoulement granulaire et régime dans le broyeur	4
0.2.2	Rhéologie des milieux granulaire sous conditions homogènes	4
0.2.3	Ecoulement dans le tambour en rotation	4
0.2.4	Simulation du broyage	5
0.3	Simulation de l'écoulement dans un tambour en rotation	5
0.3.1	Approche continue	5
0.3.2	Approche discrète	5
0.3.3	Méthodes discrètes	6
0.4	Données mesurées	7
0.5	Jumeau Numérique	8
0.5.1	Apport du jumeau numérique pour le broyeur à boulet	8
0.5.2	Défis associés à la construction du jumeau numérique	9
0.6	Objectif	9
1	Assimilation de Données	11
1.1	Introduction	11
1.2	Définition du problème	11
1.2.1	Définition de l'état	11
1.2.2	Définition des observations	12
1.2.3	Inférence Bayésienne récursive	12
1.2.4	Estimation des paramètres du modèle par augmentation de l'état	13
1.3	Filtrage bayésien	14
1.4	Propagation	14
1.5	Hypothèses et filtres	15
1.6	Filtre particulaire	15
1.7	Filtre de Kalman	16
1.8	Filtre de Kalman d'Ensemble (EnKF)	17
1.9	Méthodes variationnelles	19
1.9.1	Estimation du maximum a posteriori	19
1.9.2	Méthodes de minimisation	20
1.9.3	Méthode 3DVar	20
1.10	Equivalence avec la mise à jour de Kalman	20
1.11	Méthode variationnelle d'ensemble	21
1.11.1	Maximum de vraisemblance échantillonné	21
1.11.2	Méthode de faible rang	22
1.11.3	Méthodes d'assimilations tenant compte de l'erreur d'alignement	22

1.12 Conclusion	23
2 Simulation du tambour et Assimilation de données	24
2.1 Méthode des éléments discrets (DEM)	24
2.1.1 DEM et assimilation de données	25
2.2 Méthodes particulières continues	26
2.2.1 Méthodes basées sur les particules	26
2.2.2 SPH	29
2.3 Méthode des points matériaux (material point method, MPM)	30
2.3.1 Material Point Method (MPM)	30
2.3.2 La MPM et la DA	33
2.4 Méthode Vortex	33
2.4.1 Vortex-In-Cell, VIC	35
2.4.2 Similarité avec les méthodes SPH et MPM	35
2.5 Développement de méthodes permettant l'adaptation du filtre de Kalman d'ensemble avec des simulations sans maillage	35
2.5.1 Objectif	35
2.5.2 Formulation de la correction dans l'espace des membres	36
2.5.3 Filtre Remesh-EnKF	36
2.5.4 Filtre Part-EnKF	36
2.5.5 Bilan	36
2.6 Evaluation de la capacité des méthodes développées à assimiler les données sur plusieurs applications	36
2.6.1 Bilan	36

0.1 Introduction

Dans le domaine de la production d'énergie électrique, l'énergie nucléaire est une source d'énergie qui s'est imposée à de nombreux pays industrialisés. Extrêmement concentrée, elle offre un rendement incomparable à des coûts compétitifs tout en ayant un bilan carbon faible.

En 2023, l'industrie électronucléaire a représenté 65% de la production totale d'électricité en France, avec un parc composé de 56 réacteurs à eau pressurisée (REP) répartis sur 18 centrales [29]. Dans le monde, la production nucléaire ne fait qu'augmenter. Fin 2022, la capacité totale des 438 réacteurs nucléaires de puissance en exploitation dans 32 pays s'établissait à 393,8 gigawatts électriques (GWe). Si aujourd'hui, le nucléaire représente près de 9,8% de la production mondiale, elle pourrait attendre 14% du bouquet électrique en 2025 [?]. D'ici 2035, le nombre de pays qui exploitent des centrales nucléaires pourrait augmenter de quelque 30% d'ici 2050.

Le secteur est également en constante mutation avec le développement de nouvelles technologies en particulier avec le développement de soit le développement technologie de 4^{ème} génération mais également le nouveau paradigme des SMR (*Small Modular Reactor*) où la modularité permet une chaîne de déploiement et de production souple et avec une financement moindre [8].

Si ce secteur attire temps c'est en particulier car il offre un très bon rapport qualité prix et est faiblement émettrice en gaz à effet de serre. Son facteur d'émission, c'est à dire la quantité d'émissions de gaz à effet de serre par unité d'énergie produite, est estimé à 12 gCO₂eq/kWh. Il serait même encore plus faible en France [30]. Ainsi elle est aussi émettrice que l'éolien ou bien la production photovoltaïque et est 100 à 1000 fois moins émettrice que les centrale à énergie fossiles.

L'urgence climatique pousse à considérer l'énergie nucléaire comme un levier essentiel dans la transition énergétique, offrant une alternative viable aux énergies fossiles. Cependant, cette

option soulève une série de préoccupations. Outre les inquiétudes liées à la sécurité des installations et au risque de prolifération nucléaire [23], il est crucial d'aborder la question des déchets hautement radioactifs générés tout au long du fonctionnement des réacteurs. Chaque année, la production d'électricité entraîne la création de près de 2 kg de déchets par habitant, dont une infime proportion constitue les déchets à vie longue, mais ils représentent la majorité de l'activité radioactive (0.2% des stocks pour 95% de l'activité). En outre, il est impératif de préserver les réserves de combustible nucléaire. Dans cette optique, les avancées technologiques telles que les réacteurs de quatrième génération visent à optimiser l'utilisation des ressources en transmutant l'uranium 238 en plutonium 239. Ainsi, la question du retraitement et de la fermeture du cycle nucléaire reste cruciale. C'est dans cette perspective que le combustible MOX (Mélange d'Oxyde de plutonium et d'Oxyde d'uranium) a été développé afin de recycler une partie des matières nucléaires issues du traitement des combustibles à Uranium Naturel Enrichi (UNE).

La fabrication de ce combustible passe par différentes étapes de fabrication en particulier une phase de mélange et de broyage qui a lieu au sein d'un broyeur à boulets. 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 critiquée pour la qualité du produit final et sa sûreté d'utilisation dans les réacteurs nucléaires. Cependant, son contrôle est déterminé de manière empirique par l'expérimentateur sur une variété de paramètres tel que la vitesse de rotation, le degré de remplissage, les proportions d'alimentation et de corps broyants. Le large spectre des physiques mise en jeu à l'intérieur du tambour mais aussi le contexte de manipulation de poudres irradié rendent le contrôle et l'optimisation très complexe. Ceci a pour conséquence d'augmenter le temps de broyage, la consommation du procédé et le nombre d'intervention nécessaire sur l'installation.

C'est dans ce contexte que des outils d'aide à la compréhension par la modélisation et la simulation des étapes de la fabrication du combustible sont développées. L'objectif étant de pouvoir faire le suivi de l'état du milieu granulaire sur une large gamme de paramètre ainsi que de comprendre les mécanismes intervenant dans ce processus.

En particulier des simulations ont été développées en utilisant des méthodes sans maillage afin de représenter l'état du mélange dans le milieu granulaire. Le problème est que ces modèles reposent toujours sur des hypothèses simplificatrices limitant leurs champs d'action. De plus, les modèles dépendent de paramètres qu'il est nécessaire de calibrer. Enfin, l'incertitude de modélisation qui en découle a pour conséquence d'augmenter l'erreur de prédiction de modèle. Par données expérimentales nous entendons toutes données qui peut être fournies par le dispositif expérimental.

C'est ce qui justifie cette thèse, elle consiste à développer des méthodes capables de combiner les données issues de la simulation et des données expérimentales au sein du développement du Jumeau Numérique du procédé. 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.

C'est dans ce contexte de la fabrication du combustible MOX (pour Mélange d'Oxyde de plutonium et d'Oxyde d'uranium)

0.2 Ecoulement granulaire dans un tambour en rotation

0.2.1 Ecoulement granulaire et régime dans le broyeur

Les écoulement granulaire

- Très présent dans la nature et l'industrie, du tas de sable en passant par les avalanches.
- Du fait de la nature discrète, bien moins comprise que l'écoulement des liquide qui se base sur les équations de Navier-Stokes
- On a un écoulement qui est différent de celui d'un fluide classique.
- On distingue trois types d'écoulement que l'on assimile gnéralement au trois état de la matière : solide où le mouvement des particules est lent et le comportement est presque statique, une couche semblable à un liquide dans laquelle les grains s'écoulent avec une certaine inertie, et une zone semblable à un gaz où les particules se déplacent à des vitesses plus élevées de manière chaotique. Ils interviennents simultanément dans l'écoulement. Ce qui complexifie la caractérisation rhéologique

Définir ensuite les différentes modélisations actuelles des régimes (voir layout pour les articles)

0.2.2 Rhéologie des milieux granulaire sous conditions homogènes

Les travaux récents convergent vers une loi de comportement viscoplastique pour modéliser les milieux granulaires défini sous le nom de loi $\mu(I)$ [12, 19]. C'ets tout d'abord dans [25] que le coefficient de friction μ suit la loi suivante

$$\mu(I) = \mu_1 + \frac{\mu_2 - \mu_1}{I_0/I + 1},$$

où μ_2, μ_1 sont deux constantes liés au matériau et I_0 une constante qui dépend de la configuration de l'écoulement. Finalement I est appelé le nombrre inertiel. Ce nombre adimensionnel est défini comme le rapport entre le temps de relaxation $\tau_r = \sqrt{m/P}$ et le temps de cisaillement $\tau_c = 1/\dot{\gamma}$

$$I = \frac{\tau_i}{\tau_c} = \frac{\dot{\gamma}d}{\sqrt{P/\rho_g}},$$

où $\dot{\gamma}$ est le taux de cisaillement, P la pression de confinement, d la taille caractéristique des particules, et ρ_g la densité du grain.

Cette loi été étendu au cas tri-dimensionnel et testé sur un certain nombre de cas en particulier celui du tambour en rotation [6] et montre une bonne correspondance pour le cas d'écoulement avec surface libre [5]. Toutefois, cette loi trouve certaines limites dans le cas d'écoulement confiné où le coefficient de tassement change et où le mouvement de chaque grain entraîne des modifications significatives dans les chaînes de force. Si la prédiction est bonne au niveau des bords, elle reste toutefois insuffisante au niveau des parois [27]. De plus, elle ne permet pas de prendre en compte les régimes cinétiques, c'est à dire le régime gaz. Ainsi, le développement de nouvelles loi rhéologique est un sujet de recherche constant.

0.2.3 Ecoulement dans le tambour en rotation

Dans le tambour en rotation l'ensemble des trois zones d'écoulement sont présentes. Une diversité de six régimes d'écoulement est généralement étudié : glissement, ballotement, éboulement, roulement, en cascade, cataracte, centrifuge [22]. Ces différents régimes déterminent la qualité du mélange, du broyage. C'est le régime en cascade qui est nécessaire pour la réduction de taille

de grain dans le broyeur à boulets. C'est dans ce régime que la surface libre prend la forme caractéristique d'un S .

0.2.4 Simulation du broyage

0.3 Simulation de l'écoulement dans un tambour en rotation

0.3.1 Approche continue

- Approches basées sur une description continue du milieu granulaire.
- Utilisation en ingénierie, notamment pour la modélisation des instabilités dans les sols et la rhéologie des poudres dans les procédés.
- Description du comportement à partir de lois constitutives et d'équations de bilan.
- Formulation des problèmes sous forme de problèmes aux dérivées partielles.
- Capacité à intégrer des conditions aux limites complexes.
- Simulation des problèmes à "grande échelle".
- Limitation à fournir des informations sur le lien entre la physique des phénomènes à l'échelle des particules et le comportement à l'échelle macroscopique.
- Méthodes permettant de simuler le comportement continu.
- Méthodes en Éléments Finis (MEF).
- Adaptations pour prendre en compte le comportement granulaire.
- Modèles poro-elasto-plastiques.
- Minimisation de l'erreur introduite en remplaçant le problème continu par un problème discrétisé.
- Prise en compte des conditions aux limites complexes et fortement non-linéaires.
- Difficultés à rendre compte des grandes déformations.
- Nécessité de processus de remaillage coûteux en temps de calcul.
- Alternatives plus récentes comme le Material Point Method (MPM).
- Description Lagrangienne de points matériels.
- Domaine Eulérien maillé pour le calcul des lois de comportement.
- Algorithme itératif pour le transfert des informations.
- Interpolation des variables entre points matériels et maillage.

0.3.2 Approche discrète

- Méthodes discrètes traitant les particules comme des objets solides indépendants.
- Caractérisation des particules par leur géométrie.
- Interaction des particules à travers des lois de contact, de frottement et de cohésion.
- Résolution du problème mécanique en décrivant toutes les trajectoires des particules.
- Méthode des Éléments Discrets (DEM).
- Méthode de Dynamique des Contacts (CD).
- Caractère numérique élégant de la méthode CD.
- Particularité des particules considérées comme parfaitement rigides dans la méthode CD.
- Stabilité du système dans la méthode CD.
- Description des vitesses discontinues dans la dynamique des contacts.
- Avantages de l'approche DEM en termes de détails des déformations dans les contacts.
- Complexité algorithmique de la mise en œuvre de la méthode CD.
- Choix d'utiliser la méthode DEM dans la thèse.

- Simplicité de programmation de la méthode DEM.
- Extension des approches lagrangiennes à "N-corps".
- Flexibilité de la méthode DEM dans l'introduction d'interactions complexes entre particules.
- Traitement des forces entre particules par des fonctions régulières de la déflexion au contact dans la méthode DEM.
- Nécessité parfois d'introduire un terme dissipatif dans la méthode DEM.
- Difficulté à justifier le sens physique du terme dissipatif dans certains problèmes.
- La première mise en pratique d'une approche par éléments discrets pour les matériaux granulaires a été réalisée par Cundall à la fin des années soixante.
- Les approches par éléments discrets reposent sur deux familles de méthodes numériques : les méthodes régulières (Smooth Methods) et les méthodes non-régulières (Nonsmooth Methods).
- La méthode dite classique et la méthode de dynamique des contacts (Contact Dynamics ou CD) sont respectivement les méthodes régulière et non-régulière les plus employées à ce jour.

0.3.3 Méthodes discrètes

L'écoulement d'un milieu granulaire a des comportements complexe sachant qu'il a différents régimes d'écoulement. De plus, il s'agit d'un milieu soumis à de grandes transformations d'un milieu qui est discret. De ce fait, les méthodes de simulation doivent tenir compte de ces spécificités.

Pour DEM bien citer les papier des amis thésards

Zuo 2020 (MPM) Biblio - deux méthodes : discrètes et continues - en discret méthode DEM (citer cundall and strack 1979), les particules sont des particules individuels et le mouvement de chacune est calculer grace au PFD. - Mishra BK, Rajamani RK. The discrete element method for the simulation of ball mills. Appl. Math. Model. 1992;16 :598-604. DEM pour Rotating drum. - 2 points négatifs : - coût de calcul élevé. En effet, taille de particule très faible p/ à la taille du broyeur. - Modélisation des particules régulières et plus large que la réalité. - De l'autre côté, on a des méthodes qui modélise le milieu granulaire comme un milieu continu. Le système est gouverné par les équations de conservation de mass et de quantité de mouvement. - Les méthodes de discrétisation particulaire sont adaptées pour les problèmes de grandes transformations parce que représentation hybrid Euler-Lagrange du mouvement. - Il donne des papiers où MPM a été utilisé pour simuler écoulements granulaires. - On peut aussi coupler MPM et DEM pour interaction avec des solides comme les boulets du broyeur. (Liu C, Sun Q, Zhou GG. Coupling of material point method and discrete element method for granular flows impacting simulations. International Journal for Numerical Methods in Engineering. 2018;115 :172-188.) - Dans ce papier utilise MPM avec une loi de plasticité de Drucker-Prager pour modéliser le mélange dans le tambour en rotation.

Zhu 2022, SPH - use SPH pour étudier l'écoulement dans un broyeur à boulets avec une loi de réologie $\mu(I)$ couplé à un modèle élastoplastique de Drucker-Prager. - En effet, l'objectif est de traiter correctement des cas de cohabitation de solid liqui régime comme dans le tambour en rotation.

Biblio : - Au début études étaient purement analytiques et expérimentales (qq citations), mais les modèles sont empiriques donc peu généralisables. - Ensuite développement de la DEM d'un côté, mais également approche Eulerian FEM (papiers qui peuvent être citer). - Le souci dans ce dernier cas est de pouvoir gérer les interfaces et les surfaces libres. - Les méthodes

particulaires Lagrangiennes peuvent plus facilement traiter des écoulements à surface libre. - Présente SPH. Méthode sans maillage basée sur un ensemble de particules transportant des quantités matérielles qui évoluent en fonction des forces internes et externes. - Sur la loi de comportement : difficile du fait de la cohabitation de différents régimes. Modèle élastoplastique sont souvent utilisé pour le comportement solide. Pour le comportement fluid-like, utilise des loi viscoélastique ou rhéologique. En particulier, la loi $\mu(I)$ cherche à modéliser ses deux régimes à partir d'un nombre adimensionnel, le nombre Inertiel I . - il relie the shear strength with the normal stress à travers un coefficient de friction qui dépend de I . - Présente $\mu(I)$.

Chandra MPM 2021 - Mets en avant le traitement sensible de la gestion des conditions limites dans le cas du broyeur à boulets et propose dans le cas MPM des méthodes pour les prendre en compte.

Arseni - Utilise 3D FV simulations de l'écoulement granulaire en utilisant la loi $\mu(I)$. Permet de reproduire les différents régimes d'écoulement.

Biblio : - Beaucoup de modèles ont été proposées. - Présente (D. A. Santos, I. J. Petri, C. R. Duarte, and M. A. S. Barrozo, "Experimental and CFD study of the hydrodynamic behavior in a rotating drum," Powder Technol. 250, 52–62 (2013).) comme une étude complète d'une approche Euler-Euler basée sur un milieu continu assumant des interpénétrations et une équation dérivée de la théorie cinétique. - Précise que $\mu(I)$ permet de prendre en compte à la fois un critère de pasticité et une dépendance complexe de la viscosité en fonction du taux de déformation et de la pression.

0.4 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 accru 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 [17] 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 [32] celle-ci permet de 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 [24], 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.

partie Loïc 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.

0.5 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.

0.5.1 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.

0.5.2 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.

0.6 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.

Dans un second temps, une méthode d'alignement a été développées pour mettre à jour la position des particules Part-Align

Cette dernière corrige la position des particules en imposant un champ de vitesse pour rapprocher observations et prédiction.

Chapitre 1

Assimilation de Données

1.1 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.

1.2 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.

1.2.1 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.

1.2.2 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 .

1.2.3 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 1.1.

FIGURE 1.1 – Chaîne de Markov cachée **Mettre un graph Bayésien.**

1.2.4 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 [16].

1.3 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

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

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

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

Ainsi, les méthodes de filtrage présentent sous diverses formes ces deux étapes de propagation et de d'analyse pour mettre à jour la distribution de l'état au cours du temps et après mesure des observations.

1.4 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 $p(\mathbf{x}_k) = \sum_{i=1}^N \omega^i \delta_{\mathbf{x}^i}(\mathbf{x}_k)$ est une distribution empirique de la distribution. C'est l'hypothèse qui est utilisé dans le filtre particulaire 1.6 mais également dans le filtre de Kalman d'Ensemble 1.8. Dans ce dernier cas, les membres \mathbf{x}^i sont supposées indépendantes et identiquement distribuées, ainsi les poids sont tous égaux à $1/N$.

1.5 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 Kalman 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.**

1.6 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 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 développées. Le filtre bootstrap [14] 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 approximations 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*.

1.7 Filtre de Kalman

Le filtre de Kalman introduit en 1960 [20] 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 définies par leur deux premiers moments tel que la propagation devient

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

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 définie 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 réécrire

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

1.8 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 par Evensen [10]. 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) $(\mathbf{x}_i^f)_{i=1}^N$ à partir du modèle. Chaque membre de l'ensemble est ensuite mis à jour indépendamment en utilisant les observations disponibles. À partir de cet ensemble de représentants, supposé identiquement distribué, la matrice de covariance et la moyenne vont pouvoir être estimées.

Pour cela, nous définissons la matrice d'état $\mathbf{X}_f = [\mathbf{x}^1, \dots, \mathbf{x}^N]$ et d'anomalies \mathbf{A}_f dont les colonnes sont les états de chaque membre normalisé et centré ce que l'on peut écrire de la manière suivante

$$\mathbf{A}_f = \frac{1}{\sqrt{N-1}}(\mathbf{X}_f - \bar{\mathbf{x}}_f \mathbf{1}^T),$$

où $\mathbf{1} \in \mathbb{R}^N$ est un vecteur de 1.

Respectivement, la matrice d'observation et les anomalies d'observation sont $\mathcal{Y}_f = [\mathcal{H}(\mathbf{x}_f^1), \dots, \mathcal{H}(\mathbf{x}_f^N)]$ et \mathbf{Y}_f , où les colonnes sont données par

$$\mathbf{Y}_f = \frac{1}{\sqrt{N-1}}(\mathcal{Y}_f - \bar{\mathbf{y}}_f \mathbf{1}^T) \quad \text{avec} \quad \bar{\mathbf{y}}_f = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \mathcal{H}(\mathbf{x}_f^j).$$

L'ensemble définit la covariance entre les états et les observations $\mathbf{P}\mathbf{H}^T$, la covariance entre les observations $\mathbf{P}\mathbf{H}^T$, et $\tilde{\mathbf{K}}$

$$\begin{aligned} \mathbf{P}\mathbf{H}^T &= \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (\mathbf{x}_f^i - \bar{\mathbf{x}}_f)^T [\mathcal{H}_k(\mathbf{x}_f^i) - \bar{\mathbf{y}}_f]^T = \mathbf{A}_f \mathbf{Y}_f^T, \\ \mathbf{H}\mathbf{P}\mathbf{H}^T &= \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N i = 1^N [\mathcal{H}_k(\mathbf{x}_f^i) - \bar{\mathbf{y}}_f] [\mathcal{H}_k(\mathbf{x}_f^i) - \bar{\mathbf{y}}_f]^T = \mathbf{Y}_f \mathbf{Y}_f^T, \\ \tilde{\mathbf{K}} &= \mathbf{P}\mathbf{H}^T (\mathbf{H}\mathbf{P}\mathbf{H}^T + \mathbf{R})^{-1} = \mathbf{A}_f \mathbf{Y}_f^T (\mathbf{Y}_f \mathbf{Y}_f^T + \mathbf{R})^{-1}. \end{aligned}$$

Cette implémentation sans matrice d'observation repose sur l'approximation par la méthode des sécantes $\mathcal{H}(\mathbf{x}_f^i - \bar{\mathbf{x}}_f) \approx \mathcal{H}(\mathbf{x}_f^i) - \bar{\mathbf{y}}_f$. Ensuite, la prévision est mise à jour vers un ensemble a posteriori $[\mathbf{x}_a^i]_{i=1}^N$ tel que

$$\mathbf{X}_a = \mathbf{X}_f + \tilde{\mathbf{K}}(\mathbf{D} - \mathbf{Y}), \quad (1.2)$$

où $[\mathbf{D}]^i = \mathbf{y} + \boldsymbol{\varepsilon}^i$ est l'observation perturbée avec $\boldsymbol{\varepsilon}^i \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \mathbf{R})$, $\tilde{\mathbf{K}}$ est la matrice de gain de Kalman ensembliste et $(\mathbf{D} - \mathbf{Y})$ est le terme d'innovation. L'étape de prévision est ensuite appliquée à l'ensemble analysé jusqu'à l'observation suivante. Sur la base de cette formulation, nous pouvons déduire une formule de correction basée uniquement sur les prédictions des membres et les observations.

Nous pouvons réécrire la formule de mise à jour du filtre en utilisant les matrices d'anomalies précédentes.

$$\mathbf{X}_a = \mathbf{X}_f + \mathbf{A}_f \mathbf{Y}_f^T (\mathbf{Y}_f \mathbf{Y}_f^T + \mathbf{R})^{-1} (\mathbf{D} - \mathbf{Y})$$

Nous reformulons le terme de correction en remarquant que $\mathbf{1}^T \mathbf{Y}_f^T = \mathbf{0}$. Nous définissons \mathbf{F} , la matrice de correction qui donne la mise à jour en termes de combinaisons linéaires des états prévisionnels

$$\mathbf{X}_a = \mathbf{X}_f + \mathbf{X}_f \mathbf{F}, \quad \mathbf{F} = \mathbf{Y}_f^T (\mathbf{Y}_f \mathbf{Y}_f^T + \mathbf{R})^{-1} (\mathbf{D} - \mathbf{Y}). \quad (1.3)$$

Dans l'EnKF, \mathbf{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 particulaire, 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 [33]. On trouve également d'autre implémentation du filtre de Kalman d'ensemble comme le filtre EnKF déterministe comme le filtre ETKF, qui cherche une mise à jour qui permet d'obtenir une approximation de la matrice de covariance analysée du filtre de Kalman en cherchant une racine carrée [3].

1.9 Méthodes variationnelles

1.9.1 Estimation du maximum a posteriori

La distribution a posteriori précédemment définie permet dans un premier temps de pouvoir définir 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 déterminé directement à partir de la distribution comme avec le filtre particulaire ??.

Néanmoins, 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 [31]. 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,

1.9.2 Méthodes de minimisation

1.9.3 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}

1.10 Equivalence avec la mise à jour de Kalman

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

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

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 necessite pas d'être inversé. 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.

1.11 Méthode variationnelle d'ensemble

1.11.1 Maximum de vraisemblance échantillonné

Les méthodes variationnelles précédemment décrite offre la possibilité de trouver le maximum d'un distribution a posteriori. Cependant, à l'aide de méthode d'ensemble, il est également possible d'estimer complètement cette distribution.

Pour cela, nous nous plaçons dans le cas d'un prior d'état Gaussien \mathbf{x}^f de matrice de covariance \mathbf{P}^f . On suppose N échantillon i.i.d. de cette distribution \mathbf{x}_i^f . Après introduction de la mesure perturbée $\mathbf{d}_i = \mathbf{d} + \varepsilon_i$ avec $\varepsilon_i \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \mathbf{R})$. Alors, la distribution à posteriori peut-être échantillonnée en minimisant un ensemble de fonction coût défini pour chaque membres $i = 1, \dots, N$

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

Celles-ci sont indépendantes entre chaque membre et offrent une forme similaire au MAP cette fois autour de la valeur des membres et de la mesure perturbée. Ainsi, les mêmes algorithmes de minimisation peuvent être appliqué pour résoudre ces fonctions coût.

Dans le cas linéaire et Gaussien, nous avons précédemment vu dans la Section 1.9 que le MAP pouvait être obtenu grâce au gain de Kalman. De même, connaissant la matrice de covariance d'état \mathbf{P} et l'opérateur tangent $\mathbf{G}_i = \nabla_{\mathbf{x}}^T \mathbf{h}(\mathbf{x}_i)$, on obtient un ensemble de mise à jour du filtre de Kalman autour de chaque membre

$$\mathbf{x}_i^a = \mathbf{x}_i^f + \mathbf{P}\mathbf{G}_i^T(\mathbf{G}_i\mathbf{P}\mathbf{G}_i^T + \mathbf{R})^{-1}(\mathbf{d}_i - \mathbf{h}(\mathbf{x}_i^f)) \quad (1.4)$$

Dans un cas non linéaire, nous pourrions traiter des cas non-linéaire pour être approchée dans un cas non Gaussien. Dans ce cas, on nous prendrons une linéarisation de la distribution a priori en estimant et ne conservant que les deux premiers moments de la distribution. C'est l'hypothèse qui est appliqué pour le filtre de Kalman d'Ensemble 1.8. De fait, cette résolution est obtenue dans un espace de représentant, offrant une optimisation dans un espace généralement de plus faible dimension.

1.11.2 Méthode de faible rang

Nous utilisons dans cette section la même hypothèse que précédemment évoquée dans la partie sur le filtre EnKF 1.8. Il s'agit de considérer que la matrice de covariance peut être représentée par un ensemble d'état. En fait, tout comme le filtre de Kalman et l'image du filtre 3DVar le filtre EnKF trouve une équivalence avec une approche variationnelle d'ensemble.

En utilisant les membres pour échantillonner la matrice de covariance, cela revient à chercher la solution dans l'espace vectoriel engendré par les membres.

En reprenant la formule 1.4, et en remplaçant $\mathbf{P} \approx \mathbf{A}_f \mathbf{A}_f^T$, on obtient d'une part la mise à jour du filtre EnKF 1.2, d'autre part que l'on peut reformuler le terme de correction en définissant \mathbf{F} ,

$$\mathbf{X}_a = \mathbf{X}_f + \mathbf{X}_f \mathbf{F}, \quad \mathbf{F} = \mathbf{Y}_f^T (\mathbf{Y}_f \mathbf{Y}_f^T + \mathbf{R})^{-1} (\mathbf{D} - \mathbf{Y}). \quad (1.5)$$

Ceci nous renseigne sur plusieurs choses :

- La mise à jour du filtre EnKF est une combinaison linéaire des membres ;
- Il suffit de déterminer $N \times N$ pour résoudre le problème de mise à jour ;
- La mise à jour est indépendante pour les N fonctions à minimiser ce qui permet de grandement paralléliser les problèmes d'optimisation.

Les N problèmes de minimisation peuvent être reformulés à l'aide des termes de cette matrice \mathbf{F}

$$\mathbf{f}_i = \arg \min_{\mathbf{f} \in} \frac{1}{2} \|\mathbf{d} - \mathbf{h}(\mathbf{X}_f + \mathbf{X}_f \mathbf{F})\|_{\mathbf{R}^{-1}}^2 + \frac{1}{2} \|\mathbf{f}\|_2^2$$

En effet [mettre la formule ici](#).

1.11.3 Méthodes d'assimilations tenant compte de l'erreur d'alignement

Les méthodes du filtre bayésien résolues par des méthodes statistiques comme le filtre de Kalman ou variationnelle se basent uniquement sur la correction des intensités. L'erreur est estimée pour une coordonnée spatiale comme étant distribuée normalement autour d'une valeur. Cette hypothèse sur la distribution d'erreur ne tient pas compte de l'erreur issue de l'alignement de champs. Cette correction est classiquement appliquée sur les intensités des champs de l'état. Cependant, celle-ci se trouve faussée par ce que l'on appelle l'effet de *double pénalisation*. Cela se produit lorsque les erreurs du modèle et des données observationnelles sont sur-pénalisées, compromettant l'équilibre nécessaire. Par exemple, un léger déplacement de polluants peut entraîner des prédictions élevées là où aucun polluant n'est observé ([faire mon propre schéma voir Figure ??](#)) créant des difficultés d'évaluation du modèle. Cette erreur est répandue dans les géosciences, affectant la prévision météorologique, la chimie atmosphérique, la prévision océanique, etc. L'utilisation de l'erreur quadratique moyenne aggrave ce problème, entravant l'apprentissage efficace des modèles. C'est une composante dominante de l'erreur de représentativité. Dans un cas dégénéré, où la prédiction est une translation de la solution, on observe en ([mettre une figure](#)) [Figure X](#) que l'erreur quadratique sera plus élevée que si l'erreur prédite était nulle.

Pour tenir compte de cette erreur, des métriques tenant compte d'une erreur d'alignement ont pu être introduites. - Une première famille de méthodes utilise des métriques basées sur le transport optimal.

1.12 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 2

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. Les simulations de l'écoulement dans le broyeur à boulets qui reposent sur des discrétisations sans maillage dites particulières, définissent ainsi notre état et son modèle d'évolution. Cependant, le caractère Lagrangien de la définition de l'état implique d'évaluer jusqu'à quel point les méthodes classiques d'assimilation peuvent être adaptée. En effet celles-ci se base sur des états dont la discrétisation restent identique. De plus, le fait que l'espace soit continu ou discret va également modifier la signification de l'état et sa capacité à être mis à jour. Dans cette partie, nous reprendrons les principales familles de formulation particulière en développant les formulations des méthodes DEM, SPH et MPM. Pour chacune d'entre elles, nous évoquerons les singularités et limites à l'adaptation des méthodes d'assimilation de données. De plus, nous présenterons la Méthode Vortex comme une méthode particulière modèle pour la suite manuscrit.

2.1 Méthode des éléments discrets (DEM)

La méthode consiste à considérer le mouvement d'un ensemble de N grains composant le milieu. Celui-ci est décrit par l'équation de la dynamique qui peut s'écrire sous la forme

$$\begin{cases} m_i \frac{d^2 \vec{r}_i}{dt^2} = \vec{f}_i, & i = 1 \dots N \\ I_i \frac{d\vec{\omega}_i}{dt} = \vec{\Gamma}_i, & i = 1 \dots N \end{cases}$$

où ' N ' est le nombre de grains, ' m_i ' est la masse, ' I_i ' est le moment d'inertie, ' \vec{r}_i ' est la position, ' $\vec{\omega}_i$ ' est la rotation, ' \vec{f}_i ' est la force exercée sur le grain considéré et ' $\vec{\Gamma}_i$ ' le moment associé à la force ' \vec{f}_i '.

La force ' \vec{f}_i ' peut être décomposée de la manière suivante

$$\vec{f}_i = \sum_{j \neq i} \vec{f}_{ij}^c + \vec{f}_{ext}$$

où ' $\sum_{j \neq i} \vec{f}_{ij}^c$ ' représente les forces de contact qui s'exercent à la surface de la particule i et les

forces externes ' \vec{f}_{ext} ' sont celles appliquées au centre de la particule ' i ' (par exemple la force de gravité).

Les forces de contact sont décrites par des lois de contact entre les grains ainsi qu'entre les grains et la paroi. Dans le cas élastique, la modèle de Hertz est adapté pour décrire l'interaction normale. Le modèle Hertz-Mindlin permet de déterminer les interactions tangentielles élastiques. Ces lois sont fonctions de l'interpénétration inter-particule et de la vitesse relative interparticules. Par exemple, dans le cas de particules sphériques l'interpénétration est défini comme $\delta_{ij} = \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\| - (R_i + R_j)$ où \mathbf{x} est la position et R le rayon d'une particule.

La force de contact tend à pénaliser l'interpénétration via des coefficients de raideur k et d'amortissement γ qui dépendent des propriétés mécaniques des grains et de la paroi. Il existe plusieurs algorithmes pour résoudre numériquement les équations de la dynamique. Le plus utilisé est l'algorithme de Verlet en vitesse.

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.

2.1.1 DEM et assimilation de données

L'assimilation de données, lorsqu'appliquée à des systèmes simulés par la méthode des éléments discrets (DEM), se heurte à plusieurs limites importantes présentées ci-dessous.

Limites de la DEM avec les méthodes variationnelles

Dans le cadre des méthodes variationnelles d'assimilation de données, telles que 3D-Var, le principal défi est la grande dimensionnalité du problème d'optimisation. En effet, La DEM simule le comportement de chaque particule individuellement. Cela signifie que l'état du système comprend les variables cinématiques de chacune d'elles : position, la vitesse, accélération mais aussi la position angulaire, la vitesse angulaire et l'accélération angulaire ou la densité 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.

De plus, les filtres variationnels corrigeant des erreurs d'intensité selon des normes euclidiennes, la variation selon les positions des observations ne sera pas linéaire.

Ainsi, la définition d'un état de particules discrètes implique de résoudre un problème d'optimisation non-linéaire de grande dimension.

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. En d'autres termes, la mise à jour ne peut être réalisée que via le solveur lui-même capable de vérifier des contraintes de non interpénétrabilité mais ne peut être réalisé directement.

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. Même si initialement chaque membre possédait la même configuration particulière mais avec des propriétés différentes, chaque particule a sa propre trajectoire unique en cohérence avec les interactions dans son voisinage. 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.

Dans le cas plus général où les membres n'auraient pas le même nombre de particules la correspondance des états est d'autant plus complexe.

Ainsi, le caractère discret de la méthode DEM rend l'assimilation par EnKF à la fois complexe par :

- une définition de l'état et de ses statistiques non univoque ;
- la construction du gain de Kalman d'Ensemble ;
- la contrainte d'interpénétration lors de la mise à jour.

2.2 Méthodes particulières continues

2.2.1 Méthodes basées sur les particules

Nous envisageons des méthodes par particules pour résoudre des problèmes continus en mécanique des fluides ou des solides. Cela inclut des méthodes telles que l'hydrodynamique par particules lissées (SPH) [21, 13] et la méthode des vortex (VM) [?], et s'étend à d'autres méthodes comme la méthode des points de matériau (MPM) [?]. Elles partagent toutes de décomposer cette fois le domaine en un ensemble \mathcal{P} de particules qui suivent la dynamique du problème. Ainsi, la discrétisation suit la transformation appliquée au milieu en transportant des quantités attachées à chaque particule. Elles sont en cela des méthodes Lagrangienne.

Discrétisation par particules

La solution représentée par le jeu de particule est obtenue grâce à deux éléments : une approximation grâce à un noyau de lissage et l'approximation particulière d'un opérateur intégral.

Si la représentation de la solution peut évoluer suivant la méthode (en particulier avec la méthode MPM), la solution peut toujours être exprimé de cette manière suivant le choix du noyau.

Tout champ relativement régulier \mathbf{u} sur Ω peut être écrit grâce à la propriété de filtrage de Dirac

$$\mathbf{u}(\mathbf{z}) = \int_{\Omega} \mathbf{u}(\mathbf{z}') \delta(\mathbf{z}' - \mathbf{z}) d\mathbf{z}',$$

avec δ la distribution de Dirac.

Une fonction de noyau ϕ_{ε} est introduite pour obtenir une estimation moyenne $\langle \mathbf{u} \rangle$ de \mathbf{u} telle que

$$\langle \mathbf{u}(\mathbf{z}) \rangle = \int_{\Omega} \mathbf{u}(\mathbf{z}') \phi_{\varepsilon}(\mathbf{z} - \mathbf{z}') d\mathbf{z},$$

où ε est la longueur de lissage. Le noyau lisse doit au moins respecter les propriétés suivantes

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \phi_{\varepsilon}(\mathbf{z}) d\mathbf{z} &= 1, \\ \phi_{\varepsilon}(\mathbf{z}) &\rightarrow \delta(\mathbf{z}), \quad \varepsilon \rightarrow 0, \\ \phi_{\varepsilon}(\mathbf{z}) &\in C^k, \quad k \geq 1, \end{aligned}$$

où les deux premières propriétés sont des propriétés résiduelles de la distribution de Dirac et la dernière est une exigence de différentiabilité nécessaire pour approcher les opérateurs différentielles.

La fonction moyenne $\langle \mathbf{u} \rangle$ est ensuite utilisée pour approximer la fonction d'origine.

Dans un second temps, le domaine d'origine Ω est subdivisé avec N_p sous-domaines Ω_p associés à une particule Lagrangienne à l'emplacement $\mathbf{z}_p \in \Omega_p$. Nous notons V_p le volume de Ω_p . Cette discrétisation est ensuite utilisée pour approximer la fonction moyenne de telle sorte que

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{u}(\mathbf{z}) \rangle &= \sum_p \int_{\Omega_p} \mathbf{u}(\mathbf{z}') \phi_{\varepsilon}(\mathbf{z} - \mathbf{z}') d\mathbf{z}' \\ &\approx \sum_p \mathbf{u}(\mathbf{z}_p) V_p \phi_{\varepsilon}(\mathbf{z} - \mathbf{z}_p) \\ &\approx \sum_p \mathbf{U}_p \phi_{\varepsilon}(\mathbf{z} - \mathbf{z}_p). \end{aligned}$$

Ainsi, toute fonction définie sur une discrétisation par particules est définie par un ensemble de positions de particules \mathbf{z}_p associées à une valeur de particule $\mathbf{U}_p = \mathbf{u}(\mathbf{z}_p) V_p$ et un noyau lisse ϕ_{ε} .

Sur la base de cette discrétisation, l'opérateur différentiel peut être dérivé à travers cette formulation.

Tout comme le champ \mathbf{u} , la même interpolation peut être appliquée pour obtenir

$$\nabla \mathbf{u}(\mathbf{z}) = \sum_p \mathbf{U}_p \nabla \phi_{\varepsilon}(\mathbf{z} - \mathbf{z}_p).$$

Ils existent toutefois une grande variété de formule pour approximer l'opérateur gradient. Dans ces cas, ce sont les propriétés de conservation associées au champ qui sont privilégiées.

Généralement, un terme additionnel est introduit lorsque le champ est évalué à la position d'une particule q tel que

$$\nabla \mathbf{u}(\mathbf{z}_p) = \sum_q (\mathbf{U}_q - \mathbf{U}_p) \nabla \phi_\varepsilon(\mathbf{z}_q - \mathbf{z}_p)$$

, où $\sum_q \mathbf{U}_p \nabla \phi_\varepsilon(\mathbf{z}_q - \mathbf{z}_p)$ est nul par propriété de localisation du noyau ϕ_ε .

Exemple de fonctions de noyau

Plusieurs noyaux ont été utilisés en fonction de la méthode. La formulation originale de la MPM n'utilisait pas de noyau de substitution et écrivait la densité comme suit

$$\mathbf{u}(\mathbf{z}) = \sum_p \mathbf{U}_p \phi_\varepsilon(\mathbf{z} - \mathbf{z}_p)$$

Et la résolution est basée sur une projection sur une grille de fond associée à certaines fonctions de forme [?].

La méthode GIMP est une formulation différente qui utilise la fonction de Heaviside [2] et associe donc un volume autour de chaque particule

$$M_1(r) = \frac{\alpha}{\varepsilon} \begin{cases} 1; & r \leq \varepsilon \\ 0; & \text{sinon} \end{cases}$$

où $r = \|\mathbf{z}\|_2$.

Cette méthode a été introduite pour éviter le problème de passage de cellule lorsque une particule se déplace d'une cellule à une autre à travers la grille de fond.

Dans la méthode SPH, comme son nom l'indique, un noyau lisse est associé pour approximer la solution. Théoriquement, il pourrait s'agir de la fonction de noyau gaussien

$$\phi_g(r) = \frac{1}{(\pi\varepsilon^2)^{d/2}} \exp(-r^2/\varepsilon^2)$$

Ce noyau est infiniment différentiable mais défini sur un support non compact. En pratique, nous utilisons une coupure pour supprimer les valeurs négligeables pour une grande distance par rapport à une particule.

D'autres noyaux, basés sur des fonctions B-Spline pour travailler sur un support compact. Ces fonctions sont également positives, ce qui est une exigence pour certains champs comme la densité.

Par exemple, le B-spline quadratique, que nous appelons M_3 , est défini avec

$$M_3(r) = \frac{\alpha}{\varepsilon^d} \begin{cases} \frac{3}{4} - |q|^2 & 0 \leq |q| < \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} \left(\frac{3}{2} - |q| \right)^2 & \frac{1}{2} \leq |q| < \frac{3}{2} \\ 0 & \frac{3}{2} \leq |q| \end{cases} \quad (2.1)$$

avec $r = \|\mathbf{z}\|_2$ et $q = r/\varepsilon$ et α la condition de normalisation et d la dimension spatiale.

Ce noyau garantit la continuité C^1 . Le noyau cubique est un autre noyau B-Spline qui est

$$M_4(r) = \frac{\alpha}{\varepsilon^d} \begin{cases} \frac{1}{6}(-|q|+2)^3 - \frac{4}{6}(-|q|+1)^3 & 0 \leq |q| \leq 1 \\ \frac{1}{6}(-|q|+2)^3 & 1 \leq |q| \leq 2 \\ 0 & 2 \leq |q| \end{cases} \quad (2.2)$$

Dans ce dernier cas, le facteur de normalisation α est

$$\alpha = \begin{cases} 1; & 1 \text{ d} \\ 30/14\pi; & 2 \text{ d} \\ 3/2\pi; & 3 \text{ d} \end{cases}$$

Notez que ces noyaux ont été définis avec la coordonnée radiale r . Une autre possibilité serait de définir le noyau multidimensionnel comme le produit tensoriel du noyau 1D

2.2.2 SPH

La méthode SPH a été développée indépendamment par Lucy [21], et Gingold et Monaghan [13]. Elle a été formulée initialement pour des problèmes de formation et d'évolution des systèmes stellaires. Tout comme en mécanique quantique son but est de représenter le système discret en le lissant pour obtenir un milieu continu discrétisé par un ensemble de particules. En mécanique, cette méthode est vue comme une méthode de discrétisation sans maillage d'un milieu continu. Elle consiste à résoudre la forme forte des équations de la dynamique en approchant les champs et les opérateurs différentiels à l'aide de l'approximation particulaire et l'approximation par noyau précédemment évoqué.

Les équations résolues sont l'équation de continuité et l'équation de conservation de la quantité de mouvement à travers l'équation d'Euler

$$\begin{aligned} \frac{d\rho}{dt} + \rho \nabla \cdot \mathbf{v} &= 0, \\ \frac{d\mathbf{v}}{dt} &= \frac{1}{\rho} \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}, \end{aligned}$$

où ρ est la densité, \mathbf{v} la vitesse, $\boldsymbol{\sigma}$ la contrainte de Cauchy.

En utilisant la règle d'approximation du gradient le terme $\rho \nabla \cdot \mathbf{v}$ peut être approximé pour chaque particule, ce qui donne pour l'équation de continuité

$$\frac{d\rho_p}{\sum_q m_j (\mathbf{v}_j - \mathbf{v}_i) \cdot \nabla \phi_\varepsilon(\mathbf{z}_p - \mathbf{z}_q)}.$$

De la même manière, l'équation d'équilibre des quantités de mouvement peut être discrétisée. La forme suivante est généralement utilisée

$$m_p \frac{d\mathbf{v}}{dt} = \sum_q m_p m_q \left(\frac{\boldsymbol{\sigma}_p}{\rho_p^2} + \frac{\boldsymbol{\sigma}_q}{\rho_q^2} \right) \cdot \nabla \phi_\varepsilon(\mathbf{z}_p - \mathbf{z}_q).$$

Cette version est symétrique par rapport aux indices p et q ce qui favorise les propriétés de conservation.

Finalement, les équations de la dynamique sont intégrées dans le temps généralement à l'aide d'un algorithme dit *leap-frog*.

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

2.3.1 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 compose des équations d'équilibre, des lois matériaux, de l'équation cinématique et des conditions limites et initiales donnant

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

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 [2] 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 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 ϕ_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 [18], Poly-PIC [11], et MLS-MPM [15].

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*). La méthode des points matériels (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 représenté 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.

2.3.2 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 particulières. 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.

Au travers des précédentes méthodes particulières, nous constatons que l'application des méthodes d'assimilation sont inégalement applicable. En particulier, les méthodes discrètes n'offre pas la possibilité de corriger directement l'état de la discrétisation, mais nécessite une correction au travers du schémas d'intégration. D'autre part, les méthodes particulières continues (par exemple MPM, SPH), permettent de modifier et faire varier dans son intégralité la discrétisation particulière. En effet, chaque particule est définie en un point, ce qui annule tout problème d'interpénétration. Toutefois, il reste nécessaire de définir les Afin de faciliter le développement de nouveaux filtres, une autre méthode particulière a été utilisée la méthode Vortex. Elle a été choisie car elle offre une modélisation plus simple que les méthodes SPH et MPM. En effet, chaque particule ne transporte qu'une quantité scalaire. Toutefois, elle dispose de toutes les caractéristiques d'une méthode particulière continue. On retrouve de plus différentes version de cette méthode. Ainsi, la formulation classique de la méthode se rapproche de la méthode SPH et la méthode Vortex-In-Cell de la méthode MPM en mécanique des solides.

2.4 Méthode Vortex

La méthode Vortex (VM) est une méthode particulière utilisé pour résoudre dans le cas d'écoulements incompressibles [7]. Elle a été pour la première fois développé indépendamment

par Prager [26] et Rosenhead [28]. Elle se base sur la discrétisation du champ de vorticit   par un ensemble de particules, et r  soud la formulation vorticit  -vitesse des   quations de Navier-Stokes

$$\begin{aligned}\frac{\partial \boldsymbol{\omega}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \boldsymbol{\omega} - \nu \Delta \boldsymbol{\omega} &= 0, \\ \nabla \cdot \mathbf{u} &= 0,\end{aligned}$$

avec $\boldsymbol{\omega}$ pour la vorticit  , \mathbf{u} la vitesse et ν pour la viscosit  .

Dans le cas d'un   coulement bi-dimensionnel, la vorticit   d  finie comme $\nabla \wedge v$ peut   tre d  fini comme un scalaire selon la troisi  me coordonn  e. En particulier dans un rep  re cart  sien $\omega = \frac{\partial v_y}{\partial x} - \frac{\partial v_x}{\partial y}$.

Le champ de vorticit   est discr  t  s      l'aide d'un ensemble de particules p d  fini    une position \mathbf{z}_p , une quantit   de circulation locale Γ_p qui est par d  finition la circulation autour de la particule : $\Gamma_p = \oint_{\partial \Omega_p} \mathbf{v} = \int_{\Omega_p} \omega dS$. Ainsi, pour tout point $\mathbf{z} \in \Omega \subset \mathbb{R}^2$ la vorticit   peut   tre exprim  e comme

$$\omega(\mathbf{z}, t) = \sum_{i=1}^{N_p} \Gamma_p(t) \phi_\varepsilon(\mathbf{z} - \mathbf{z}_p(t)),$$

o   ϕ_ε est le noyau associ      la particule avec une distance de lissage ε .

Dans le cas non visqueux, c'est    dire $\nu = 0$, la position des particules \mathbf{z}_p au temps t est obtenue en r  solvant l'  quation

$$\frac{d\mathbf{z}_p(t)}{dt} = \mathbf{u}(\mathbf{x}_p(t), t).$$

D'autre part, la circulation restant constante au cours du temps sur une courbe ferm  e, Γ_p satisfait en 2D

$$\frac{d\Gamma_p(t)}{dt} = 0.$$

La vitesse \mathbf{u} peut   tre obtenue en r  solvant l'  quation de Poisson suivante

$$\lambda \mathbf{u} = -\nabla \wedge \omega.$$

Finalement, par une repr  sentation int  grale et en choisissant $\phi = \delta$, on obtient dans le cas 2D l'  quation de Biot-Savart suivante

$$\mathbf{u}(\mathbf{z}) = \sum_p \frac{\Gamma_p}{2\pi} \mathbf{k} \wedge \frac{\mathbf{z} - \mathbf{z}'}{\|\mathbf{z} - \mathbf{z}'\|^2},$$

o   \mathbf{k} est le vecteur unitaire normal au plan.

En pratique, le choix d'un noyau en Dirac rend ainsi impossible le calcul de la vitesse sur la discr  tisation particulaire    cause du d  nominateur. En choisissant un noyau de type gaussien de taille ε on obtient alors

$$\mathbf{u}(\mathbf{z}) = \sum_p \frac{\Gamma_p}{2\pi r^2} \mathbf{k} \wedge (\mathbf{z} - \mathbf{z}')(1 - \exp(-r^2/\varepsilon^2)), \quad r = \|\mathbf{z} - \mathbf{z}'\|.$$

Afin de tenir compte de la diffusion, une approche par fractionnement est g  n  ralement utilis  e. Introduite pour la premi  re fois par Chorin [4], elle permet dans le cas de probl  me o   le terme

de transport est dominant, de traiter séparément et successivement les termes d'advection et de diffusion.

Ainsi après avoir mis à jour la position des particules sans tenir compte de la viscosité, l'équation suivante est résolue

$$\frac{d\omega_p}{dt} = \nu \Delta \omega(\mathbf{x}_p).$$

Pour se faire, deux méthodes sont principalement utilisées : soit la méthode par marche aléatoire introduite dans [4] ou échange d'intensité introduite par [9]. Dans le premier cas, la position de chaque particule est perturbée avec un vecteur de variables indépendantes tirées selon une distribution gaussienne de moyenne zero et d'écart-type $2\nu\Delta t$. Dans le second cas, l'opérateur différentiel est approximé à l'aide de la discrétisation comme il est fait dans la méthode SPH.

2.4.1 Vortex-In-Cell, VIC

La méthode Vortex-In-Cell [?] est une version Particle-In-Cell [?] de la méthode Vortex précédemment décrite. Elle a été développée pour tenir compte de ses faiblesses. Tout comme la méthode MPM, celle-ci tient bénéfice de la représentation particulaire des particules pour tenir compte du terme d'advection mais également d'une grille de calcul pour résoudre l'équation de Poisson ou le terme de diffusion en utilisant des méthodes eulérienne.

Le schéma de transfert est similaire d'avec celui de la méthode MPM. D'abord une projection du champ de vortacité sur la grille (p2g) pour obtenir les valeurs nodales ω_i . L'équation de Poisson 2.4 est résolue sur la grille, soit par différences finies, soit par une méthode FFT pour obtenir des vitesses au noeud \mathbf{u}_i . La vitesse est ensuite interpolée sur la particule (g2p) pour mettre à jour leur position (advection).

Avec de la diffusion, l'équation de diffusion peut être ensuite résolue sur la grille et interpolé pour mettre à jour les quantités particulaire.

2.4.2 Similarité avec les méthodes SPH et MPM

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 vortacité 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.

2.5 Développement de méthodes permettant l'adaptation du filtre de Kalman d'ensemble avec des simulations sans maillage

2.5.1 Objectif

Le filtre de Kalman présenté en Section ?? est un filtre séquentiel adéquat pour appliquer des méthodes d'assimilation pour des modèles de grande dimension et non-linéaire. D'autre part, dans la Section ??, nous avons montré la compatibilité des méthodes sans maillage

pour l'assimilation de données séquentiel. Nous avons montré alors que les méthodes sans maillage discrétisant un milieu continu pouvait être mis à jour lors de l'assimilation en modifiant positions et intensités des particules.

Toutefois, la mise à jour du filtre de Kalman d'Ensemble est dépendante de la discrétisation de l'état de ses membres pour le calcul du gain de Kalman d'ensemble. De plus, la mise à jour du filtre de Kalman d'Ensemble est basé sur une combinaison linéaire des membres au travers du gain de Kalman d'ensemble, celle-ci entraîne une explosion du nombre de particules dans la définition de la solution analysée.

L'objectif de ce chapitre est donc de présenter un certain nombre d'adaptation du filtre de Kalman d'Ensemble qui puisse être appliquées à des simulations sans maillage.

Pour cela, nous reformulons tout d'abord l'expression de la mise à jour afin qu'elle soit indépendante de la définition de l'état. Enfin, les solutions analysées étant des combinaisons linéaires des particules de l'ensemble des membres, nous proposons de développer des méthodes pour réduire l'augmentation exponentielle des particules.

2.5.2 Formulation de la correction dans l'espace des membres

2.5.3 Filtre Remesh-EnKF

Méthode de remaillage

Définition du Filtre

2.5.4 Filtre Part-EnKF

Méthode de régression

Définition du Filtre

2.5.5 Bilan

Nous avons développé deux adaptations du filtre EnKF adaptées au cas des simulations particulières. Celle-ci tient compte d'une augmentation exponentielle de particules. Ces deux adaptations Remesh-EnKF et Part-EnKF correspondent à deux paradigmes. Dans le premier cas, le choix a été fait de régénérer complètement la discrétisation à l'aide de méthode de transfert particule à grille et de remaillage. Dans le second cas, le choix a été fait de conserver la position des particules de chaque membre et d'approcher la solution analysée. Si ces filtres offrent des adaptations du filtre de Kalman d'Ensemble, ils semblent souffrir de plusieurs limitations inhérentes à leur schéma. Dans la prochaine section, leur capacité d'assimilation va être vérifiée sur plusieurs applications données.

2.6 Evaluation de la capacité des méthodes développées à assimiler les données sur plusieurs applications

Deux filtres dérivés de EnKF ont été développés. À l'aide de deux applications basées sur une méthode

2.6.1 Bilan

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] S. Bardenhagen and Edward Kober. The Generalized Interpolation Material Point Method. *CMES - Computer Modeling in Engineering and Sciences*, 5, June 2004.
- [3] C.H. Bishop, B.J. Etherton, and S.J. Majumdar. Adaptive sampling with the ensemble transform Kalman filter Part I : Theoretical aspects. *Monthly Weather Review*, 129(3) :420–436, 2001.
- [4] Alexandre Joel Chorin and Peter S Bernard. Discretization of a vortex sheet, with an example of roll-up. *Journal of Computational Physics*, 13(3) :423–429, November 1973.
- [5] Hsien-Ter Chou and Ching-Fang Lee. Cross-sectional and axial flow characteristics of dry granular material in rotating drums. *Granular Matter*, 11(1) :13–32, January 2009.
- [6] P.-P. Cortet, D. Bonamy, F. Daviaud, O. Dauchot, B. Dubrulle, and M. Renouf. Relevance of visco-plastic theory in a multi-directional inhomogeneous granular flow. *Europhysics Letters*, 88(1) :14001, oct 2009.
- [7] Georges-Henri Cottet and Petros D. Koumoutsakos. *Vortex Methods : Theory and Practice*. Cambridge University Press, 2000.
- [8] Comité de Prospective en Énergie de l’Académie des sciences. Les réacteurs nucléaires modulaires de faible puissance (smr) : État des lieux et perspectives. Avis et rapport, Académie des sciences, Octobre 2022.
- [9] P. Degond and S. Mas-Gallic. The weighted particle method for convection-diffusion equations. I - The case of an isotropic viscosity. II - The anisotropic case. *Mathematics of Computation*, 53 :485–507, October 1989.
- [10] G. Evensen. Sequential data assimilation with a nonlinear quasi-geostrophic model using Monte Carlo methods to forecast error statistics. *Journal of Geophysical Research : Oceans*, 99(C5) :10143–10162, 1994.
- [11] Chuyuan Fu, Qi Guo, Theodore Gast, Chenfanfu Jiang, and Joseph Teran. A polynomial particle-in-cell method. *ACM Transactions on Graphics*, 36(6) :1–12, November 2017.
- [12] GDR MiDi. On dense granular flows. *The European Physical Journal E*, 14(4) :341–365, August 2004.
- [13] R. A. Gingold and J. J. Monaghan. Smoothed particle hydrodynamics : theory and application to non-spherical stars. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 181(3) :375–389, 12 1977.
- [14] N.J. Gordon. Novel approach to nonlinear/non-gaussian bayesian state estimation. *IEE Proceedings F (Radar and Signal Processing)*, 140 :107–113(6), April 1993.

- [15] Yuanming Hu, Yu Fang, Ziheng Ge, Ziyin Qu, Yixin Zhu, Andre Pradhana, and Chenfanfu Jiang. A moving least squares material point method with displacement discontinuity and two-way rigid body coupling. *ACM Transactions on Graphics*, 37(4) :1–14, August 2018.
- [16] 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.
- [17] Ahmed Jarray, Vanessa Magnanimo, and Stefan Luding. Wet granular flow control through liquid induced cohesion. *Powder Technology*, 341 :126–139, January 2019.
- [18] Chenfanfu Jiang, Craig Schroeder, Andrew Selle, Joseph Teran, and Alexey Stomakhin. The affine particle-in-cell method. *ACM Transactions on Graphics*, 34(4) :1–10, July 2015.
- [19] Pierre Jop, Yoël Forterre, and Olivier Pouliquen. A constitutive law for dense granular flows. *Nature*, 441(7094) :727–730, June 2006. Number : 7094 Publisher : Nature Publishing Group.
- [20] R. E. Kalman. A New Approach to Linear Filtering and Prediction Problems. *Journal of Basic Engineering*, 82(1) :35–45, March 1960.
- [21] Leon B. Lucy. A numerical approach to the testing of the fission hypothesis. *The Astronomical Journal*, 82 :1013–1024, 1977.
- [22] J Mellmann. The transverse motion of solids in rotating cylinders—forms of motion and transition behavior. *Powder Technology*, 118(3) :251–270, 2001.
- [23] ONU - Assemblée générale. Résolution 2373 (xxii) - traité sur la non-prolifération des armes nucléaires, juin 1968.
- [24] Francisco Pedrayes, J.G. Norniella, Manuel Melero, Juan Menendez-Aguado, and Juan Jose Diaz. Frequency domain characterization of torque in tumbling ball mills using DEM modelling : Application to filling level monitoring. *Powder Technology*, 323, October 2017.
- [25] OLIVIER POULIQUEN and YOËL FORTERRE. Friction law for dense granular flows : application to the motion of a mass down a rough inclined plane. *Journal of Fluid Mechanics*, 453 :133–151, 2002.
- [26] W. Prager. Die druckverteilung an körpern in ebener potentialströmung. *Phys. Z.*, 29 :865–869, 1928.
- [27] Pierre G. Rognon, Thomas Miller, Bloen Metzger, and Itai Einav. Long-range wall perturbations in dense granular flows. *Journal of Fluid Mechanics*, 764 :171–192, 2015.
- [28] Louis Rosenhead. The formation of vortices from a surface of discontinuity. *Proc. R. Soc. Lond. A*, 134 :170–192, 1931.
- [29] Réseau de Transport d’Electricité (RTE). Bilan électrique 2023. Technical report, Réseau de Transport d’Electricité (RTE), Paris, France, 2023.
- [30] Steffen Schlömer, Gesine Hänsel, David de Jager, and Maarten Neelis. Technology-specific Cost and Performance Parameters.
- [31] O. Talagrand. Assimilation of observations, an introduction. *Journal of the Meteorological Society of Japan*, 75(1B) :191–209, 1997.
- [32] 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.
- [33] Peter Jan van Leeuwen. A consistent interpretation of the stochastic version of the Ensemble Kalman Filter. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 146(731) :2815–2825, 2020. eprint : <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1002/qj.3819>.