

Apprentissage machine pour la dynamique rapide : application à des gouttes d'eau choquées

Lisa GARCIA^{1,2} Gaël POETTE^{1,4} Jean-François GIOVANNELLI² David LUGATO¹ Florent VIROT³ Jean-Luc RULLIER¹

¹CEA-CESTA, 15 Avenue des Sablières, 33114 Le Barp, France

²IMS (Univ. Bordeaux, CNRS, B-INP), 351 Cours de la Libération, 33405 Talence Cedex, France

³CNRS-ISAE/ENSMA, 1 avenue Clément Ader, 86360 Chasseneuil du Poitou, France

⁴IMB, 351 Cours de la Libération, 33405 Talence Cedex, France

Résumé – Pour comprendre les phénomènes de dynamique rapide, tels que les gouttes d'eau choquées, des modèles physiques sont développés, des expériences sont réalisées et filmées. Les modèles doivent être confrontés aux données des films en vue d'approfondir leur compréhension. Dans cet article, nous utilisons les moyens amenés par l'apprentissage machine pour extraire les informations des films de manière automatique en prenant en compte les incertitudes d'extraction et en calibrant avec incertitudes les paramètres de modèles à travers une stratégie bayésienne. Cette méthodologie permet d'améliorer la compréhension de la fragmentation des liquides sous choc en fournissant des estimations robustes des paramètres malgré les incertitudes.

Abstract – To understand fast dynamic phenomena, such as shocked water drops, physical models are developed and experiments are carried out and filmed. The models need to be compared with the film data in order to gain a deeper understanding. In this article, we use the resources provided by machine learning to automatically extract information from films, taking into account extraction uncertainties and calibrating model parameters in this context using a Bayesian strategy. This methodology improves our understanding of the fragmentation of liquids under shock by providing robust parameter estimates despite the uncertainties.

1 Contexte applicatif

Le contexte est celui des phénomènes de dynamique rapide qui sont instationnaires, avec des échelles de temps caractéristiques courtes. Les gouttes de liquide frappées par une onde de choc en sont un exemple [4, 17]. Elles sont étudiées afin d'analyser les dommages causés par la pluie [13], la combustion de mélanges multiphasés [1] ou l'atténuation d'explosion [7].

Dans le cadre de ces études, des films observant l'explosion d'une goutte sont enregistrés et analysés. La Fig. 1 présente quelques images de l'un d'eux. L'image au temps $t = 0 \mu s$ montre une goutte d'eau posée sur deux fils. Au temps $t = 92 \mu s$, l'onde de choc a traversé la goutte qui est déformée et déplacée. Au temps $t = 241 \mu s$, elle est sur la droite de l'image et s'apprête à quitter le champ de la caméra. Le setup expérimental et les analyses classiques sont décrits dans [4, 17]. Lorsqu'une goutte est percutée par une onde de choc, plusieurs processus physiques de fragmentation entrent en jeu : la fragmentation en volume appelée « breakup » où la goutte mère se désintègre en gouttes plus petites appelées filles et la fragmentation en « surface » appelée « stripping » durant laquelle un brouillard se forme. Ce dernier occulte l'observation du breakup. Cependant, de nombreuses informations sont intéressantes à extraire des images pour analyser l'évolution de la goutte. Par exemple, le point de début (x_m) et de fin (x_M) du brouillard, dont un exemple est donné sur la Fig. 1.b, la distance du début du brouillard au choc détaché ou encore le déplacement de l'onde de choc. Ces informations sont complexes à extraire, d'autant plus qu'un nombre important d'expériences est réalisé, faisant varier à la fois la taille des gouttes et le nombre de Mach (vitesses des ondes de choc). En pratique, pour un film, les physiciens extraient

en général quelques dizaines de points x_m et x_M à la main. Une des contributions de ces travaux est l'automatisation de l'extraction de ces informations, c-à-d à la fois sur l'ensemble des images d'un film et pour un nombre de films important.

Un autre enjeu est d'être en mesure de calibrer des paramètres de modèles physiques sur les données extraites. Ceci permettrait de mieux comprendre les divers modèles dans un contexte incertain. Grâce aux outils d'apprentissage automatique, nous accélérons l'analyse de films pour ensuite calibrer des paramètres de modèles physiques.

Le plan de ce document est le suivant : dans une première partie, nous nous concentrons sur la manière de rendre l'expérience comparable aux sorties modèle : nous avons des films d'expérience et il est nécessaire d'en extraire des informations [2]. Dans une seconde partie, nous calibrons les paramètres d'un modèle de déplacement du brouillard en se servant des informations extraites.

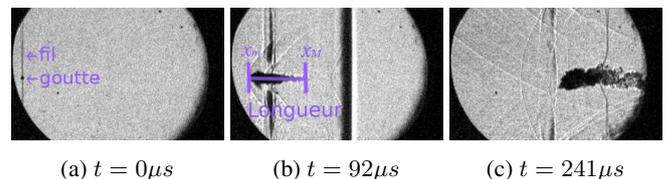


FIGURE 1 : Images de l'évolution d'une goutte de diamètre $650 \pm 50 \mu m$ au passage d'un choc (barre verticale à $t = 92 \mu s$) à Mach 4 se propageant de la gauche vers la droite.

2 Dépouillement de films

Le dépouillement manuel de films est une tâche très fastidieuse. De plus, deux opérateurs ne dépouillent pas le même film de la même manière : ils peuvent par exemple extraire des x_m et x_M différents. Pour éviter la prise de mauvaises décisions (invalidation à tort d'un modèle, sur-interprétation de résultats expliqués par des incertitudes,...), il est impératif d'effectuer une calibration de modèles robuste aux fluctuations de l'extraction. Les seules informations disponibles qui génèrent les incertitudes à l'extraction sont les niveaux de gris des pixels. Nous allons nous appuyer là-dessus afin d'extraire les observables et leurs incertitudes. Les pixels varient de 0 (noir) à N_α (blanc). En fonction des caméras, N_α peut varier. Afin d'étudier au mieux les pixels du brouillard et nous concentrer uniquement sur cette zone de l'image, nous devons exclure les zones noires hors brouillard, par exemple les bords noirs de l'image ou les zones de chocs (voir Fig. 1).

Ce problème est très proche de celui rencontré dans les applications médicales [5, 6] et dans l'analyse de tomographie des matériaux [10]. Dans ces applications, des réseaux de neurones sont utilisés, plus précisément les réseaux (nn)UNet pour segmenter l'image. Ce réseau est conçu pour comparer différentes architectures du réseau UNet et faire le meilleur choix. Il nécessite d'entraîner des réseaux sur des images labellisées (base d'entraînement). Cette base est constituée par segmentation manuelle faite par un expert. Elle englobe une zone (rectangulaire) qui fait consensus. Nous avons adopté une approche itérative en rajoutant petit à petit des images dans la base d'entraînement jusqu'à satisfaction. Le dernier réseau s'est entraîné sur 120 images labellisées (sur plusieurs films, de plusieurs expériences, dans des conditions différentes). Si une extraction manuelle est fastidieuse, une validation visuelle des images prédites par un expert est rapide : nous obtenons des garanties. Au final, avec seulement 120 images labellisées, déjà 5610 ont été prédites et validées.

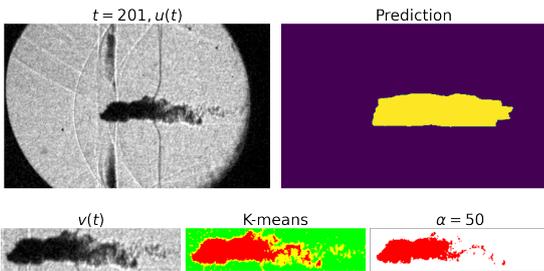


FIGURE 2 : (a) Image à $t = 201$ du film; (b) Masque de segmentation obtenu par le réseau nnUNet; (c) Sous-image de (a), notée v , après application de (b) sur (a); (d) K-means, $K = 3$; (e) Segmentation de (c) selon un masque défini à partir de (d) et un seuil α .

Sur la Fig. 2, le passage de la première image à la seconde correspond à la prédiction du réseau nnUNet, avec en violet le fond et en jaune le brouillard détecté. Le passage de la seconde à la troisième construit le plus petit rectangle possible autour de la zone jaune, la sous-image étant notée v_t . Une fois l'image v_t de la Fig. 2.c obtenue, nous mettons en place une méthode de seuillage. Soit $\alpha \in \{0, \dots, N_\alpha\}$, $t \in T$ avec T les temps des images du film, $x \in \{0, \dots, N_x\}$, $y \in \{0, \dots, N_y\}$, avec N_x et N_y les nombres de pixels en largeur et hauteur de v_t .

Les observables sont définis par :

$$x_m(t, \alpha) = \min \{x \mid v_t(x, *) \leq \alpha\},$$

avec $v_t(x, *)$ représentant $v_t(x, y) \forall y \in \{0, \dots, N_y\}$. Il en est de même pour $x_M(t, \alpha)$, pour lequel il suffit de remplacer min par max. À ce stade, il faut identifier les $\alpha \in \{0, \dots, N_\alpha\}$ correspondant au brouillard. Cette identification se formalise comme un problème de classification. Les experts décomposent la sous-image v_t en brouillard, turbulence et fond. Pour résoudre ce problème, nous proposons d'utiliser l'algorithme du K-means (avec $K = 3$), algorithme d'apprentissage non-supervisé [11]. Cet algorithme permet de passer de la troisième à la quatrième image. Ainsi, sur la Fig. 2.d, les pixels du fond sont notés K_t^F , en vert, ceux de la turbulence, K_t^T , en jaune et ceux du brouillard, K_t^B , en rouge. Pour éliminer le fond, les observables sont maintenant extraits tels que :

$$x_m(t, \alpha) = \min \{x \mid v_t(x, *) \leq \alpha, (x, *) \in K_t^T \cup K_t^B\}.$$

Cela revient visuellement à considérer les points rouges de la Fig. 2.e le plus à gauche ($x_m(t, \alpha)$) et le plus à droite ($x_M(t, \alpha)$). La Fig. 3 affiche les x_m et x_M extraits à chaque temps et selon différentes valeurs de $\alpha \in E(t) = \{v_t(x, y) \mid (x, y) \in K_t^T \cup K_t^B\}$ où $E(t)$ désigne les valeurs des pixels de la sous-image, hors fond. De la même manière que précédemment, ces courbes ont été validées par les physiciens experts. À noter que nous sommes dans un contexte de données manquantes dans le sens où pour deux temps différents $t_1 \neq t_2$, les tailles des ensembles de pixels considérés pour l'extraction peuvent être très différentes, i.e. $\text{Card}(E(t_1)) \neq \text{Card}(E(t_2))$.

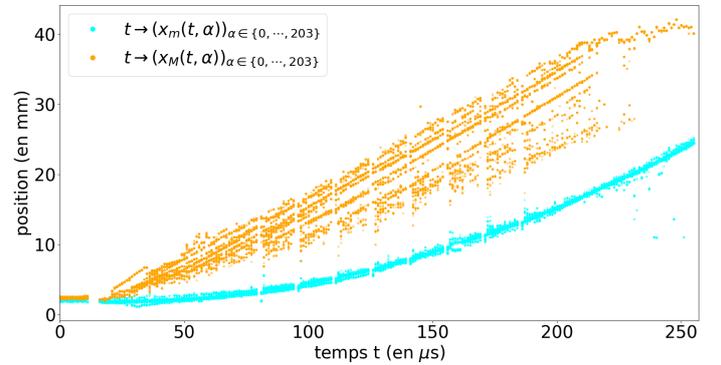


FIGURE 3 : Début du brouillard (bleu) et fin du brouillard (orange) au cours du temps. La multiplicité des points à chaque temps représente les incertitudes.

Les courbes de la Fig. 3, comparées à des points extraits à la main, se sont avérées très satisfaisantes du point de vue des experts (cet aspect fera l'objet d'une publication future). Toutefois, la prise en compte de la multiplicité des points à chaque temps est plus complexe à exploiter du point de vue de la calibration. Ce point est abordé dans la section suivante.

3 Calibration sous incertitudes

Plusieurs modèles sont d'intérêt pour les physiciens. Ils cherchent à en estimer les paramètres comme par exemple l'accélération (étroitement liée à la force du choc, la masse et la forme des gouttes, etc.), le temps de breakup, le temps

de stripping, etc. Un modèle de déplacement du brouillard au cours du temps permet d'étudier l'évolution de la goutte sous l'effet de divers réglages comme la pression ou le Mach. Il permet aussi d'étudier, lorsque plusieurs gouttes sont proches, la possible interaction entre ces gouttes. Dans ce papier, nous nous concentrons sur le modèle simplifié suivant, en trois morceaux (constant, parabolique et linéaire dans le temps) :

$$x_m(t, \boldsymbol{\eta}) = x_0 + a \left[\frac{1}{2}(t - t_d)^2 \mathbb{1}_{t_d \leq t \leq t_g} + \left[(t_g - t_d)t - \frac{1}{2}(t_g^2 - t_d^2) \right] \mathbb{1}_{t > t_g} \right]. \quad (1)$$

Dans ce modèle, t_d représente le moment à partir duquel l'onde de choc traverse la goutte (en μs), t_g le moment à partir duquel le brouillard se déplace à la vitesse du gaz (en μs), x_0 la position du début de la goutte à l'instant t_0 (en mm), avant que l'onde de choc ne soit passée, a l'accélération (en $mm/\mu s^2$). Nous souhaitons estimer $\boldsymbol{\eta} = (x_0, t_d, t_g, a)$.

Pour ce faire, le cadre bayésien [14, 3] permet de considérer à la fois la connaissance apportée par les mesures expérimentales *via* la vraisemblance et la connaissance apportée par les experts *via* la densité *a priori*. Il est également un outil efficace pour prendre en compte les données manquantes.

Soit $x_m(t)$, une mesure expérimentale, nous faisons l'hypothèse qu'elle peut être expliquée par la sortie modèle en un certain $\boldsymbol{\eta}$ plus d'éventuelles incertitudes tel que $x_m(t) = x_m(t, \boldsymbol{\eta}) + e(t)$ avec $e(t)$ l'erreur du modèle [8]. Lorsqu'aucune information n'est disponible sur la distribution des erreurs de modèle [9], comme c'est le cas ici, il est courant de la modéliser par une distribution normale centrée et d'une précision γ_{mod} à déterminer : $e(t) \sim \mathcal{N}(0, \gamma_{mod}^{-1})$ et $(e(t))_{t \in T}$ sont indépendantes et identiquement distribuées. De plus, nous n'avons pas connaissance de $x_m(t)$. Cependant, nous pouvons l'exprimer en fonction de l'extraction $(x_m(t, \alpha))_\alpha$, présentée section 2 et d'une erreur d'extraction $e_{ext}(t, \alpha)$: $x_m(t) = x_m(t, \alpha) + e_{ext}(t, \alpha)$. Pour avoir une idée de l'erreur d'extraction, la Fig. 4 présente la fréquence d'occurrences d'un pixel candidat pour $x_m(t)$ en fonction du temps : certains pixels sont plus probables que d'autres. L'incertitude sur la position au sein du pixel candidat est quant à elle directement liée au procédé d'acquisition d'images par la caméra. Elle est généralement modélisée par une loi normale centrée indépendamment du pixel. Nous considérons donc $e_{ext}(t, \alpha) \sim \mathcal{N}(0, \gamma_{ext}^{-1})$ et $\perp\!\!\!\perp (e_{ext}(t, \alpha))_{t \in T, \alpha \in E(t)}$. Finalement, nous pouvons regrouper ces deux types d'erreur dans $\tilde{e}(t, \alpha)$ telle que $\tilde{e}(t, \alpha) = e(t) - e_{ext}(t, \alpha) \sim \mathcal{N}(0, \gamma^{-1} = \gamma_{ext}^{-1} + \gamma_{mod}^{-1})$ et $\perp\!\!\!\perp (\tilde{e}(t, \alpha))_{t \in T}$. En pratique, il n'est pas nécessaire d'estimer γ_{mod} et γ_{ext} , une estimation de γ suffit.

Notons $\boldsymbol{\theta} = (\boldsymbol{\eta}, \gamma)$, l'ensemble des paramètres à estimer. La vraisemblance est la loi de la variable aléatoire $x_m(t, \alpha) | \boldsymbol{\theta} \sim \mathcal{N}(x_m(t, \boldsymbol{\eta}), \gamma^{-1})$. La densité *a priori* est notée $\pi(\boldsymbol{\theta})$. Elle permet de prendre en compte les contraintes physiques. Après discussion avec les experts, des lois uniformes sont choisies avec comme support : $[0, L]$ pour le paramètre x_0 avec L la largeur de l'image, $[0, t_{max}]$ pour t_d et t_g avec t_{max} le temps à la dernière image du film. En effet, il est admis que les temps t_d et t_g ont lieu entre le début et la fin du film. De plus, $t_d \leq t_g$, ce qui donne $\pi(t_d, t_g) = \frac{2}{t_{max}^2} \mathbb{1}_{0 \leq t_d \leq t_g \leq t_{max}}$. L'accélération a est considérée entre 0 et $10^{-3} mm/\mu s^2$. Comme aucune information n'est disponible sur γ , le choix s'est porté sur une

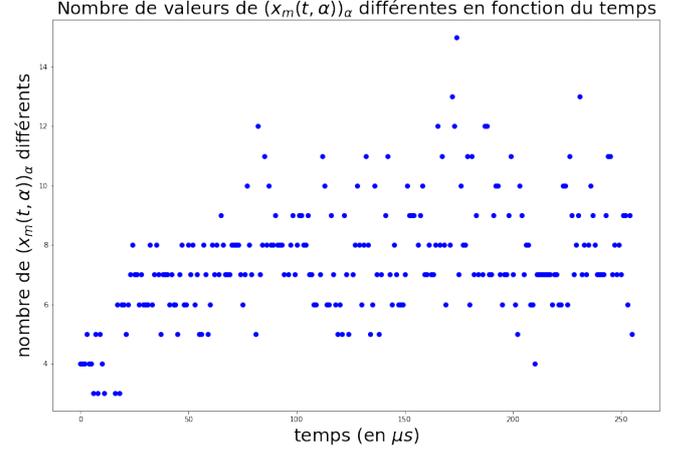


FIGURE 4 : Nombre de $(x_m(t, \alpha))_\alpha$ différents à chaque temps.

loi peu informative, la loi Γ avec comme paramètres $a_0 = 10^{-3}$, $b_0 = 10^{-3}$. La densité *a priori* $\pi(\boldsymbol{\theta})$ s'exprime alors comme le produit des densités précitées (par indépendance).

Par le théorème de Bayes, la densité *a posteriori* s'écrit :

$$\pi(\boldsymbol{\theta} | x_m(t, \alpha)) = \frac{\pi(x_m(t, \alpha) | \boldsymbol{\theta}) \pi(\boldsymbol{\theta})}{p(x_m(t, \alpha))} \propto \pi(x_m(t, \alpha) | \boldsymbol{\theta}) \pi(\boldsymbol{\theta}),$$

où $p(x_m(t, \alpha))$ est la distribution d'une mesure expérimentale. En considérant toutes les mesures expérimentales et les hypothèses d'indépendance précédentes, la vraisemblance s'écrit :

$$\pi((x_m(t, \alpha))_{t, \alpha} | \boldsymbol{\theta}) \propto \prod_{\alpha=0}^{N_\alpha} \prod_{t \in T} \pi(x_m(t, \alpha) | \boldsymbol{\theta}). \quad (2)$$

La densité *a posteriori* s'en déduit :

$$\begin{aligned} \pi(\boldsymbol{\theta} | (x_m(t, \alpha))_{t, \alpha}) \\ \propto \pi(\boldsymbol{\theta}) \gamma^{\frac{|T|(N_\alpha+1)}{2}} \exp\left(-\gamma \left(\frac{1}{2} \sum_{\alpha, t} (x_m(t, \alpha) - x_m(t, \boldsymbol{\eta}))^2 \right)\right). \end{aligned} \quad (3)$$

Cette densité *a posteriori* a une forme complexe et ses propriétés (maximum, moyenne,...) et zone(s) de forte densité ne sont pas connues. De plus, nous sommes en dimension 5, étudier cette densité à partir d'une grille deviendrait rapidement coûteux. Une solution pour l'étudier est de l'échantillonner. Des algorithmes d'échantillonnage de type MCMC permettent de générer des échantillons de n'importe quelle densité et possèdent de bonnes propriétés de convergence.

L'algorithme MCMC utilisé est le Metropolis-within-Gibbs avec une loi de proposition par marche aléatoire. $K = 5 \times 10^5$ tirages sont effectués et la phase de chauffe, avant que l'algorithme ne converge, est de 10^5 .

La Fig. 5 montre les histogrammes de l'échantillon, pour chacun des paramètres. Ce sont les densités marginales de la densité *a posteriori*. Elles sont très piquées et concentrées seulement sur une zone restreinte de leurs supports *a priori*, montrant l'apport important des mesures expérimentales par rapport aux connaissances *a priori* (avant l'expérience).

L'estimateur optimal des paramètres, selon la fonction de perte quadratique, est la moyenne *a posteriori*. Une approximation de celle-ci, notée $\hat{\boldsymbol{\theta}} = (\hat{\boldsymbol{\eta}}, \hat{\gamma})$, est représentée, pour chaque paramètre, par la barre verticale rouge tandis que les quantiles 0.025 et 0.975, notés $q_{0.025}$ et $q_{0.975}$, sont en orange.

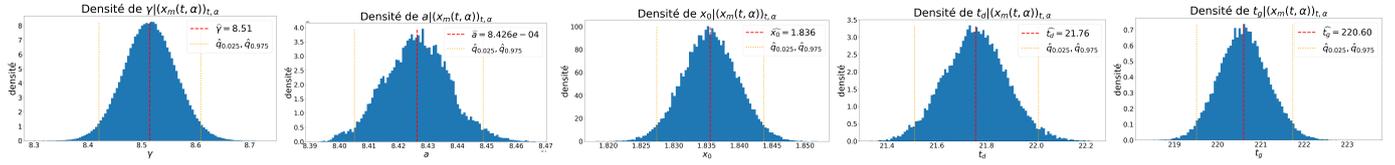


FIGURE 5 : Densités marginales obtenues par échantillonnage.

Bien que la loi de l'échantillon converge vers la densité (et donc que l'approximation de la moyenne *a posteriori* converge vers celle-ci), il est d'usage d'effectuer un certain nombre de vérifications. L'une d'elles consiste à regarder visuellement le modèle obtenu grâce à l'échantillon de la densité *a posteriori*.

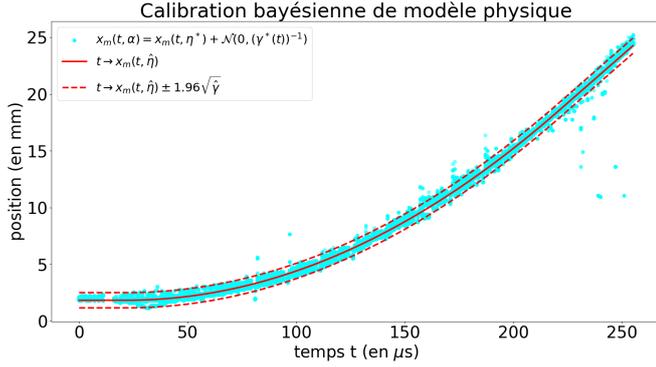


FIGURE 6 : Modèle en $\hat{\eta}$ (rouge) et valeurs délimitant l'intervalle dans lequel on s'attend à trouver 95% des réalisations d'une loi normale centrée en $x_m(t, \hat{\eta})$, avec une variance égale à $\hat{\gamma}^{-1}$ (rouge pointillés).

Sur la Fig. 6, les mesures expérimentales avec incertitudes sont couleur cyan. La courbe rouge pleine représente le modèle calculé avec $\hat{\eta}$ tandis que les deux courbes rouges pointillées représentent les quantiles 0.025 et 0.975 de la loi $\mathcal{N}(x_m(t, \hat{\eta}), \hat{\gamma}^{-1})$. Ces courbes nous donnent confiance aux estimations obtenues : la courbe rouge pleine passe bien à travers les mesures expérimentales et 95% des mesures sont situées entre les courbes rouges pointillées. Compte tenu de ces résultats, nous n'avons pas de raisons de remettre en cause le modèle et avons confiance en les paramètres estimés.

4 Vers la comparaison de modèles

Nous avons, dans une première partie, extrait des observables avec incertitudes en s'appuyant à la fois sur un réseau de neurones pour encadrer le brouillard et sur une méthode de segmentation des pixels. Nous nous sommes ensuite servis d'une partie des observables extraits avec incertitudes comme mesures expérimentales afin d'estimer les paramètres d'un modèle simple de déplacement du brouillard, en passant par une stratégie bayésienne.

Parmi les perspectives de ce travail, nous envisageons d'exploiter plus d'observables extraits des films conjointement à des modèles de physiques plus complexes, notamment issus de codes de simulation.

Dans ce contexte, les paramètres à estimer sont plus nombreux et plus complexes avec notamment des sorties de modèle spatio-temporelles. Le temps de calcul est également rallongé.

Un enjeu est d'arriver à estimer ces paramètres en un temps de calcul raisonnable. Selon les besoins, nous pourrions accélérer la convergence de l'échantillonnage MCMC [15, 16, 12] en ciblant de manière plus efficace les zones de forte densité et/ou en passant par la construction d'un méta-modèle. De la même manière que pour le modèle de déplacement du brouillard, nous serons amenés à étudier différents modèles et à les comparer.

Références

- [1] E.J. CHANG *et al.* : Shock wave interactions with particles and liquid fuel droplets. *Shock Waves*, 12(4):333–341, 2003.
- [2] L. GARCIA : Détection et suivi d'objets par apprentissage profond appliqué à des films d'essais en dynamique rapide. *Master's thesis*, 2023.
- [3] A. HAZART *et al.* : Inverse transport problem of estimating point-like source using a bayesian parametric method with mcmc. *Signal Processing*, 96:346–361, 2014.
- [4] D. HÉBERT *et al.* : Investigation of mechanisms leading to water drop breakup at Mach 4.4 and Weber numbers above 105. *SN Applied Sciences*, 2(1):69, 2019.
- [5] F. ISENSEE *et al.* : nnU-Net : Self-adapting Framework for U-Net-Based Medical Image Segmentation, 2018.
- [6] F. ISENSEE *et al.* : nnU-Net : a self-configuring method for deep learning-based biomedical image segmentation. *Nature methods*, 18(2):203–211, 2021.
- [7] G. JOURDAN *et al.* : Attenuation of a shock wave passing through a cloud of water droplets. *Shock Waves*, 20(4):285–296, 2010.
- [8] M. C. KENNEDY *et al.* : Bayesian Calibration of Computer Models. *Journal of the Royal Statistical Society Series B : Statistical Methodology*, 63(3):425–464, 2001.
- [9] P. LÉVY : Théorie des erreurs. La loi de Gauss et les lois exceptionnelles. *Bulletin de la Société Mathématique de France*, 52:49–85, 1924.
- [10] C. LI : *Apprentissage profond interactif et semi-supervisé pour la segmentation volumique en tomographie électronique*. Thèse de doctorat, Université Jean Monnet - Saint-Étienne, 2023.
- [11] J. MACQUEEN : Some methods for classification and analysis of multivariate observations. In *Proceedings of the Fifth Berkeley Symposium on Mathematical Statistics and Probability, Volume 1 : Statistics*, volume 5, pages 281–298. University of California press, 1967.
- [12] Y. M. MARZOUK *et al.* : Dimensionality reduction and polynomial chaos acceleration of bayesian inference in inverse problems. *Journal of Computational Physics*, 228(6):1862–1902, 2009.
- [13] G. PARK *et al.* : Experimental study of time-dependent evolution of water droplet breakup in high-speed air flows. *International Journal of Aeronautical and Space Sciences*, 18(1):38–47, 2017.
- [14] C. P. ROBERT : *The Bayesian choice. From Decision-Theoretic Foundations to Computational Implementation*. Springer-Verlag, 2007.
- [15] C. P. ROBERT *et al.* : Accelerating mcmc algorithms. *Wiley Interdisciplinary Reviews : Computational Statistics*, 10(5):e1435, 2018.
- [16] B. SUDRET *et al.* : Surrogate models for uncertainty quantification : An overview. In *2017 11th European Conference on Antennas and Propagation (EUCAP)*, pages 793–797, 2017.
- [17] F. VIROT *et al.* : Experimental investigation of the interaction between a water droplet and a shock wave above Mach 4. *Shock Waves*, 33(5):369–383, 2023.