

Soutenance de thèse

José ZAPATA USANDIVARAS soutiendra sa thèse de doctorat, préparée au sein de l'équipe d'accueil doctoral ISAE-ONERA EDyF et intitulée « *Modèles de substitution basés sur des simulations aux grandes échelles et sur l'apprentissage profond pour la conception d'injecteurs de moteurs de fusée coaxiaux* »

Le 14 mai 2024 à 10h00, salle des thèses ISAE-SUPAERO

devant le jury composé de

Mme Bénédicte CUENOT	CERFACS	Directrice de thèse
Mme Annafederica URBANO	ISAE-SUPAERO	Codirectrice de thèse
M. Wolfgang POLIFKE	Technische Universität München	Rapporteur
M. Ricardo VINUESA MOTILVA	KTH Royal Institute of Technology	Rapporteur
M. Alessandro PARENTE	Université Libre de Bruxelles	Examineur
M. Thomas SCHMITT	CentraleSupélec	Examineur

Résumé : La conception des fusées est soumise à une pression croissante pour réduire leurs coûts de développement. L'utilisation de la CFD pour la simulation des processus de combustion des moteurs-fusées (LRE) peut constituer une alternative économique aux coûteuses expériences. Pourtant, une approche holistique pour la conception préliminaire avec la CFD n'est pas encore pratique. Des modèles de substitution appropriés peuvent contourner ce dilemme grâce à des temps de restitution rapides, sans perte de précision significative. La conception d'un injecteur a un impact direct sur l'efficacité de la combustion et les charges thermiques. Dans ce travail, nous procédons à l'évaluation des stratégies appelées data-driven pour obtenir des modèles de substitution des injecteurs coaxiaux. Un accent particulier est mis sur les techniques supervisées d'apprentissage profond (DL). Nous commençons par réaliser une validation du concept, en construisant une base de données de ~3600 simulations 2D axisymétriques RANS (Reynolds Averaged Navier Stokes) d'injecteurs coaxiaux couvrant un espace de paramètres à 9 dimensions, comprenant la géométrie et le régime de combustion. Des modèles de quantités scalaires d'intérêt (Qoi), du profil de flux de chaleur de paroi 1D et de champ de température moyen 2D, sont formés et validés. Les modèles utilisent des réseaux neuronaux entièrement connectés (FCNN), et un U-Net adapté pour le cas 2D. Les résultats se comparent bien à d'autres méthodes établies sur l'ensemble des données d'essai. L'approche RANS présente des lacunes évidentes lorsqu'il s'agit d'applications de combustion turbulente. Au lieu de cela, les simulations aux grandes échelles (LES), sont en principe mieux adaptées à la modélisation de la combustion turbulente. La méthodologie déployée sur les données RANS est donc appliquée sur une base de données de ~100 LES d'injecteurs couvrant un espace de conception 3D, à un coût par échantillon beaucoup plus élevé que RANS. En raison des coûts de calculs élevés, des maillages grossiers ainsi que d'autres simplifications sont adoptés pour la génération de cette base de données LES, qui est ainsi qualifiée de basse fidélité (LF). Les FCNN et les U-Nets sont utilisés pour obtenir des modèles de substitution des Qoi scalaires et des champs stationnaires 2D avec des performances satisfaisantes pour la tâche de prédiction LF. Afin d'améliorer la qualité des modèles obtenus au sens de leur capacité à décrire les phénomènes physiques, sans pour autant devoir les entraîner sur des simulations plus raffinées et coûteuses, une approche multifidélité (MF) est envisagée en tirant parti de l'apprentissage par transfert inductif sur les U-Nets. Les modèles sont réentraînés et validés sur un ensemble plus petit de ~10 échantillons de haute fidélité (HF). Le modèle MF donne de bons résultats dans la tâche de prédiction HF sur les échantillons de test, avec la topologie de flamme

souhaitée, à un coût de calcul bien inférieur à ce qu'aurait coûté uniquement sur des données HF. Par ailleurs, les informations liées au comportement dynamique restituées par la LES sont exploitées pour le développement de modèles d'ordre réduit pour la prédiction spatio-temporelle de l'écoulement réactif. Nous développons des émulateurs d'un injecteur LRE au moyen d'autoencodeurs convolutifs (CNN-AE) et d'un multilayer perceptron (MLP). Le contenu spectral reconstruit du signal surpasse celui d'une POD équivalente, ce qui démontre la capacité de compression supérieure du CNN-AE. Cependant, des problèmes de régularité sont soulevés lors de la propagation de l'émulateur au-delà de l'horizon d'apprentissage. Enfin, ce travail met en évidence les défis et les opportunités de l'utilisation de la DL pour la prédiction des caractéristiques stationnaires et dynamiques des données LES de l'écoulement réactif dans un injecteur de moteur fusée.

Mots-clés : Moteurs fusées, Simulation aux grandes échelles, Combustion, Modèles de substitutions, Apprentissage profond, Injecteurs coaxiaux

Summary: Liquid rocket engines (LRE) are complex systems. Several dependent sub-systems, that have to be designed conjointly, intervene in the design of the whole system. In particular, the fluid flows description in the combustion chamber, in the cooling system and in the feed system play a fundamental role at this level. The preliminary sizing of the engine is based on semi-empirical correlations to describe the sub-systems, calibrated on existing engines. These low fidelity models induce high uncertainties in the subsystems designs that propagate and affect the global engine sizing. As a consequence, the engine development strongly relies on experimental studies, that go up to hot-tests of the engine, making use of very expensive experimental facilities. Therefore, increasing the numerical modeling reliability is a strategic matter that needs to be addressed in order to reduce the development cost of innovative LRE for future launchers, and thus ensuring access to space. High fidelity numerical simulation, and specifically large eddy simulation (LES), has demonstrated its capacity to finely describe complex physical phenomena in LRE combustion chambers. Nevertheless, LES is still a highly computational cost methodology, with long restitution times, which can limit its utilization in the context of concrete applications. What is the best way to exploit this tool for design is an interesting question which is under investigation today. In order to answer this question, an original and innovative strategy is proposed in this PhD thesis. The main idea is to build surrogate models, using numerical deep learning methodologies and data from LES of the system we want to model. These surrogate models must allow to avoid a systematic utilization of the high-fidelity simulation in the process of system optimization, thus permitting to significantly lower the computational cost. Different types of surrogate models can be envisaged, and we will particularly focus on convolutional neural networks (deep learning). The long-term goal is to obtain models capable to describe different LRE sub-systems (injector plate, nozzle, regenerative cooling...) and their interactions, and to integrate them in a tool for the multidisciplinary analysis and optimization (MDAO) of the whole engine. The present PhD thesis proposal is part of the technological context of reusable LRE, using methane and oxygen as propellants. These technological choices are clearly identified in Europe as strategic with the aim of reducing LRE production cost and increasing their competitiveness against the growing number of competitors in the international market. However, these choices induce some constraints that bring many scientific issues. Specifically, reutilization implies to have a highly throttleable system, that guarantees the best performances over a large range of operating conditions. The main goal of the PhD thesis is to develop methodologies to build surrogate models for an injector plate, with gaseous methane/oxygen shear coaxial injectors, in a reusable combustion chamber, and to integrate them in a MDAO tool for the whole LRE. The three principal points that have to be addressed are: (i) the dimension of the obtained surrogate model (global quantity, profile or whole field), (ii) considering non-stationary phenomena and (iii) the prediction of the behavior of a multi-injectors chamber using the single injectors simulations. An experimental simplified test case, existing, and representative of a real system, will be selected in

order to develop and evaluate the deep learning methodologies – it could be, for instance, one of experimental set up studied at ONERA, MASCOTTE or CONFORTH, or it could be one of the experimental configurations operated at TU Munich. The model will have to be able to reproduce the pressure losses, the combustion efficiency and the temperature stratification in the chamber, as a function of geometrical parameters and/or operating conditions parameters, pre-selected. The data will be generated with LES carried out with the AVBP code developed at CERFACS. The PhD thesis will be organized as follow:

- Multi-physical LES of a multi-injectors combustion chamber, modeling the conjugate heat transfer in the wall. Validation through comparison with experimental data.
- Definition and analysis of a learning configuration, extracted from the complete simulation (for instance one single coaxial injector). Definition of the geometrical and/or operational parameters to be tested and their variation range, as well as the definition of the design of experiments.
- Development and evaluations of different methodologies to build surrogate models: radial based functions, Kriging, deep neural networks. The goal will be to obtain the models that give responses of different dimensions: scalar, wall heat flux profile, complete fields.
- Extension of the surrogate models to non-stationary cases (for instance a rapid variation of the mass flow rates).
- Multi-injector chamber modeling using surrogate models for a single injector and comparisons with the reference simulation.
- Comparison of different surrogate models in a MDAO tool for LRE design (tool developed at ISAE).

Keywords: Rocket Engines, Large Eddy Simulations, Combustion, Surrogate Models, Deep Learning, Coaxial Injectors