

Développement d'une méthode de régression symbolique pour la prédiction du flux de chaleur pariétal dans les simulations 3D du refroidissement liquide à haut nombre de Prandtl

Contexte, état de l'art et objectif de la thèse

En mécanique des fluides numériques (CFD), les couches limites hydrodynamique et/ou thermique sont habituellement trop fines pour être résolues. Une approche usuelle pour résoudre ce problème, notamment pour les modèles de type Reynolds-Averaged Navier Stokes (RANS), consiste à adopter un maillage grossier et à utiliser des fonctions pariétales, ou lois de paroi (voir Figure 1) : elles font l'hypothèse de l'existence d'un profil de vitesse (ou de température) adimensionnel travers la couche limite, permettant de déduire d'un ensemble I de variables dans la première cellule à la paroi le frottement pariétal τ_w (ou le flux de chaleur pariétal Q_w). Dans le solveur RANS, les grandeurs τ_w et Q_w ainsi calculées permettent de résoudre les équations de Navier-Stokes (moment et énergie) dans la cellule pariétale. Cependant, les lois de paroi typiquement utilisées en RANS reposent sur des hypothèses fortes, et ne sont théoriquement valides que pour certains types d'écoulements canoniques, dans des conditions très strictes. Dans la plupart des applications industrielles, les écoulements s'écartent de ces conditions : l'usage de ces lois de paroi « standards » induit donc des prédictions erronées du frottement ou des transferts thermiques pariétaux, pouvant impacter l'écoulement dans son ensemble.

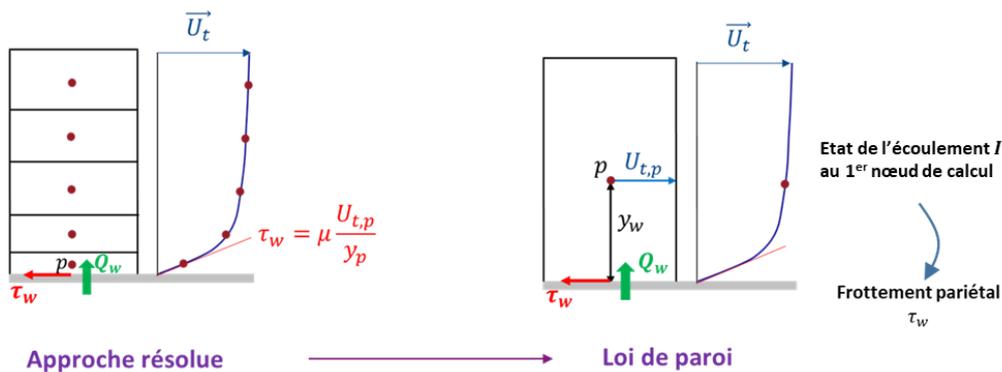


Figure 1- Calcul du frottement pariétal τ_w dans le cas d'un calcul complètement résolu (à gauche), ou en utilisant un maillage grossier combiné à une loi de paroi (à droite)

L'utilisation de l'Intelligence Artificielle en CFD s'avère très prometteuse pour diminuer le temps de calcul ou proposer de nouveaux modèles physiques. Concernant le second objectif, la littérature foisonne d'études utilisant l'IA pour proposer de nouveaux modèles de turbulence en RANS (Ling, Kurzawski et Templeton 2016) ou des modèles de sous-maille en LES pour des écoulements réactifs (Lapeyre et al. 2019; Nikolaou et al. 2021) ou inertes (Wang et al. 2018). En revanche, peu de travaux se sont jusqu'à présent penchés sur la modélisation des écoulements turbulents pariétaux, pour lesquels les modèles physiques disponibles sont confrontés à de grandes difficultés pour être applicables et prédictifs.

De récents travaux IFPEN (Rondeaux et al.) (2019-2022), illustrés par la Figure 2, ont montré la capacité d'un réseau de neurones entraîné sur des données haute-fidélité (càd. à haute résolution combinée avec des approches de type LES et DNS) résolues à la paroi à reproduire la physique d'une couche limite turbulente hors-équilibre, en inférant avec précision la vitesse de frottement u_τ (et donc le frottement pariétal τ_w) à partir d'un ensemble I de variables directes de l'écoulement à une distance correspondant à la résolution pariétale de maillages grossiers typiques du RANS. Le couplage entre solveur RANS et réseau de neurones a été réalisé avec succès, et a permis d'améliorer la prédiction du frottement pariétal pour les configurations testées par rapport à une loi de paroi classique. Ces travaux, innovants et encourageants, ont néanmoins mis en évidence certaines difficultés inhérentes aux réseaux de neurones :

- L'impossibilité d'interpréter le modèle de manière physique, ce qui allié à un manque de robustesse, rend difficile la généralisation du modèle, c'est-à-dire son utilisation à d'autres types d'écoulement que ceux ayant servi à son apprentissage ;
- L'implémentation dans un code CFD de l'inférence du réseau préalablement entraîné est fastidieuse et peut fortement dégrader le temps de calcul si elle n'est pas soigneusement optimisée. De plus, cela nécessite l'accès aux sources, ce qui est rarement possible pour les codes commerciaux. Ces aspects freinent largement l'usage d'un modèle issu d'une approche IA et sa diffusion au sein de la communauté CFD.

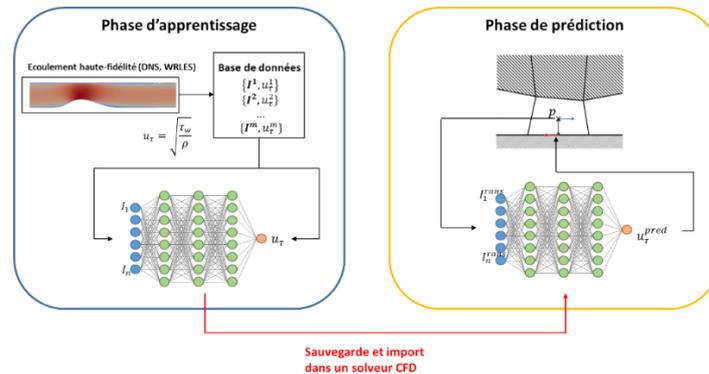


Figure 2 - Schéma représentant les étapes d'apprentissage (à gauche) et de prédiction (à droite) d'une MLWF (machine-learning wall function)

La thèse proposée s'inscrit dans la continuité de ces premiers travaux, et vise à adresser les problématiques listées ci-dessus à travers le développement d'une méthode de régression symbolique pour la formulation de lois de paroi analytiques. Ces approches sont le plus souvent des variantes d'algorithmes de *gene expression programming* (GEP) (Ferreira 2001). Celles-ci forment automatiquement une expression analytique à partir d'un ensemble prédéfini d'opérateurs et d'opérandes, de façon à ce qu'elle corrèle au mieux des données d'apprentissage en termes à la fois d'erreur, de régularité et de simplicité. L'algorithme employé est évolutionnaire, faisant évoluer une population de candidat-modèles selon une approche de type algorithme génétique. Les modèles analytiques résultants sont interprétables et facilement implémentables dans un code CFD, soit directement dans les sources ou via une UDF (user-defined function) pour des codes commerciaux. De plus, on peut s'assurer d'un impact minimal sur le temps de calcul en privilégiant des modèles limitant la raideur numérique, et viser la régularité et la robustesse des modèles en limitant le nombre de termes non-linéaires (Weatheritt et Sandberg 2017).

Moins répandus que les réseaux de neurones, qui bénéficient de bibliothèques déjà bien établies (TensorFlow, PyTorch) et d'une vaste communauté d'utilisateurs, les algorithmes de régression symbolique sont néanmoins déjà utilisés pour la modélisation en CFD. Différentes études se sont notamment intéressées à la modélisation du tenseur de Reynolds pour la fermeture des équations RANS. On citera ainsi les travaux de Witherritt et al. (Weatheritt et Sandberg 2016; Weatheritt et Sandberg 2017; Akolekar et al. 2018), qui utilisent une approche GEP non-déterministe pour la formulation de modèles pour la partie anisotropique du tenseur de Reynolds à partir de données haute-fidélité DNS ou LES. L'interprétabilité des modèles a permis de sélectionner les plus robustes (en limitant le nombre de termes non-linéaires), de sorte qu'après implémentation dans un code RANS, la convergence des calculs à partir d'écoulements au repos a été améliorée, et donne de bonnes prédictions sur des configurations non apprises. Afin de contraindre l'algorithme GEP vers la recherche de modèles plus robustes, d'autres auteurs se sont tournés vers des méthodes de régression déterministe « sparse » (*sparse regression*) (Beetham et Capecelatro 2020; Schmelzer, Dwight et Cinnella 2020; Saïdi et al. 2022), afin de créer des fonctions provenant d'une bibliothèque de candidats prédéfinis, sans recombinaison aléatoire. La recherche est alors contrainte vers des modèles algébriques de complexité minimale par des techniques de régression dédiées.

Ces approches d'apprentissage « off-line » ont récemment été étendues à un apprentissage « on-line » (Zhao et al. 2020; Saïdi et al. 2022), c'est-à-dire que chaque candidat-modèle est évalué par un calcul RANS effectué pendant la procédure d'apprentissage, au lieu d'être évalué sur des entrées issues de données haute-fidélité. Plus complexe à mettre en œuvre et nécessitant des ressources de calcul non négligeables, cette méthode dite de « CFD-driven machine learning » permet cependant d'assurer la

cohérence du modèle, et d'obtenir de bien meilleures prédictions lors des calculs RANS en éliminant dès la phase d'apprentissage les modèles ne permettant pas la convergence des simulations.

L'originalité de la thèse proposée est de développer cette méthode (dans sa version « off-line » dans un premier temps) pour une application à la modélisation d'écoulements pariétaux, un aspect non encore adressé dans l'état de l'art publié. Ainsi, l'objectif de la thèse est de formuler des lois de paroi analytiques à travers le développement d'une méthode de type GEP adaptée. On vise à obtenir des modèles interprétables et exhibant une régularité et une robustesse accrues, et pouvant avoir le potentiel d'une plus grande généralisabilité à des configurations plus variées que les méthodes basées sur des réseaux de neurones. Cette nouvelle approche aura également l'avantage d'être plus aisément implémentable que des réseaux de neurones dans tout type de code CFD.

Si la mise en place de la méthodologie pourra se faire en profitant des bases de données et cas-test déjà établis lors des travaux IFPEN d'E. Rondeaux, on étendra rapidement l'application à la prédiction du flux de chaleur pariétal (en lieu et place des lois de paroi thermiques classiquement implémentées en CFD), un élément clef pour de nombreux domaines d'application IFPEN impliquant des aspects de refroidissement par phase liquide: motorisations électriques et H2, refroidissement d'électroniques, batteries et piles à combustible, etc. En effet, une modélisation prédictive des transferts thermiques dans le cadre du refroidissement liquide de nombreux composants (telles les têtes de bobines de machines électriques ou les puces de type WBG d'électroniques de puissance) est un enjeu fort pour assurer leur bon fonctionnement. Il s'agit d'une problématique très actuelle et présentant de réels enjeux scientifiques et techniques tant les écoulements en jeu sont complexes : jets liquides impactant une surface rugueuse/lisse, plane/concave, fixe/en rotation, ruissellement de film, interactions avec un écoulement turbulent. En outre, la nature même des liquides de refroidissement, souvent des huiles à haut nombre de Prandtl, complique encore un peu plus cette tâche. On est alors en présence d'un couplage fort entre vitesse et thermique, d'autant que la viscosité de l'huile varie fortement avec la température.

Plusieurs approches CFD sont aujourd'hui mises en œuvre à IFPEN pour prédire et optimiser les transferts thermiques dans ce type de configurations à refroidissement liquide : approche diphasique utilisant la méthode Volume of Fluid (VoF) avec schéma de reconstruction de l'interface liquide/air (Poubeau et al.), ou encore l'approche MPS (Moving Particle Semi-implicit). Quelque soit la méthode, la résolution de la couche limite thermique pour ce type d'écoulements (bien que souvent laminaires) nécessite un maillage fin à la paroi, ce qui implique des coûts de calcul conséquents, incompatibles avec une démarche de conception et d'optimisation d'un système de refroidissement. Le développement de lois de paroi thermique adaptées à ces écoulements, permettant de s'affranchir d'un maillage raffiné en paroi (voire de la résolution de l'équation de l'énergie, si ces lois reposent uniquement sur des variables hydrodynamiques), constituerait donc un gain de temps précieux.

Le choix de cette application particulière est aussi en partie dicté par la disponibilité à IFPEN de simulations VoF à haute résolution pouvant servir à l'apprentissage. Cet aspect n'est pas négligeable, car l'identification et la récupération de données haute résolution constitue une tâche chronophage, et est un sujet de recherche en soi. Certains de ces cas ont déjà été réalisés et sont illustrés sur la Figure 3 : jet liquide impactant une paroi plane chauffée (Poubeau et al.), jet liquide impactant une paroi corruguée et chauffée (ANR MITIC), film liquide 2D sur plaque inclinée chauffée (thèse Q. Hoang, R116), jets impactant une tête de bobine de machine électrique (Poubeau & Vinay, publication en cours de rédaction). Ces cas présentent pour la plupart des variations de débit, température d'huile et/ou de paroi, ce qui constitue une base de données conséquente. D'autres simulations sont prévues dans le cadre des ANR MITIC et FILLMORE ainsi que dans la thèse d'A. Ingles (R116), notamment des films liquides 3D sur plaque inclinée ou des jets impactant une surface en rotation. Ces écoulements sont laminaires et présentent un nombre de Prandtl élevé (typiquement supérieur à 100), ce qui implique une couche limite thermique fine par rapport à la couche limite hydrodynamique. Les lois de paroi élaborées dans ce cadre ne pourront donc pas s'appliquer directement à d'autres types d'écoulement, mais la méthodologie pourra ultérieurement être étendue à des configurations turbulentes et/ou à bas nombre de Prandtl (moyennant a minima la modification des entrées des modèles et l'accès à une base de données d'apprentissage adéquate).

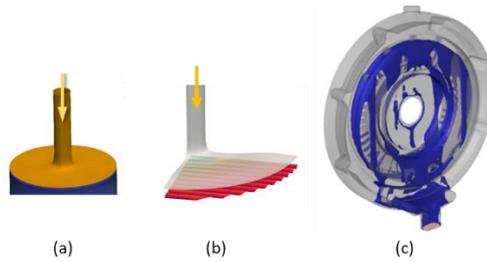


Figure 3- Exemples de simulations VoF haute-résolution réalisées à IFPEN : jet impactant une surface plane chauffée (a), jet impactant une surface corruguée chauffée (type bobinage machine électrique) (b), 5 jets impactant une tête de bobine de machine électrique (c).

La mise en place de la méthodologie se fera d'abord sur les cas-test les plus simples, de manière individuel (la base d'apprentissage d'une loi de paroi correspondant aux données haute-résolution d'un seul cas-test), ce qui est habituellement fait dans la littérature (Weatheritt et Sandberg 2017; Milani, Ling et Eaton 2019; Dupuy, Odier et Lapeyre 2023). L'objectif reste toutefois la formulation d'une fonction pariétale unique pouvant s'appliquer à la simulation de l'ensemble des cas-test, et donc à des cas industriels (par exemple de refroidissement d'une géométrie complexe par plusieurs jets d'huile, illustré en Figure 3c). La dernière phase de la thèse sera donc consacrée à évaluer et à améliorer la capacité de généralisation des lois de paroi formulées sur les cas-test.

En résumé, l'objectif de la thèse est d'élaborer une méthode de régression symbolique par apprentissage « off-line » de données VoF haute résolution (déjà disponibles pour la plupart à IFPEN), afin de prédire le flux de chaleur pariétal dans les simulations 3D du refroidissement liquide à haut nombre de Prandtl.

Stratégie de recherche

L'approche proposée pour cette thèse est structurée en 4 phases principales :

- Phase 1 – Mise en place d'une méthode GEP (12 mois)

Il s'agira d'identifier et de mettre en œuvre des outils de régression symbolique off-line adaptés. Ce travail reprendra les cas-test (convergent-divergent, jet impactant et marche descendante) et données haute-fidélité identifiées dans la thèse IFPEN d'E. Rondeaux et s'attachera à développer une méthode GEP pour formuler des relations analytiques pour le frottement pariétal de ces écoulements. On reprendra pour cela les mêmes hypothèses (choix d'entrées/sortie, normalisation, etc), ce qui permettra de se consacrer entièrement à la compréhension des GEP, au choix des modèle-tests et à la méthodologie d'apprentissage.

Les performances des modèles analytiques ainsi obtenus seront comparées à celles des réseaux de neurones existants, a priori sur les données haute-fidélité, et a posteriori en les implémentant dans le code IFPEN CONVERGE et en les appliquant à des simulations RANS. La précision des prédictions, ainsi que la régularité et la généralisabilité des nouveaux modèles analytiques seront évaluées.

Lors de cette phase, un enjeu sera d'identifier des outils de GEP pertinents (ex : PyGEP, geppy), et de les adapter à nos besoins spécifiques. A cet égard, une phase de développement sera probablement nécessaire, afin de répondre aux besoins identifiés. Les modèles résultants étant analytiques, leur implémentation dans CONVERGE devrait être aisée.

- Phase 2 – Extension de la méthode à la prédiction du flux de chaleur à la paroi (6 mois)

L'objectif est ensuite d'étendre la méthode GEP développée afin de prédire le flux de chaleur pariétal dans des situations de refroidissement liquide à haut nombre de Prandtl. L'apprentissage sera basé sur des données issues de simulations VoF à haute résolution, où notamment les transferts thermiques à la paroi sont entièrement résolus. Dans un premier temps, on constituera une base de données d'apprentissage par cas-test (ce qui donnera une ou plusieurs lois de paroi par cas-test). Un travail sur les entrées de l'algorithme est à prévoir : sélection des variables, adimensionnement/normalisation pour faciliter l'apprentissage et respecter les critères d'invariance galiléenne, choix du stencil (un stencil plus élevé comparé aux travaux de thèse précédents pourra être considéré (Lozano-Durán et Bae 2020)), filtrage des données, ajout de bruit, etc. Concernant l'étape d'apprentissage, en plus du réglage des hyperparamètres, il sera intéressant de mettre en œuvre certaines contraintes permettant une meilleure robustesse de la loi de paroi, comme assurer un champ de flux de chaleur lissé d'une maille à l'autre, par exemple par une fonction perte appropriée (Fiore et al. 2022).

Les lois de paroi analytiques ainsi formulées seront validées a priori, et a posteriori en les appliquant à la prédiction des flux de chaleur pariétaux dans des simulations VoF basse résolution avec CONVERGE. Ces dernières sont - contrairement aux simulations à haute résolution - représentatives de celles pouvant être utilisées dans des simulations visant à la compréhension et à la préconception de techniques de refroidissement. A noter que ces calculs seront à basse résolution uniquement pour la thermique, du fait des hauts nombres de Prandtl impliqués. L'hydrodynamique sera toujours résolu (aucune loi de paroi pour le frottement ne sera donc nécessaire). Les flux prédits seront aussi comparés à des résultats expérimentaux et de corrélations disponibles pour le type d'écoulements canoniques objet de cette phase. Les modèles obtenus seront également analysés et interprétés d'un point de vue physique mais aussi numérique (impact sur la robustesse du calcul).

- Phase 3 – Vers l'application à la simulation d'un cas industriel (12 mois)

L'objectif de cette phase est d'évaluer et améliorer la « capacité à généraliser » des fonctions pariétales précédemment formulées, c'est-à-dire à prédire des flux de chaleur pariétaux pertinents sur des écoulements non vus pendant l'entraînement. L'objectif visé serait de formuler un modèle unique, susceptible d'être appliqué avec confiance sur un cas d'écoulement complexe industriel. La généralisation des modèles CFD formulés par machine learning reste bien évidemment un sujet de recherche ouvert (Duraisamy 2021), qui pourrait en soi constituer le travail de plusieurs thèses. Il est néanmoins possible de mener certaines analyses permettant d'évaluer et d'expliquer la pertinence des prédictions d'un modèle sur un cas d'écoulement non appris. Des techniques de réduction dimensionnelle (PCA ou t-SNE) ont par le passé été appliquées dans un contexte similaire (Milani, Ling et Eaton 2019) sur les données d'apprentissage de différents écoulements, permettant ainsi la visualisation et la comparaison de l'espace des paramètres d'entrée de la loi de paroi. Ainsi, deux écoulements avec des champs de PCA ou t-SNE complètement disjoints signifierait qu'une loi de paroi apprise d'un écoulement ne pourrait pas fournir de prédiction satisfaisante sur l'autre écoulement, et inversement. Ces analyses pourraient aider à la mise au point d'une approche type « Mixture of Expert » (Lozano-Durán et Bae 2020), qui avait fait l'objet de premières investigations prometteuses dans la thèse précédente, et qui permettrait d'aboutir à un modèle « unique », combinant plusieurs modèles-experts.

Cette phase de travail pourra également bénéficier des calculs VoF haute-résolution réalisés sur une géométrie complexe (illustrés en Figure 3c) : soit comme nouvelle base d'apprentissage, soit comme cas d'application pour évaluer les lois de paroi formulées.

Selon les résultats, d'autres pistes de travail alternatives peuvent également être envisagées, comme la mise au point d'un indicateur de confiance (par quantification d'incertitude) sur la prédiction des modèles.

- Phase 4 – Finalisation (6 mois) : rédaction du manuscrit, et préparation de la soutenance de thèse.

Equipe d'encadrement

Directeur de thèse IFPEN : Christian Angelberger

Christian Angelberger est ingénieur Aéronautique et Espace de l'Université de Stuttgart (1993), et docteur (1997) puis HDR (2011) en mécanique des fluides de l'INP Toulouse, rattaché à ED579 de l'Université Paris-Saclay. Son domaine de recherche est la modélisation de la combustion turbulente, et le développement et l'application de modèles et de techniques de type LES, ainsi que la modélisation de couches limites turbulentes et réactives. Il a monté et coordonné de nombreux projets de recherche collaborative européens et ANR, et a organisé de 2008 à 2021 la conférence internationale LES4ICE/LES4ECE sur les applications de la LES aux moteurs à piston et électriques.

Il est actuellement Adjoint Scientifique de la Direction Mobilité & Systèmes d'IFPEN, en charge de la coordination de l'implication de la Direction dans la RF à IFPEN. Il a co-encadré 13 thèses de doctorat depuis 1999, et en a dirigé 7 en tant que Directeur de thèse pour ED579. La dernière en date a été celle d'Erwan Rondeaux, promue par Adèle Poubeau, et dont l'objectif a été l'exploration de la capacité de RN à formuler des lois de parois hors-équilibre. (soutenance prévue en décembre 2022). Il a publié 25 articles dans des revues à comité de lecture.

Co-Directrice de thèse LISN : Anne Sergent

Anne Sergent est maître de conférences HDR de Sorbonne Université. Son domaine de recherche concerne les transferts de chaleur turbulents (pour des aspects fondamentaux : convection de Rayleigh-Bénard, ou industriels : risque hydrogène [Saikali et al. 2020]), et notamment les interactions multi-échelles [Castillo et al., 2019] et l'effet de parois rugueuses [Belkadi et al., 2021]. Les approches numériques utilisées vont des simulations à haute performance à l'apprentissage automatique [Lucor et al., 2022] et simulation des grandes échelles [Sergent et al. 2003], avec un souci de confrontation aux expériences. Elle est responsable pour le LISN d'un projet ANR « Transferts turbulents et apprentissage automatique guidé par la physique ».

Promotrice de thèse IFPEN : Adèle Poubeau

Adèle Poubeau a reçu un doctorat en mécanique des fluides numérique de l'Université Toulouse III en 2015 (réalisé au CERFACS), et travaille depuis à IFPEN en tant qu'ingénieure de recherche en CFD au sein du département Systèmes de Combustion et Adéquation Carburants (R104). Elle a travaillé avec plusieurs codes de calculs (CONVERGE, Particleworks, AVBP), en mettant en œuvre différentes approches numériques (RANS/LES/MPS) et multi-physiques (diphase, transferts thermiques) pour la résolution d'écoulements turbulents inertes ou réactifs. Elle est impliquée dans la thématique de refroidissement liquide des composants de chaînes de traction, et à ce titre sera co-encadrante d'une thèse (début novembre 2022) sur la modélisation du refroidissement liquide des machines électriques par méthode VoF (promoteur G. Vinay). Les résultats de simulations issus de ces travaux seront directement utilisés par la présente thèse. Ses thèmes de recherche comprennent également l'utilisation d'algorithmes de machine learning pour la modélisation en CFD, ce qui l'a conduite à co-encadrer la thèse d'E. Rondeaux sur la prédiction du frottement pariétal par réseaux de neurones.

Autres encadrants :

- **Lionel Mathelin (LISN) – Co-encadrant LISN**

Lionel Mathelin est CR CNRS depuis 2003, affecté au LISN. Ses activités portent notamment sur la quantification d'incertitude dans les modèles numériques, la réduction de dimension, l'apprentissage statistique, l'assimilation de données, etc. Il a effectué un séjour au Département d'aéronautique et d'aérospatial du MIT (Boston, MA) en 2012-2013, et un séjour au Département de mathématiques appliquées de l'U. de l'état de Washington (Seattle, WA) en 2017-2018.

Il est coordinateur de plusieurs projets ANR et anime actuellement le thème Decipher du LISN centré sur le développement méthodologique pour l'utilisation efficace et robuste de données pour l'apprentissage de systèmes physiques complexes et leur contrôle.

- **Thibault Faney – Co-promoteur IFPEN**

Thibault Faney est docteur et ingénieur de recherche dans le département Mathématiques Appliquées (R1150R) depuis 2014, est spécialiste des algorithmes d'apprentissage automatique pour les problèmes de simulation issus de la physique. Il a co-encadré plusieurs thèses sur cette thématique avec diverses applications, allant de la thermodynamique à la mécanique des fluides. Ses compétences s'étendent également à l'analyse numérique d'équations aux dérivées partielles, au couplage numérique d'opérateurs et au transport réactif.

Références bibliographiques

Akolekar, H. D.; Weatheritt, J.; Hutchins, N.; Sandberg, R. D.; Laskowski, G.; Michelassi, V. (2018) Development and Use of Machine-Learnt Algebraic Reynolds Stress Models for Enhanced Prediction of Wake Mixing in Low-Pressure Turbines. In : Journal of Turbomachinery, vol. 141, n° 4. DOI: 10.1115/1.4041753.

Beetham, S.; Capecehatro, J. (2020) Formulating turbulence closures using sparse regression with embedded form invariance. In : Physical Review Fluids, vol. 5, n° 8. DOI: 10.1103/PhysRevFluids.5.084611.

Dupuy, D.; Odier, N.; Lapeyre, C. (2023) Data-driven wall modeling for turbulent separated flows. In : Journal of Computational Physics, vol. 487, p. 112173. DOI: 10.1016/j.jcp.2023.112173.

- Duraisamy, Karthik (2021) Perspectives on machine learning-augmented Reynolds-averaged and large eddy simulation models of turbulence. In : *Physical Review Fluids*, vol. 6, n° 5, p. 50504. DOI: 10.1103/PhysRevFluids.6.050504.
- Ferreira, C. (2001) Gene Expression Programming: A New Adaptive Algorithm for Solving Problems. In : *Complex Systems*, vol. 13, n° 2.
- Fiore, Matilde; Koloszar, Lilla; Fare, Clyde; Mendez, Miguel Alfonso; Duponcheel, Matthieu; Bartosiewicz, Yann (2022) Physics-constrained machine learning for thermal turbulence modelling at low Prandtl numbers. In : *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 194, p. 122998. DOI: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2022.122998.
- Lapeyre, Corentin J.; Misdariis, Antony; Cazard, Nicolas; Veynante, Denis; Poinso, Thierry (2019) Training convolutional neural networks to estimate turbulent sub-grid scale reaction rates. In : *Combustion and Flame*, vol. 203, p. 255–264. DOI: 10.1016/j.combustflame.2019.02.019.
- Ling, Julia; Kurzwski, Andrew; Templeton, Jeremy (2016) Reynolds averaged turbulence modelling using deep neural networks with embedded invariance. In : *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 807, p. 155–166. DOI: 10.1017/jfm.2016.615.
- Lozano-Durán, A.; Bae, H. J. (2020) Self-critical machine-learning wall-modeled LES for external aerodynamics. In : *Annual Research Briefs; Center for Turbulence Research: Stanford, CA, USA*, p. 197–210.
- Milani, Pedro M.; Ling, Julia; Eaton, John K. (2019) Generalization of Machine-Learned Turbulent Heat Flux Models Applied to Film Cooling Flows. In : *Journal of Turbomachinery*, vol. 142, n° 1. DOI: 10.1115/1.4045389.
- Nikolaou, Z. M.; Chrysostomou, C.; Minamoto, Y.; Vervisch, L. (2021) Evaluation of a Neural Network-Based Closure for the Unresolved Stresses in Turbulent Premixed V-Flames. In : *Flow, Turbulence and Combustion*, vol. 106, n° 2, p. 331–356. DOI: 10.1007/s10494-020-00170-w.
- Poubeau, A.; Vinay, G.; Kekelia, B.; Bennion, K. Conjugate Heat Transfer Simulations of High Prandtl Number Liquid Jets Impinging on a Flat Plate. In : submitted to *International Journal of Heat and Mass Transfer*.
- Rondeaux, E.; Poubeau, A.; Angelberger, C.; Zuniga, M. M.; Paoli, R.; Aubagnac-Karkar D. Exploring the potential and the practical usability of a Machine Learning approach for improving wall friction predictions of RANS wall functions in non-equilibrium turbulent flows. submitted to *Journal of Computational Physics*.
- Saïdi, I. B. H.; Schmelzer, M.; Cinnella, P.; Grasso, F. (2022) CFD-driven Symbolic Identification of Algebraic Reynolds-Stress Models. In : *Journal of Computational Physics*, vol. 457, n° 2, p. 111037. DOI: 10.1016/j.jcp.2022.111037.
- Schmelzer, Martin; Dwight, Richard P.; Cinnella, Paola (2020) Discovery of Algebraic Reynolds-Stress Models Using Sparse Symbolic Regression. In : *Flow, Turbulence and Combustion*, vol. 104, n° 2-3, p. 579–603. DOI: 10.1007/s10494-019-00089-x.
- Wang, Zhuo; Luo, Kun; Li, Dong; Tan, Junhua; Fan, Jianren (2018) Investigations of data-driven closure for subgrid-scale stress in large-eddy simulation. In : *Physics of Fluids*, vol. 30, n° 12, p. 125101. DOI: 10.1063/1.5054835.
- Weatheritt, J.; Sandberg, R. D. (2017) The development of algebraic stress models using a novel evolutionary algorithm. In : *International Journal of Heat and Fluid Flow*, vol. 68, p. 298–318. DOI: 10.1016/j.ijheatfluidflow.2017.09.017.
- Weatheritt, Jack; Sandberg, Richard (2016) A novel evolutionary algorithm applied to algebraic modifications of the RANS stress–strain relationship. In : *Journal of Computational Physics*, vol. 325, p. 22–37. DOI: 10.1016/j.jcp.2016.08.015.
- Zhao, Yaomin; Akolekar, Harshal D.; Weatheritt, Jack; Michelassi, Vittorio; Sandberg, Richard D. (2020) RANS turbulence model development using CFD-driven machine learning. In : *Journal of Computational Physics*, vol. 411, p. 109413. DOI: 10.1016/j.jcp.2020.109413.

Références bibliographiques concernant le directeur de thèse IFPEN

Rondeaux, E.; Poubeau, A.; Angelberger, C.; Zuniga, M. M.; Paoli, R.; Aubagnac-Karkar D. Exploring the potential and the practical usability of a Machine Learning approach for improving wall friction predictions of RANS wall functions in non-equilibrium turbulent flows. submitted to Journal of Computational Physics.

O. Benoit, K. Truffin, S. Jay, J. van Oijen, Y. Drouvin, T. Kayashima, P. Adomeit, C. Angelberger, "Development of a Large-Eddy Simulation Methodology for the Analysis of Cycle-to-Cycle Combustion Variability of a Lean Burn Engine", Flow Turbulence & Combustion, DOI10.1007/s10494-021-00278-7, 2021

A. Chabane, K. Truffin, C. Angelberger, "Direct numerical simulation of catalytic combustion in a meso-scale channel with non-planar walls", Comb. & Flame, Vol. 222, 2020

F. Tagliante, T. Poinot, L. Pickett, Pepiot, P. Pepiot, LM. Malbec, G. Bruneaux, C. Angelberger, "A conceptual model of the flame stabilization mechanisms for a lifted Diesel-type flame based on direct numerical simulation and experiments", Comb. & Flame, Vol. 201, 2019

N. lafrate, A. Robert, J-B. Michel; O. Colin, B. Cuenot, C. Angelberger, "LES study on mixing and combustion in a Direct Injection Spark Ignition engine",. OGST, 73 (32), 2018

A.M. Chabane, K. Truffin, A. Nicolle, F. Nicoud, O. Cabrit, C. Angelberger, "Direct numerical simulation of combustion near a carbonaceous surface in a quiescent flow", Int. J. Heat and Mass Transfer, Vol. 84, Pages 130–148, May 2015

Moureau V., Lartigue G., Sommerer Y., Angelberger C., Colin O; & Poinot T., "Numerical methods for unsteady compressible multi-component reacting flows on fixed and moving grids", J. of Computational Physics 202 (2005), 710-736

Références bibliographiques concernant la co-directrice de thèse LISN

D. Lucor, A. Agrawal and A. Sergent, "Simple computational strategies for more effective physics-informed neural networks modeling of turbulent natural convection", J Comp. Phys., 456, 111022, 2022

M. Belkadi, A. Sergent, Y. Fraigneau and B. Podvin, "On the role of roughness valleys in turbulent Rayleigh-Bénard convection", J Fluid Mech., t. 923, p. A-6, 2021,

E. Saikali, A. Sergent, Ya. Wang, P. Le Quéré, G. Bernard-Michel, C. Tenaud, "A well-resolved numerical study of a turbulent buoyant helium jet in a highly-confined two-vented enclosure ", I. J. Heat & Mass Trans., n°163, p. 120470, 2020.

A. Castillo-Castellanos , A. Sergent , B. Podvin et M. Rossi , « Cessation and reversals of large-scale structures in square Rayleigh-Bénard cells », J Fluid Mech., t. 877, p. 922-954, 2019

A. Sergent , P. Joubert et P. Le Quéré , « Development of a local subgrid diffusivity model for large-eddy simulation of buoyancy-driven flows: Application to a square differentially heated cavity », Numer. Heat Tr. A- Appl., t. 44, n° 8, p. 789–810, 2003.

Références bibliographiques concernant la promotrice IFPEN

Rondeaux, E.; Poubeau, A.; Angelberger, C.; Zuniga, M. M.; Paoli, R.; Aubagnac-Karkar D. Exploring the potential and the practical usability of a Machine Learning approach for improving wall friction predictions of RANS wall functions in non-equilibrium turbulent flows. submitted to Journal of Computational Physics.

Poubeau A, Vinay G, Kekelia B, Bennion K. Conjugate Heat Transfer Simulations of High Prandtl Number Liquid Jets Impinging on a Flat Plate. International Journal of Heat and Mass Transfer, Under review.

Zhang Y, Vinay G, Poubeau A, Hoang, V. Q, (2022) Development of a hybrid Lagrange-Euler transition model for the film formation and dynamics formed by an impinging liquid spray. Computers & Fluids, Under review.

Références bibliographiques concernant les autres encadrants

Lionel Mathelin

Mathelin L., Hosseinkhan Boucher R., Saibi A., & Semeraro O., A principled learning strategy for chaotic dynamical systems, SIAM Mathematics of Data Science 2022, San Diego, CA, USA, Sep. 26 - 30, 2022.

Erichson N.B., Mathelin L., Kutz J.N. & Brunton S.L., Randomized Dynamic Mode Decomposition, SIAM Journal on Applied Dynamical Systems (SIADS), 18(4), p. 1867-1891, 2019.

Bucci M.A., Semeraro O., Allauzen A., Wisniewski G., Cordier L. & Mathelin L., Control of chaotic systems by deep reinforcement learning, Proceedings of the Royal Society A, 475: 20190351, 2019. Also available on arXiv 1906.07672.

Mathelin L., Kasper K. & Abou-Kandil H., Observable dictionary learning for high-dimensional statistical inference, Archives of Computational Methods in Engineering, 25(1), p. 103-120, 2017. Available on ArXiv: <https://arxiv.org/abs/1702.05289>.

Mathelin L., Quantification of uncertainty from high-dimensional scattered data, Int. J. Uncertainty Quantification, 4(3), p. 243-271, 2014.

Thibault Faney

Jingang Qu, Thibault Faney, Jean-Charles de Hemptinne, Soleiman Yousef, Patrick Gallinari, PTFash: A vectorized and parallel deep learning framework for two-phase flash calculation, Fuel, Volume 331, Part 1, 2023, <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2022.125603>.

N. Collard, T. Faney, P.A. Teboul, P. Bachaud, M.C. Cacas-Stentz, C. Gout, Machine learning model predicting hydrothermal dolomitisation for future coupling of basin modelling and geochemical simulations, Chemical Geology, Volume 637, 2023, 121676, <https://doi.org/10.1016/j.chemgeo.2023.121676>.

Xi Chen, Cédric Mehl, Thibault Faney, and Florent Di Meglio, Clustering-Enhanced Deep Learning Method for Computation of Full Detailed Thermochemical States via Solver-Based Adaptive Sampling, Energy & Fuels, 2023, DOI: 10.1021/acs.energyfuels.3c01955

Matthieu Nastorg, Michele-Alessandro Bucci, Thibault Faney, Jean-Marc Gratien, Guillaume Charpiat, Marc Schoenauer, An Implicit GNN Solver for Poisson-like problems, submitted to neural Networks, 2023, <https://arxiv.org/abs/2302.10891>

Antoine Lechevallier, Sylvain Desroziers, Thibault Faney, Eric Flauraud, Frédéric Nataf, Hybrid Newton method for the acceleration of well event handling in the simulation of CO2 storage using supervised learning, to be submitted, 2023, <https://cnrs.hal.science/LJLL/hal-04085358v2>