

# Proposition de sujet de thèse

Ludovic Andrieux

16 septembre 2025

Modélisation des ballottements d'ergols dans les réservoirs de véhicule spatiaux en conditions de micro-gravité ou sous faible facteur de charge par apprentissage automatique informé par la physique.

## Mots-clés

Ballottements d'ergols, réservoirs spatiaux, CFD, modèles pendulaires, PINN, simulation GNC, ECSS/SMP

## Profil et compétences recherchées

- Diplôme d'ingénieur ou Master 2 en aérospatial ou data science appliquée.
- Compétences en mécanique des fluides, simulation numérique (CFD), méthodes de modélisation réduite (modèle masse-ressort, pendule).
- Intérêt ou expérience en machine learning physique (PINN, PIML and SciML).
- Maîtrise du langage C++ et/ou Python, familiarité avec les standards ECSS/SMP appréciée.

## Présentation du projet doctoral

Les réseaux de neurones informés par la physique, ou Physics-Informed Neural Networks (PINNs) constituent un nouveau paradigme de l'apprentissage profond, capable de résoudre à la fois des problèmes directs et inverses pour des Equations aux Dérivées Partielles (EDPs) non linéaires [16]. En intégrant des contraintes physiques sous-jacentes dans l'architecture d'un réseau de neurones à propagation avant, ou Feedforward Neural Network (FFNN), les PINNs peuvent être entraînés comme modèle de substitution avec peu ou pas de données étiquetées pour l'inférence de solutions d'EDP [5]. Dans la littérature actuelle, l'implémentation des PINNs est envisagée à la fois comme complément et comme alternative potentielle aux techniques numériques existantes, dans un large éventail de domaines de recherche en sciences et en ingénierie [13, 2, 3]. En outre, certains designs prennent nativement en compte la gestion des incertitudes, ou Uncertainty Quantification (UQ) [17, 18] ce qui fait des PINNs un outil intéressant en tant que modèle de substitution en ingénierie, où la robustesse des solutions fournies par un code de calcul constitue un sujet important.

## Contexte

Le comportement des ergols dans les réservoirs de lanceurs spatiaux a un impact direct sur la stabilité du vol, la performance des algorithmes de contrôle de vol, et la réussite de la mission. Lors des phases propulsées, les effets dynamiques des masses ballottantes peuvent être modélisés efficacement à l’aide de pendules équivalents (voir par exemple [10]), mais ces modèles deviennent limités dès que le régime d’accélération devient trop faible (et même inopérant en micro-gravité), le mouvement des masses ballottantes trop important, ou encore le comportement diphasique dominant.

## Problématique

Dans un contexte de simulation numérique, notamment dans un cadre de validation et de qualification du contrôle de vol, il est essentiel de disposer de modèles à la fois précis, rapides et adaptables, capables de représenter les phénomènes physiques à différentes échelles et dans différents contextes de vol. Les approches actuelles peinent à fournir un cadre générique, rapide et fiable pour modéliser les ballottements d’ergols dans toutes les phases de vol. La CFD offre des résultats précis mais coûteux, les modèles réduits (typiquement les modèles de pendules) sont efficaces lors des phases propulsées mais sous des conditions d’angles de ballottements relativement faibles (excluant les phases de retournement de lanceur réutilisable), tandis que les réseaux de neurones informés par la physique (PINN) offrent un compromis prometteur entre précision et coût.

## Objectifs

Cette thèse vise à développer des modèles réduits pour les ballottements d’ergols dans les réservoirs de véhicules spatiaux en micro-gravité et sous faible accélération à l’aide de Physics-Informed Machine Learning (PIML) puisqu’aucun standard n’existe.

Les objectifs principaux sont :

1. Développer une architecture logicielle C++ modulaire :
  - Modèles CFD (pour la constitution du jeu de données et les simulations boucle fermée end-to-end),
  - Intégration de modèles PINN/PIML,
  - Interopérabilité avec les standards ECSS/SMP et les modèles pendulaires et masse-ressort existants.
2. Explorer, comparer et synthétiser les méthodes de modélisation des ballottements :
  - Approche analytique (petits angles, linéaires, pendules),
  - Simulation numérique CFD (gaz compressible et liquide avec interface libre, évaporation et transfert thermique, extraction d’efforts sur les parois),
  - Réseaux de neurones informés par la physique (PINN) et opérateurs neuronaux (NO et PINO).
  - Incertitude et robustesse des modèles réduits au travers du MC-dropout, méthode d’ensembles, B-PINN, ou décomposition de domaine.
3. Proposer une stratégie de sélection de modèle selon :
  - Le niveau de fidélité requis,
  - Les contraintes de simulation,
  - La phase de vol et l’environnement.

# Approche méthodologique

La thèse s'appuiera sur une approche structurée en trois volets :

1. Les modélisations physiques et numériques du problème de mécanique des fluides, dans le but de définir des cas tests (accélération à faible facteur de charge et micro-gravité) et les mettre en œuvre pour constituer le jeu de données pour les modèles neuronaux.

Une approche incrémentale est envisagée pour enrichir la modélisation au fur et à mesure d'une montée en complexité des phénomènes à prendre en compte lors de l'implémentation :

- système gaz-liquide incompressible et interface libre,
  - compressibilité du gaz et représentativité des sources (représsurisation et écoulement sortant),
  - transfert thermique et changement de phase.
2. Le développement de modèles complets (CFD) et réduits (PINN ou PIML) selon les standards ECSS/SMP pour une intégration dans un environnement industriel qui assurent une bonne portabilité dans différents environnements de simulation.
  3. L'évaluation des performances sur le compromis précision (avec quantification des incertitudes) / rapidité à l'aide d'intégration des modèles dans un simulateur numérique boucle fermée et établissement de recommandations pour le choix de modèle selon l'usage.

## Démarche envisagée

Période	Étape
Semestre 1	Revue bibliographique, construction des cas tests et formulation mathématique du problème
Semestre 2	Simulations CFD, extraction de données, premiers prototypes PINN
Semestre 3	Développement de la librairie modulaire, intégration de modèles PINN et CFD
Semestre 4	Évaluation, étude comparative, stratégie de sélection de modèle
Semestre 5	Intégration dans simulateur de référence tout numérique à sélectionner, étude de performance sur simulation complète
Semestre 6	Finalisation, soutenance, dépôt logiciel si applicable

TABLE 1 – Planning prévisionnel des étapes du projet

## Apports scientifiques et industriels

Des outils d'évaluation à la fois rapides et réalistes de modélisation d'ergols dans les réservoirs de véhicule spatiaux sont attendus.

Cette approche synthétique a pour objectif de mieux cerner les domaines de validité, les interactions et les complémentarités entre modèles analytiques, simulations CFD et techniques de Machine Learning

Plus spécifiquement, un apport direct est attendu en ce qui concerne la modélisation du phénomène physique. Typiquement :

- Une modélisation réduite des ballottements en micro-gravité : où l'état de l'art ne fournit pas de modèle réduit qui soit utilisable dans un environnement couplé avec des algorithmes GNC, contrairement aux phases sous accélération.
- Des modèles de ballottements embarquable : permettre l'intégration dans un code de vol de modèles précis pour le pilotage et la simulation en temps réel.
- L'initialisation des modèles pendulaires après une phase orbitale : où l'état actuel des connaissances nous pousse à tirer aléatoirement cet état initial. On cherche alors à réduire ces conservatismes.
- La mise en œuvre de modèles lors des phases de retournement des lanceurs réutilisables : où la dynamique du lanceur peut avoir un impact sur celle des ballottements qui fait sortir du domaine d'applicabilité des modèles pendulaires.

Un apport direct sur le déroulement d'un projet de développement de lanceur est aussi attendu, avec la capacité de simuler à l'aide de modèles ML des cas complets qui sont généralement simulés par couplage CFD tard dans le déroulement du projet.

Enfin, au travers de l'intégration dans un environnement industriel, on estime un gain opérationnel conséquent.

## Innovation

Bien que les PINNs aient été appliqués avec succès aux écoulements à surface libre terrestres et à des bancs d'essai fluides diphasiques génériques, aucun travail publié ne traite du ballottement des ergols dans les réservoirs en micro-gravité ou lors des manœuvres en faible gravité des lanceurs, en incluant la physique cryogénique diphasique compressible ainsi que les effets thermiques/de changement de phase, avec des modèles de substitution prêts à être intégrés aux contrôleurs et conformes aux normes ECSS/SMP. Les travaux existants liés à l'aérospatial sont soit non informés par la physique (utilisant uniquement l'apprentissage profond, moins explicables, et sans la robustesse requise par les processus de V&V), soit limités à des problèmes simplifiés (excluant la cryogénie et les conditions spatiales telles que la microgravité).

Cette thèse présente une combinaison unique de technique et de cas d'utilisation :

- Technique : Fait progresser l'état de l'art PINN/PINO pour la capture d'EDPs non linéaires multiphasiques décrivant la physique des ergols embarqués (interactions gaz-liquide compressibles, dynamique de surface libre, transport thermique et changement de phase, géométrie des réservoirs et conditions aux limites), avec des propriétés de différentiabilité exploitables pour le Model Predictive Control (MPC).
- Cas d'utilisation : Réservoirs de véhicules spatiaux pendant les phases de micro-gravité, de renversement ou de transition, pour lesquels aucun modèle analytique ou réduit n'est actuellement opérationnel.

## Degré de maturité

État de l'art : Les PINNs sont à un TRL de 2–3 en mécanique des fluides ; validés pour des PINNs plus simples, pour des écoulements diphasiques non cryogéniques, et dans des domaines non liés à l'aérospatial.

Lacune : Aucune application aux réservoirs aérospatiaux avec thermodynamique cryogénique, aucune intégration dans les environnements de simulation industrielle, aucune

insertion en boucle de contrôle.

Adéquation avec une thèse :

- Les modèles CFD et analytiques pour la génération de jeux de données sont disponibles auprès de l'ESA/CNES/ONERA.
- Les chaînes d'outils PINN/PINO (PyTorch/TensorFlow, JAX, DeepXDE) sont suffisamment matures pour un prototypage immédiat.
- Les spécifications d'interface ECSS/SMP sont publiques et peuvent être mises en œuvre en parallèle du développement des modèles.

Un arc de recherche de 3–4 ans permet d'approfondir la complexité physique (changement de phase, ébullition), d'améliorer la stabilité de l'apprentissage des modèles de substitution et d'effectuer une validation en boucle fermée.

**TRL cible après la thèse : 4–5** — modèle PINN validé dans une simulation de bout en bout avec logiciel représentatif en boucle fermée, prêt pour une extension vers des bancs d'essai représentatifs du vol.

## Bibliographie indicative

- [1] Julyan ARBEL et al. *A Primer on Bayesian Neural Networks : Review and Debates*. 28 sept. 2023. DOI : [10.48550/arXiv.2309.16314](https://doi.org/10.48550/arXiv.2309.16314). arXiv : [2309.16314](https://arxiv.org/abs/2309.16314) [stat]. URL : <http://arxiv.org/abs/2309.16314> (visité le 08/09/2025). Prépubl.
- [2] Stefano BUOSO, Thomas JOYCE et Sebastian KOZERKE. « Personalising Left-Ventricular Biophysical Models of the Heart Using Parametric Physics-Informed Neural Networks ». In : *Medical Image Analysis* 71 (juill. 2021), p. 102066. ISSN : 13618415. DOI : [10.1016/j.media.2021.102066](https://doi.org/10.1016/j.media.2021.102066). URL : <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S1361841521001122> (visité le 04/04/2025).
- [3] Shengze CAI et al. « Physics-Informed Neural Networks for Heat Transfer Problems ». In : *Journal of Heat Transfer* 143.6 (1<sup>er</sup> juin 2021), p. 060801. ISSN : 0022-1481, 1528-8943. DOI : [10.1115/1.4050542](https://doi.org/10.1115/1.4050542). URL : <https://asmedigitalcollection.asme.org/heattransfer/article/143/6/060801/1104439/Physics-Informed-Neural-Networks-for-Heat-Transfer> (visité le 04/04/2025).
- [4] Olivier CLAESSEN, Yuliya SHAPOVALOVA et Tom HESKES. « Heteroscedastic Uncertainty Quantification in Physics-Informed Neural Networks ». In : (2024).
- [5] Salvatore CUOMO et al. « Scientific Machine Learning Through Physics-Informed Neural Networks : Where We Are and What's Next ». In : *Journal of Scientific Computing* 92.3 (26 juill. 2022), p. 88. ISSN : 1573-7691. DOI : [10.1007/s10915-022-01939-z](https://doi.org/10.1007/s10915-022-01939-z). URL : <https://doi.org/10.1007/s10915-022-01939-z> (visité le 06/05/2025).
- [6] Mario DE FLORIO et al. « Quantification of Total Uncertainty in the Physics-Informed Reconstruction of CVSim-6 Physiology ». In : *Philosophical Transactions of the Royal Society A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences* 383.2292 (13 mars 2025), p. 20240221. DOI : [10.1098/rsta.2024.0221](https://doi.org/10.1098/rsta.2024.0221). URL : <https://royalsocietypublishing.org/doi/10.1098/rsta.2024.0221> (visité le 24/08/2025).

- [7] Júlia Vicens FIGUERES et al. *\$PINN - a Domain Decomposition Method for Bayesian Physics-Informed Neural Networks*. 1<sup>er</sup> mai 2025. DOI : [10.48550/arXiv.2504.19013](https://doi.org/10.48550/arXiv.2504.19013). arXiv : [2504.19013 \[cs\]](https://arxiv.org/abs/2504.19013). URL : <http://arxiv.org/abs/2504.19013> (visité le 11/09/2025). Prépubl.
- [8] Olga GRAF et al. *Error-Aware B-PINNs : Improving Uncertainty Quantification in Bayesian Physics-Informed Neural Networks*. 14 déc. 2022. DOI : [10.48550/arXiv.2212.06965](https://doi.org/10.48550/arXiv.2212.06965). arXiv : [2212.06965 \[cs\]](https://arxiv.org/abs/2212.06965). URL : <http://arxiv.org/abs/2212.06965> (visité le 24/08/2025). Prépubl.
- [9] Wenchong HE et al. *A Survey on Uncertainty Quantification Methods for Deep Learning*. 20 jan. 2025. DOI : [10.48550/arXiv.2302.13425](https://doi.org/10.48550/arXiv.2302.13425). arXiv : [2302.13425 \[cs\]](https://arxiv.org/abs/2302.13425). URL : <http://arxiv.org/abs/2302.13425> (visité le 11/09/2025). Prépubl.
- [10] Raouf A. IBRAHIM. *Liquid Sloshing Dynamics : Theory and Applications*. Cambridge New York Melbourne Madrid Cape Town Singapore São Paulo : Cambridge University Press, 2005. 1 p. ISBN : 978-0-521-83885-6 978-0-511-53665-6. DOI : [10.1017/CB09780511536656](https://doi.org/10.1017/CB09780511536656).
- [11] Hailong LIU et al. « Flow Reconstruction with Uncertainty Quantification from Noisy Measurements Based on Bayesian Physics-Informed Neural Networks ». In : *Physics of Fluids* 36.11 (1<sup>er</sup> nov. 2024), p. 117104. ISSN : 1070-6631. DOI : [10.1063/5.0231684](https://doi.org/10.1063/5.0231684). URL : <https://doi.org/10.1063/5.0231684> (visité le 24/08/2025).
- [12] Xihai LUO et al. *A Machine Learning-based Characterization Framework for Parametric Representation of Nonlinear Sloshing*. 25 jan. 2022. DOI : [10.48550/arXiv.2201.11663](https://doi.org/10.48550/arXiv.2201.11663). arXiv : [2201.11663 \[cs\]](https://arxiv.org/abs/2201.11663). URL : <http://arxiv.org/abs/2201.11663> (visité le 04/04/2025). Prépubl.
- [13] Zhiping MAO, Ameya D. JAGTAP et George Em KARNIADAKIS. « Physics-Informed Neural Networks for High-Speed Flows ». In : *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 360 (1<sup>er</sup> mars 2020), p. 112789. ISSN : 0045-7825. DOI : [10.1016/j.cma.2019.112789](https://doi.org/10.1016/j.cma.2019.112789). URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0045782519306814> (visité le 06/05/2025).
- [14] Apostolos F. PSAROS et al. « Uncertainty Quantification in Scientific Machine Learning : Methods, Metrics, and Comparisons ». In : *Journal of Computational Physics* 477 (15 mars 2023), p. 111902. ISSN : 0021-9991. DOI : [10.1016/j.jcp.2022.111902](https://doi.org/10.1016/j.jcp.2022.111902). URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999122009652> (visité le 24/08/2025).
- [15] Ashkan RAFIEE, Fabrizio PISTANI et Krish THIAGARAJAN. « Study of Liquid Sloshing : Numerical and Experimental Approach ». In : *Computational Mechanics* 47.1 (jan. 2011), p. 65-75. ISSN : 0178-7675, 1432-0924. DOI : [10.1007/s00466-010-0529-6](https://doi.org/10.1007/s00466-010-0529-6). URL : <http://link.springer.com/10.1007/s00466-010-0529-6> (visité le 07/04/2025).
- [16] M. RAISSI, P. PERDIKARIS et G. E. KARNIADAKIS. « Physics-Informed Neural Networks : A Deep Learning Framework for Solving Forward and Inverse Problems Involving Nonlinear Partial Differential Equations ». In : *Journal of Computational Physics* 378 (1<sup>er</sup> fév. 2019), p. 686-707. ISSN : 0021-9991. DOI : [10.1016/j.jcp.2018.10.045](https://doi.org/10.1016/j.jcp.2018.10.045). URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999118307125> (visité le 17/04/2024).

- [17] Liu YANG, Xuhui MENG et George Em KARNIADAKIS. « B-PINNs : Bayesian Physics-Informed Neural Networks for Forward and Inverse PDE Problems with Noisy Data ». In : *Journal of Computational Physics* 425 (jan. 2021), p. 109913. ISSN : 00219991. DOI : [10.1016/j.jcp.2020.109913](https://doi.org/10.1016/j.jcp.2020.109913). arXiv : [2003.06097 \[stat\]](https://arxiv.org/abs/2003.06097). URL : <http://arxiv.org/abs/2003.06097> (visité le 11/09/2025).
- [18] Dongkun ZHANG et al. « Quantifying Total Uncertainty in Physics-Informed Neural Networks for Solving Forward and Inverse Stochastic Problems ». In : *arXiv.org* (21 sept. 2018). DOI : [10.1016/j.jcp.2019.07.048](https://doi.org/10.1016/j.jcp.2019.07.048). URL : <https://arxiv.org/abs/1809.08327v1> (visité le 24/08/2025).

## Collaborations envisagées

ESA, CNES, INRIA, ONERA

## Laboratoire d'accueil

TBD

## Acronymes

**B-PINN** Bayesian Physics-Informed Neural Network. 2

**CFD** Computational Fluid Dynamics. 1–5

**CNES** Centre National d'Études Spatiales. 5, 7

**ECSS** European Cooperation for Space Standardization. 1–5

**EDP** Equation aux Dérivées Partielles. 1

**EDPs** Equations aux Dérivées Partielles. 4

**ESA** European Space Agency. 5, 7

**FFNN** Feedforward Neural Network. 1

**GNC** Guidance, Navigation and Control. 1, 4

**INRIA** Institut National de Recherche en Informatique et en Automatique. 7

**ML** Machine Learning. 3, 4

**MPC** Model Predictive Control. 4

**NO** Neural Operator. 2

**ONERA** Office National d'Études et de Recherches Aéronautiques. 5, 7

**PIML** Physics-Informed Machine Learning. 1–3

**PINN** Physics-Informed Neural Network. 1–5

**PINO** Physics-Informed Neural Operator. 2, 4, 5

**SciML** Scientific Machine Learning. 1

**SMP** Simulation Model Portability. 1–5

**TRL** Technology Readiness Level. 4

**UQ** Uncertainty Quantification. 1

**V&V** Verification and Validation. 4