

Postdoctorat de 2 ans à la Maison de la Simulation (CEA/Paris-Saclay)

Développement de modèles pour simuler le fonctionnement d'un électrolyseur alcalin (Collaboration DAWN CEA/TotalEnergies)

Contexte

TotalEnergies a pour objectif de devenir un pionnier de la production d'H₂ vert et donc l'un des acteurs clés du nouvel écosystème de l'hydrogène. L'hydrogène vert est produit à partir d'un électrolyseur alimenté par une source d'énergie renouvelable. Le cœur des électrolyseurs est constitué de cellules électrochimiques composées d'une cathode et d'une anode séparées par une membrane conductrice ionique. Sous polarisation l'eau est dissociée en hydrogène à la cathode (réaction HER) et en oxygène à l'anode (OER), la membrane permet le non mélange des gaz. Les cellules sont associées en série sous forme de stacks dont la puissance utilitaire sera de 1 à 10MW pour les futures applications industrielles.

Deux technologies d'électrolyseur sont considérées comme matures, à savoir les électrolyseurs alcalins et PEM (proton exchange membrane). Dans ce contexte, le développement d'un jumeau numérique des électrolyseurs est essentiel pour obtenir un avantage concurrentiel en termes de conception et d'exploitation des actifs H₂ verts, car il nous aidera à prédire le comportement des électrolyseurs.

Pour être performant, ce modèle numérique d'électrolyseur doit englober deux aspects différents :

- Une approche basée sur les données qui consiste à utiliser l'intelligence artificielle et des ensembles de données. Ces données seront générées dans le cadre d'études réalisées en dehors de ce cadre de collaboration, typiquement via les bancs d'essai des cellules et les actifs de l'entreprise pour prédire certains comportements "macro" (baisse de performance par exemple).
- Modèles physiques : Les différents aspects physiques en jeu dans un tel problème sont dominés par les réactions chimiques produisant de l'hydrogène et son interaction avec le fluide environnant. En particulier, la formation et la propagation de bulles, qui ont un impact sur la performance globale de la cellule elle-même, est un aspect qui n'est pas encore bien compris. La compréhension de ce phénomène physique complexe nécessite une approche multiphysique et multi-échelle, que nous visons à développer et à étudier dans ce projet. Les données générées par cet effort pourront ensuite être traitées avec des techniques d'intelligence artificielle pour la prédiction généraliste.

Un tel outil nous permettra également d'effectuer une maintenance prédictive et d'optimiser les opérations. Il permettra aussi l'émergence de nouveaux sujets de R&D favorisant l'amélioration des performances des électrolyseurs alcalins.

Le projet DAWN va reposer sur l'utilisation de deux outils de simulations de fluides multiphasiques :

- canoP, une bibliothèque pour développer des applications de CFD multiphasiques avec raffinement de maillage adaptatif (Druil 2017, Chen 2019, Padioleau 2020).
- Flower.jl, un code de CFD en Julia qui permet d'étudier localement les bulles et les interfaces triphasiques entre gaz, liquide et paroi (Quirós-Rodríguez 2022, Fullana 2023).

Mission

Dans un premier temps, la mission concerne le développement d'une application pour simuler le processus d'électrolyse avec la bibliothèque canoP afin d'étudier à grande échelle la distribution des courants du potentiel et de la température dans l'électrolyseur alcalin. CanoP résout des équations de conservations avec termes sources sur une grille avec raffinement de maillage adaptatif. La construction d'une application avec canoP nécessitera les éléments suivants :

- Adaptation des structures de données : une nouvelle version de la bibliothèque qui permettra une adaptation versatile des structures de données est en cours de finalisation. Des champs supplémentaires e.g. pour traiter des phases dispersées telles qu'un ensemble de bulle seront disponibles.
- Implémentation des flux et des termes sources nécessaires au modèle électrochimique
- Exploration et implémentation des fonctions indicatrices pour les stratégies de raffinement/dé-raffinement pertinentes pour le modèle

- Dans un couplage avec l'application Flower, notamment par la proposition de lois simples ou de modèles réduits compatibles avec les modèles macroscopiques qui seront implémentés dans CanoP. Enfin, la mission comprend également la rédaction des livrables (comptes-rendus, rapports et documentations) ainsi que la préparation et la soumission d'articles dans des revues scientifiques à comité de lecture.

Compétences

Vous possédez une thèse en physique/chimie numérique et :

- Vous avez une bonne maîtrise d'un ou plusieurs langages de programmation (C, Fortran, python, Julia).
- Vous maîtrisez les outils de base associés au développement collaboratif (git, github, etc.).
- Vous êtes autonome et vous souhaitez vous intégrer à une équipe de travail pluri-disciplinaire en lien avec le monde de l'industrie.
- Vous maîtrisez l'anglais technique (écrit et oral).
- Vous vous intéressez aux enjeux de la transition énergétique.

Salaire et avantages

Le CEA propose des salaires compétitifs en fonction de vos diplômes et de votre expérience. Ce poste présente plusieurs avantages :

- La possibilité de s'intégrer dans des collaborations existantes avec d'autres laboratoires en France et à l'étranger,
- De nombreuses opportunités de voyager à l'international (échanges, conférences, ateliers et plus encore),
- Jusqu'à 3 jours de télétravail par semaine,
- Le remboursement des abonnements aux transports publics à hauteur de 75% et un réseau de transport gratuit dans toute l'île-de-France,
- Une complémentaire intéressante et plusieurs plans d'épargne entreprise,
- 5 semaines de congés payés et 4 semaines de RTT par an.

Informations et contact

Les demandes de renseignement et candidatures sont à transmettre à Pascal TREMBLIN (pascal.tremblin@cea.fr) et Taraneh SAYADI (taraneh.sayadi@sorbonne-universite.fr) par e-mail.

Postdoctorat de 2 ans à la Maison de la Simulation (CEA/Paris-Saclay)

Développement de modèles pour simuler le fonctionnement d'un électrolyseur alcalin (Collaboration DAWN CEA/TotalEnergies)

Contexte

TotalEnergies a pour objectif de devenir un pionnier de la production d'H₂ vert et donc l'un des acteurs clés du nouvel écosystème de l'hydrogène. L'hydrogène vert est produit à partir d'un électrolyseur alimenté par une source d'énergie renouvelable. Le cœur des électrolyseurs est constitué de cellules électrochimiques composées d'une cathode et d'une anode séparées par une membrane conductrice ionique. Sous polarisation l'eau est dissociée en hydrogène à la cathode (réaction HER) et en oxygène à l'anode (OER), la membrane permet le non mélange des gaz. Les cellules sont associées en série sous forme de stacks dont la puissance utilitaire sera de 1 à 10MW pour les futures applications industrielles.

Deux technologies d'électrolyseur sont considérées comme matures, à savoir les électrolyseurs alcalins et PEM (proton exchange membrane). Dans ce contexte, le développement d'un jumeau numérique des électrolyseurs est essentiel pour obtenir un avantage concurrentiel en termes de conception et d'exploitation des actifs H₂ verts, car il nous aidera à prédire le comportement des électrolyseurs.

Pour être performant, ce modèle numérique d'électrolyseur doit englober deux aspects différents :

- Une approche basée sur les données qui consiste à utiliser l'intelligence artificielle et des ensembles de données. Ces données seront générées dans le cadre d'études réalisées en dehors de ce cadre de collaboration, typiquement via les bancs d'essai des cellules et les actifs de l'entreprise pour prédire certains comportements "macro" (baisse de performance par exemple).
- Modèles physiques : Les différents aspects physiques en jeu dans un tel problème sont dominés par les réactions chimiques produisant de l'hydrogène et son interaction avec le fluide environnant. En particulier, la formation et la propagation de bulles, qui ont un impact sur la performance globale de la cellule elle-même, est un aspect qui n'est pas encore bien compris. La compréhension de ce phénomène physique complexe nécessite une approche multiphysique et multi-échelle, que nous visons à développer et à étudier dans ce projet. Les données générées par cet effort pourront ensuite être traitées avec des techniques d'intelligence artificielle pour la prédiction généraliste.

Un tel outil nous permettra également d'effectuer une maintenance prédictive et d'optimiser les opérations. Il permettra aussi l'émergence de nouveaux sujets de R&D favorisant l'amélioration des performances des électrolyseurs alcalins.

Le projet DAWN va reposer sur l'utilisation de deux outils de simulations de fluides multiphasiques :

- canoP, une bibliothèque pour développer des applications de CFD multiphasiques avec raffinement de maillage adaptatif (Drui 2017, Chen 2019, Padioleau 2020).
- Flower.jl, un code de CFD en Julia qui permet d'étudier localement les bulles et les interfaces triphasiques entre gaz, liquide et paroi (Quirós-Rodríguez 2022, Fullana 2023).

Mission

Dans un premier temps, la mission concerne le développement de l'application CFD Flower.jl avec pour objectif premier d'étudier le mécanisme de croissance des bulles, leur taille et dynamique à l'interface entre les électrodes, les membranes et l'électrolyte. La construction d'une application avec Flower.jl nécessitera les éléments suivants :

- Implémentation de modèles de changement de phase avec prise en compte des effets des concentrations et de la température locales sur le taux de transfert de masse.
- Implémentation de modèles de glissement pour la dynamique de la ligne triple (generalized Navier boundary condition) sur des parois rugueuses.
- Ajout d'un modèle électro-magnétique compatible avec la représentation franche des interfaces. Dans un second temps, ces développements sera utilisés :
- Dans une étude paramétrique des modèles et des propriétés thermochimiques dans la perspective d'une première optimisation de performances,
- Dans un couplage avec l'application CanoP, notamment par la proposition de lois simples ou de modèles réduits compatibles avec les modèles macroscopiques implémentés dans CanoP. Enfin, la mission comprend également la rédaction des livrables (comptes-rendus, rapports et documentations) ainsi que la préparation et la soumission d'articles dans des revues scientifiques à comité de lecture.

Compétences

Vous possédez une thèse en physique/chimie numérique et :

- Vous avez une bonne maîtrise d'un ou plusieurs langages de programmation (C, Fortran, python, Julia).
- Vous maîtrisez les outils de base associés au développement collaboratif (git, github, etc.).
- Vous êtes autonome et vous souhaitez vous intégrer à une équipe de travail pluri-disciplinaire en lien avec le monde de l'industrie.
- Vous maîtrisez l'anglais technique (écrit et oral).
- Vous vous intéressez aux enjeux de la transition énergétique.

Salaire et avantages

Le CEA propose des salaires compétitifs en fonction de vos diplômes et de votre expérience. Ce poste présente plusieurs avantages :

- La possibilité de s'intégrer dans des collaborations existantes avec d'autres laboratoires en France et à l'étranger,
- De nombreuses opportunités de voyager à l'international (échanges, conférences, ateliers et plus encore),
- Jusqu'à 3 jours de télétravail par semaine,
- Le remboursement des abonnements aux transports publics à hauteur de 75% et un réseau de transport gratuit dans toute l'île-de-France,
- Une complémentaire intéressante et plusieurs plans d'épargne entreprise,
- 5 semaines de congés payés et 4 semaines de RTT par an.

Informations et contact

Les demandes de renseignement et candidatures sont à transmettre à Pascal TREMBLIN (pascal.tremblin@cea.fr) et Taraneh SAYADI (taraneh.sayadi@sorbonne-universite.fr) par e-mail.