



---

## **Modélisation thermique de stacks SOC : Approche et outils de réduction de modèle numérique et mise en œuvre à l'échelle module et système.**

*Thermal modelling of SOC stacks : Approach and tools for numerical model reduction and implementation at module and system scale.*

---

### **Contexte**

Dans le cadre des engagements nationaux pour la transition énergétique, la France a lancé en septembre 2020 une stratégie nationale pour le développement de l'hydrogène décarboné. Dans ce cadre, le développement de technologie de production d'hydrogène par électrolyse de l'eau représente une opportunité pour créer une filière industrielle dédiée.

Ainsi, depuis le 1er mars 2021, la société GENVIA a été créée par le CEA, Schlumberger, VINCI Construction, Vicat et l'Agence Régionale Energie Climat Occitanie. Son but : accélérer le développement de la technologie réversible d'électrolyseur haute température à oxyde solide du CEA, la plus efficace et la plus rentable pour la production d'hydrogène décarboné, et permettre son déploiement industriel. Cette technologie fonctionnant à haute température (entre 700 et 800°C), les aspects de management thermique des composants clés, tels que les stack, sont majeurs.

L'objet de ce travail de thèse s'inscrit dans le partenariat GENVIA / CEA, et plus particulièrement sur l'établissement d'une stratégie de modélisation numérique des aspects thermiques des stacks, et leur intégration à l'échelle module / Système.

### **Contexte de la thèse**

Pour produire efficacement des volumes élevés d'hydrogène, à des coûts économiquement attractifs, l'utilisation de composants technologiques avancés tels que les cellules à oxyde solide (SOC), est une voie ambitieuse mais prometteuse soutenue par la France et l'Europe étant donné l'impact potentiel sur la décarbonation de l'industrie. Le caractère réversible (fonctionnement en mode pile à combustible SOFC et fonctionnement en mode électrolyse SOEC) est un atout supplémentaire pour cette technologie.

Des progrès techniques importants ont été réalisés au cours des 15 dernières années pour comprendre et améliorer les performances et la durabilité de la technologie SOC. La montée en maturité de la technologie et la conception de systèmes imposent le recours à des outils de modélisation thermo-fluidiques pour mieux appréhender les phénomènes en jeu et optimiser le

design et l'opération des systèmes. En effet, les solutions SOC multi-stack doivent fonctionner à des températures très élevées (entre 700 et 800 °C) pendant de nombreuses années, ce qui met les problématiques thermiques, couplées à des phénomènes fluidiques et électrochimiques notamment, au cœur des enjeux pour cette technologie.

### **Problématique de la thèse :**

Les problèmes thermo-fluidiques en ingénierie, en particulier pour la technologie SOC fonctionnant à haute température, imposent un recours à des simulations numériques (CFD), qui, pour être réalistes, doivent nécessairement prendre en compte les phénomènes transitoires et travailler sur des échelles variables (depuis l'échelle du micron pour la cellule jusqu'à l'échelle du mètre ou de plusieurs dizaines de mètres pour les stacks /modules/systèmes).

La mise en œuvre de modèle CFD est rapidement difficile voire impossible compte tenu de la taille et de la complexité des systèmes. L'emploi de modèles réduits (ROM : Reduced Order Model) offre une alternative rapide et peu coûteuse à ces calculs exigeants en temps de calcul et en espace mémoire, tout en permettant de maintenir un niveau de modélisation approprié des phénomènes à l'intérieur des stacks.

De plus, au sein d'un module existent des couplages radiatifs / conductifs entre stacks et également entre stacks et enceinte thermique. A cette échelle, doivent également être pris en compte des couplages convectifs et des bilans de matière au cœur du système d'électrolyse ou du système pile.

Afin d'avoir une bonne représentation thermique et fluidique des stacks et des modules, l'identification des paramètres d'entrée et de sortie est nécessaire, notamment:

- les performances électrochimiques et le comportement thermique des stacks. Des approches polynomiales semi-empiriques existent mais nécessitent d'être améliorées pour prendre en compte la dimension spatiale.
- les données associées au couplage thermique (rayonnement + conduction) permettant d'avoir une bonne représentation d'un ou plusieurs paramètres importants du stack.

La prise en compte des effets capacitifs pour la modélisation de phénomènes transitoires (quelques secondes) et l'extrapolation à des durées plus grandes (semaine, mois et jusque sur la durée de vie du stack pour être capable de caractériser et de modéliser différents points de fonctionnement) est également nécessaire pour une meilleure modélisation des performances et du vieillissement notamment.

La réduction de modèle, nécessaire du fait de la complexité des systèmes et du couplage des phénomènes, peut alors être effectuée différemment selon l'objet du modèle réduit :

- Modèle réduit pour identification des variables de fonctionnement (température...) dans un but de caractériser le fonctionnement du stack et de déterminer son vieillissement : le modèle peut ainsi donner des inputs à un modèle de vieillissement ;
- Modèle réduit pour caractériser le comportement en régime transitoire du stack et être une aide au pilotage d'une installation : changement de régime de puissance, passage d'un mode électrolyse à standby à pile à combustible

En fonction de ces objectifs, les variables de sortie et le périmètre du modèle peuvent également être différents. Pour atteindre ces différents objectifs, la réduction de modèle peut être utilisée au

sein d'un même outil (typiquement un outil de CFD pour le passage du stack au module, voire du système) mais un modèle réduit peut également être mis en œuvre dans un outils système (par exemple Dymola pour définir les conditions aux limites des stacks) ou pour faire de la co-simulation par exemple Dymola / CFD. La cohérence méthodologique est alors un élément clé.

### **Etapes principales envisagées pour le travail de thèse**

Dans le cadre de ce travail de thèse, après un travail bibliographique complet sur les sujets concernés, les étapes principales suivantes sont envisagées pour aboutir à la définition, la mise en place et la validation de la méthodologie.

a) Identifier les besoins en terme de réduction de modèle

En particulier, le doctorant contribuera à la définition :

- Des périmètres et des échelles de modélisation à considérer
- Des outils retenus (Dymola, Fluent, Python, Comsol...)
- Des données d'entrée/sortie qui permettent de caractériser un stack et tout autre composant nécessaire à la mise en place de la méthodologie
- Des modes de fonctionnements et des systèmes retenus

b) Identifier les outils de réduction

Le doctorant identifiera les approches et méthodologies de réduction de modèle, par exemple

- Les outils de réduction de modèles disponibles dans les outils de CFD commerciaux (Fluent par exemple)
- Approches réseaux nodaux capacitives
- Approche MIM (méthode de réduction de modèle qui s'appuie sur la minimisation d'un écart entre les sorties d'un modèle de référence et celles d'un modèle réduit. Les paramètres du modèle réduit sont vus comme les variables d'un problème d'optimisation),
- Approche par réseau de neurones
- Algorithme de réduction,
- ...

c) Mettre en œuvre les méthodologies de réduction,

Une fois la méthodologie générale retenue et les outils identifiés, les approches successives suivantes seront à mettre en œuvre et comprendront l'intégration de résultats expérimentaux :

- Développement de modèles notamment CFD (Fluent)
- Utilisation des données expérimentales pour valider les modèles et/ou réaliser des essais spécifiques

- Couplage d'outils numériques et de modèles (par exemple, Dymola / Fluent)

Pour ce travail, le doctorant s'appuiera sur l'expertise, les outils et méthodes disponibles au CEA, en cohérence avec les objectifs de GENVIA.

### **Compétences requises chez le candidat en thèse**

- Thermique et mécanique des fluides,
- Outils CFD et modélisation système (Dymola ou autre)
- Notions en électro-chimie et technologies hydrogène, idéalement SOC
- Appétence pour les méthodes numériques.
- Python

### **Modalité de réalisation de la thèse**

La thèse bénéficiera d'un financement par la société GENVIA (une thèse CIFRE) et se déroulera au sein des laboratoires du LITEN au CEA Grenoble. Le démarrage est envisagé à partir de l'automne 2021.

### **Pour postuler**

Pour candidater à cette offre, veuillez envoyer votre CV et lettre de présentation à [info@genvia.com](mailto:info@genvia.com) avec pour objet [Candidature Thèse – NOM PRENOM].