

PhD Research Proposal

Multiscale Physics-Informed Degradation Modelling of PEM Electrolysers under Dynamic Balance-of-Plant Operation

Proton Exchange Membrane (PEM) electrolyzers are a key enabling technology for large-scale green hydrogen production. Despite significant progress in performance and cost reduction, durability and lifetime under realistic dynamic operating conditions remain major bottlenecks for widespread deployment. Degradation processes in PEM electrolyzers are inherently multiscale, involving coupled phenomena at material, component, cell, stack, and system levels, and are strongly influenced by Balance-of-Plant (BoP) operation strategies, especially under intermittent renewable power input.

Current degradation models typically focus on isolated components or operate at a single scale, limiting their predictive capability and transferability. Meanwhile, the increasing availability of degradation test data opens new opportunities for physics-informed hybrid modelling, where physical knowledge and data-driven learning are combined to uncover degradation pathways and their interactions.

Within the EU PEMPIRE project, this PhD aims to develop multiscale degradation models capable of capturing the coupled degradation mechanisms of electrolyser key components, fully accounting for dynamic BoP operation effects.

The main objective of this PhD is to develop and validate a multiscale physics-informed hybrid degradation modelling framework for PEM electrolyzers. Specific objectives are:

1. Collect, structure, and curate multilevel degradation datasets from component to system scale.
2. Develop multiscale degradation models bridging material/component, cell/stack, and system levels.
3. Integrate physical models and experimental data using a hybrid modelling approach.
4. Reveal coupled degradation pathways and their interactions with dynamic BoP operation.
5. Use degradation models to support accelerated test design and operational optimisation.

The PhD work will be conducted by collaborating with world leading electrolyzer component manufactures, as well as electrolyzer stack and system integrators. To support degradation model development, both tailored experimental data and in-field data at different scales will be collected for the model development. The adopted approach will enable progressive model refinement throughout the project duration. The developed degradation models will be used to support the design of accelerated degradation test protocols.

Host institute:

The Institute FEMTO-ST which is the largest CNRS-labeled lab in engineering in France. European leading experimental facilities are provided partially by CNRS FCLAB (<https://www.fclab.fr/>).

Working Conditions:

The PhD work will be conducted within the framework of EU Horizon project PEMPIRE (PEM Electrolysis: Pushing towards significant Improvements Reaching Extended Performance and Lifetime). The PhD position is also fully funded by the EU grant.

Applicants' Profile:

Candidates should possess expertise in the characterization, modeling, and analysis of physical devices, preferably electrochemical devices (such as fuel cells, batteries, and electrolyzers). Experience in hydrogen fuel cell or electrolyzer system design, automation, and testing will be a significant advantage. A strong background in data analysis and modeling (e.g. numerical analysis, machine learning techniques) would be appreciated. An ability to work collaboratively in an EU project team setting is essential.

Contacts:

Dr. Zhongliang LI: zhongliang.li@umlp.fr

Prof. Daniel HISSEL: daniel.hissel@umlp.fr

Period: The PhD position is for three-year and supposed to start in September 2026.

Proposition de sujet de thèse (PhD)

Modélisation multi-échelle et « physics-informed » de la dégradation des électrolyseurs PEM sous fonctionnement dynamique du Balance-of-Plant

Les électrolyseurs à membrane échangeuse de protons (PEM) constituent une technologie clé pour la production à grande échelle d'hydrogène vert. Malgré des progrès significatifs en matière de performances et de réduction des coûts, la durabilité et la durée de vie en conditions de fonctionnement dynamiques réalistes restent des verrous majeurs pour un déploiement à grande échelle. Les processus de dégradation dans les électrolyseurs PEM sont intrinsèquement multi-échelles et impliquent des phénomènes couplés aux niveaux des matériaux, des composants, de la cellule, du stack et du système. Ces phénomènes sont fortement influencés par les stratégies d'exploitation du Balance-of-Plant (BoP), en particulier dans le contexte d'une alimentation intermittente issue des énergies renouvelables.

Les modèles de dégradation existants se concentrent généralement sur des composants isolés ou opèrent à une seule échelle, ce qui limite leurs capacités prédictives et leur transférabilité. Par ailleurs, la disponibilité croissante de données expérimentales issues de tests de dégradation ouvre de nouvelles perspectives pour la modélisation hybride « physics-informed », qui combine connaissances physiques et apprentissage basé sur les données afin d'identifier les mécanismes de dégradation et leurs interactions.

Dans le cadre du projet européen **PEMPIRE**, cette thèse vise à développer des modèles de dégradation multi-échelles capables de capturer les mécanismes de dégradation couplés des composants clés des électrolyseurs, tout en prenant pleinement en compte les effets du fonctionnement dynamique du BoP.

L'objectif principal de cette thèse est de développer et de valider un cadre de modélisation hybride multi-échelle, fondé sur la physique, pour la dégradation des électrolyseurs PEM. Les objectifs spécifiques sont les suivants :

1. **Collecter, structurer et qualifier des jeux de données de dégradation multi-niveaux**, de l'échelle composant à l'échelle système.
2. **Développer des modèles de dégradation multi-échelles** reliant les niveaux matériau/composant, cellule/stack et système.
3. **Intégrer modèles physiques et données expérimentales** à l'aide d'une approche de modélisation hybride.
4. **Identifier les mécanismes de dégradation couplés** et leurs interactions avec le fonctionnement dynamique du BoP.
5. **Exploiter les modèles de dégradation** pour soutenir la conception de tests de vieillissement accéléré et l'optimisation des stratégies d'exploitation.

Le travail de thèse sera mené en collaboration avec des fabricants de composants d'électrolyseurs de rang mondial ainsi qu'avec des intégrateurs de stacks et de systèmes d'électrolyse. Afin de soutenir le développement des modèles de dégradation, des données expérimentales spécifiques ainsi que des données issues du fonctionnement en conditions réelles, à différentes échelles, seront collectées. L'approche adoptée permettra un raffinement progressif des modèles tout au long du projet. Les modèles développés serviront notamment à soutenir la conception de protocoles de tests de dégradation accélérée.

Institut d'accueil :

L'institut **FEMTO-ST**, qui constitue le plus grand laboratoire d'ingénierie labellisé CNRS en France. Des plateformes expérimentales de premier plan au niveau européen sont notamment mises à disposition via la fédération de recherche **CNRS FCLAB** (<https://www.fclab.fr/>).

Conditions de travail :

Le travail de thèse sera réalisé dans le cadre du projet européen Horizon **PEMPIRE** (PEM Electrolysis: *Pushing towards significant Improvements Reaching Extended Performance and Lifetime*). Le financement de la thèse est entièrement assuré par le projet européen.

Profil des candidats :

Les candidats devront disposer d'une expertise en caractérisation, modélisation et analyse de dispositifs physiques, de préférence de dispositifs électrochimiques (tels que les piles à combustible, les batteries ou les électrolyseurs). Une expérience en conception, automatisation et essais de systèmes de piles à combustible hydrogène ou d'électrolyseurs constituera un atout important. Un solide bagage en analyse de données et en

modélisation (par exemple analyse numérique, techniques d'apprentissage automatique) sera apprécié. La capacité à travailler de manière collaborative au sein d'une équipe de projet européenne est essentielle.

Contacts :

Dr Zhongliang LI : zhongliang.li@umlp.fr

Prof. Daniel HISSEL : daniel.hissel@umlp.fr

Période :

Le contrat doctoral est prévu pour une durée de **trois ans** et devrait **débuter en septembre 2026**.