

Etude d'une installation de cogénération de froid et d'électricité à partir d'une source de chaleur à basse température.

Study of a cold and electric cogeneration machine using a low temperature heat source.

S. Braccio^{1,2,*}, H.T. Phan¹, N. Tauveron¹, N. Le Pierrès²

*Corresponding author: simone.braccio@cea.fr

¹Univ. Grenoble Alpes, CEA, LITEN, DTCH. F-38000 Grenoble, France

²Laboratoire LOCIE, Université Savoie Mont Blanc CNRS UMR 5271, 73376 Le Bourget Du Lac, France

Résumé - Un cycle à absorption intégré avec une turbine à action axiale permet la coproduction de froid et d'électricité. Cette technologie est très prometteuse pour sa capacité à exploiter plus efficacement les sources de chaleur à basse température que la production séparée avec des cycles simples. Le développement d'un modèle 1D de l'expandeur, intégré dans un modèle 0D du cycle complet, permet d'évaluer les performances atteignables et leur évolution en fonction des paramètres de fonctionnement dont notamment les températures des sources externes.

Mots-clés : Cogénération ; Absorption; Eau / Ammoniac ; Expandeur; Turbine axiale à action;

Abstract – The present work analyses an absorption cycle integrated with an impulse axial turbine for the co-production of cold and electricity. This technology holds great promise for its ability to harness low-temperature heat sources more efficiently than separate production with simple cycles. By developing a 1D model of the expander, and integrating it into a 0D model of the complete cycle, it is possible to evaluate the performances obtainable and their variation with respect to the operating parameters, namely the temperatures of the external sources.

Keywords: Cogeneration; Absorption; Water / Ammonia, Expander; Impulse axial turbine;

Nomenclature

Grandeurs

b	Hauteur de la pale, m
C	Vitesse absolue, m s ⁻¹
h	Enthalpie spécifique, kJ/kg
k	Coefficient de perte
\dot{m}	Débit massique, kg s ⁻¹
\dot{Q}	Puissance thermique échangée, kW
r_s	Coefficient de séparation
U	Vitesse tangentielle, m s ⁻¹
W	Vitesse relative, m s ⁻¹
\dot{W}_t	Puissance produite par la turbine, kW
<i>Lettres grecques</i>	
β	Angle, deg
β	Angle, deg
Δ	Variation
η	Rendement

Ψ Coefficient de pression

ϵ Taux d'admission partielle

Indices

d Frottements sur les disques

i Incidence

is Isentropique

liq Liquide

p Passage

sat Saturé

v Ventilation

vap Vapeur

1 Entrée rotor

2 Sortie rotor

Acronymes

COP Coefficient de performance

CFE Cogénération de Froid et d'Electricité

1. Introduction

Compte tenu de la demande mondiale d'énergie toujours croissante des recherches se développent de plus en plus sur de nouvelles technologies de conversion d'énergie plus efficaces

basées sur des sources renouvelables ou de récupération. Dans ce contexte les systèmes à absorption [1], se prêtent bien à la valorisation d'énergie à basse température pour la production de froid. Les cycles combinés utilisant le même fluide de travail pour la coproduction de froid et d'électricité sont encore plus intéressants pour améliorer l'efficacité énergétique.

Différentes architectures de systèmes de cogénération de froid et d'électricité (CFE) sont décrites dans la littérature [2]. Deux familles peuvent être distinguées : les architectures en série [3]- [4] et celles en parallèle [5]-[6]-[7]. Les premières sont en général plus performantes tandis que les secondes offrent plus de flexibilité entre les différents modes de productions et sont plus faciles à mettre en œuvre. Indépendamment des architectures, le froid peut être produit en utilisant le principe des machines à absorption [6]-[8]-[9] ou celui des éjecteurs [3] ou encore une combinaison des deux technologies [9]-[10]. L'électricité est quant à elle produite par la détente du fluide de travail dans un expandeur de type volumique ou une turbine [11].

Le présent travail se concentre sur un système CFE avec architecture en parallèle à basse température basé sur une machine à absorption eau/ammoniac. L'étude se base sur une machine de puissance thermique du générateur de 10 kW et de puissance électrique visée de 1 kW pouvant fonctionner en cogénération. Dans une étude précédente [12], l'expandeur, qui utilise la vapeur pressurisée du cycle et qui avait été initialement sélectionné (un détendeur volumétrique de type scroll) s'est montré inapproprié pour une application de si petite taille en raison d'un débit de fuite trop élevé. Une technologie différente de production d'électricité est donc ici investigée, celle d'un turbo-expandeur à action à admission partielle. Le fait que dans ce type d'expandeur toute la détente a lieu dans le distributeur devrait limiter l'influence des fuites et garantir un bon niveau de production de travail [13]. Toutefois en raison du comportement intrinsèque de la machine, une attention particulière doit être portée aux interdépendances entre la physique régissant l'expandeur et le cycle qui l'intègre.

Une campagne expérimentale débutera dans les semaines à venir pour prouver l'applicabilité de cette technologie à des applications telles que la récupération de chaleur fatale, issue de sources géothermales, de centrales thermiques, ou même de gaz d'échappement des véhicules. Le système peut fonctionner aussi en régime variable, en couplage avec de sources renouvelables et intermittentes (comme le solaire thermique) ou de rejets industriels variables ou dans des réseaux de chaleur, mais un travail plus approfondi est nécessaire pour évaluer le comportement de la machine dans ces conditions.

2. Description du cycle

Le cycle CFE considéré dans cette étude est schématisé en Figure 1. Le fonctionnement est celui d'une machine à absorption eau-ammoniac à laquelle vient se coupler une turbine en parallèle du circuit de production de froid.

Côté circuit de solution, une première ligne de solution riche en ammoniac circule de l'absorbeur vers le générateur et est pressurisée par une pompe. Une seconde ligne comprenant une vanne de détente ramène la solution pauvre à l'absorbeur. Un économiseur permet de préchauffer la solution riche grâce à la solution pauvre sortant du générateur où un apport de chaleur à basse température permet la désorption de vapeur, principalement constituée d'ammoniac, de la solution. La division des flux de vapeur se fait directement à la sortie du générateur de manière que la rectification (purification de la vapeur de l'eau qu'elle contient) n'opère que sur la ligne de froid afin d'en maximiser la production. Cette configuration a été choisie suite à de précédentes études sur la position optimale du rectifieur [12].

Côté production d'électricité, un surchauffeur fournit une puissance \dot{Q}_{sh} pour augmenter la température du fluide afin de garantir qu'il reste à l'état de gaz tout au long de la détente qui se

produit à l'intérieur de la turbine. L'expandeur considéré dans la présente étude est une micro turbine avec un seul injecteur comme distributeur produite par Enogia [14]. Côté production de froid, l'ammoniac est condensé grâce à l'échange d'une puissance thermique \dot{Q}_c avec une source de température intermédiaire (en général, l'air ambiant). Avant de refroidir la source froide à l'évaporateur en absorbant une puissance \dot{Q}_e , le fluide est détendu dans une vanne pour atteindre la basse pression. Un sous-refroidisseur permet de pré-refroidir l'ammoniac avant sa détente en utilisant l'ammoniac sortant de l'évaporateur.

Les flux des deux lignes de production se mélangent et sont finalement absorbés dans la solution pauvre grâce à un refroidissement par une source de température à laquelle une puissance \dot{Q}_a est cédée.

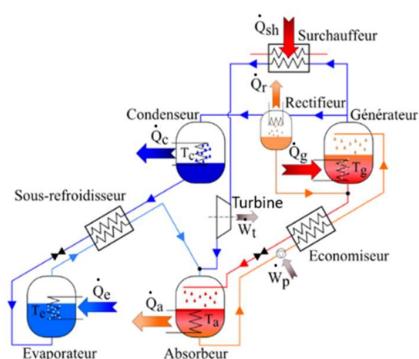


Figure 1: Schéma du cycle CFE

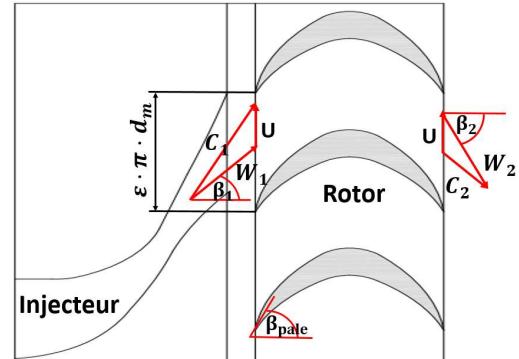


Figure 2 : Schéma de la turbine

3. Modélisation et simulation de la Turbine

L'expandeur considéré dans la présente étude (Figure 2) est une turbine axiale supersonique fortement partialisée, dont le distributeur, constitué d'un seul injecteur convergent-divergent, convertit tout le saut d'enthalpie en énergie cinétique d'où un degré de réaction nul et la dénomination de "machine à action". Compte tenu du très faible débit de vapeur disponible, le choix d'une machine à admission partielle permet d'éviter des dimensions trop petites ou des vitesses de rotation excessives. De plus, le fait que toute la détente a lieu dans le distributeur et qu'il n'y a pas de saut de pression dans le rotor, évite la perte de performance due aux fuites qui peuvent devenir très pénalisantes pour les machines de cette taille.

Un modèle 1D compressible du turbo-expandeur a été créé dans EES - Engineering Equation Solver - [15]. Le comportement en tant que gaz réel et mélange diphasique du fluide est pris en compte grâce à des corrélations qui décrivent l'état thermodynamique du mélange eau-ammoniac [16]. Dans le calcul des conditions soniques et du débit, la condensation du mélange lors de la détente est prise en compte en faisant le bilan enthalpique dans l'hypothèse que la phase liquide et la phase vapeur sont à la même température ($T_{liq,sat} = T_{vap,sat}$) et que le mélange qui condense est entraîné par la vapeur ($C_{liq,sat} = C_{vap,sat} = C_{mélange}$), en utilisant la vitesse du son de la seule vapeur saturée dans le calcul des conditions critiques du mélange.

En fonction des conditions de fonctionnement il reste un pourcentage variable d'eau dans la vapeur produite par le générateur. L'influence du titre d'ammoniac dans le mélange entrant dans la turbine sur le débit la traversant a d'abord été analysée. La plage de concentrations d'ammoniac dans la vapeur de réfrigérant que l'on peut trouver dans le cycle (rarement inférieure à 90%) a peu d'influence sur le débit traité par le distributeur : par exemple pour des conditions d'entrée de 12 bar et 120 °C on constate une diminution maximale de 3,15% dans le cas d'un mélange avec un titre d'ammoniac du 90% par rapport au cas de l'ammoniac pur.

Les figures 3 et 4 montrent les courbes de débit de l'injecteur, en fixant la pression d'entrée totale et en fonction de la pression totale de sortie (Figure 3) et vice versa (Figure 4) pour différentes valeurs de rendement isentropique de l'injecteur pour ammoniac pur.

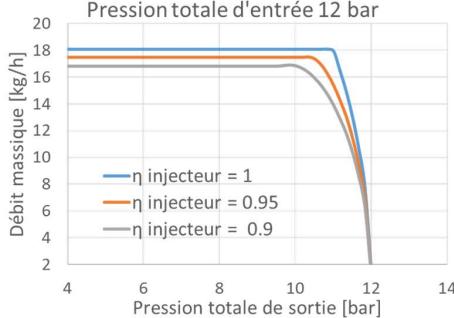


Figure 3: Caractéristique de débit de la turbine

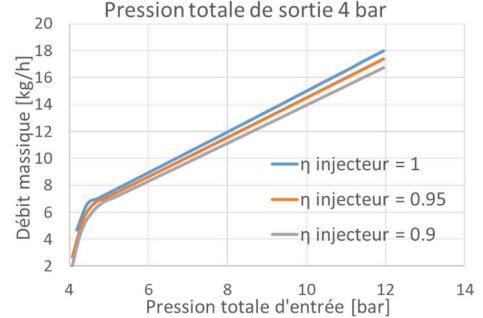


Figure 4: Caractéristique de débit de la turbine

Une légère diminution de la pression suffit pour atteindre la condition de blocage et un débit maximum dans le col sonique. Dans le cas de rendement isentropique de l'injecteur unitaire, le β_{lim} est égal à 0.916, proche de celui calculable par les relations classiques des gaz parfaits en utilisant un indice adiabatique $k = c_p/c_v$ défini comme la moyenne arithmétique des valeurs relatives aux conditions amont et aval [17]. Quand le rendement isentropique de l'injecteur diminue, le β_{lim} minimal nécessaire pour atteindre les conditions soniques diminue ainsi que le débit maximal traité. En effet, des rendements inférieurs correspondent à des pertes de pression totales plus importantes et donc à une variation de pression plus importante nécessaire pour atteindre les conditions critiques. D'autre part, ces conditions correspondent à des pressions plus faibles et des températures plus élevées d'où une diminution de la densité du fluide et du débit massique. Le rendement isentropique de l'injecteur a également une forte influence sur la vitesse d'entrée dans le rotor et est donc un facteur déterminant pour le rendement global de la machine. La Figure 4 montre la même caractéristique de débit, en fixant la pression en aval de l'injecteur et en faisant varier celle en amont.

Un bilan d'énergie permet de calculer la vitesse d'entrée dans le rotor ; celle-ci est utilisée pour calculer le travail échangé par le fluide avec les aubes mobiles grâce à l'équation d'Euler [18] $T_{idéal} = U(C_{u1} - C_{u2})$ et du triangle des vitesses. A ce travail théorique maximal pouvant être produit à partir de l'énergie cinétique d'entrée, des termes de perte de termes de perte doivent être soustraites, communément divisées en pertes d'incidence, de passage, de frottement sur les disques et de ventilation. La partialisation augmente le terme de perte dû à l'effet de ventilation et si la turbine est fortement partialisée, les aubes ne restent que peu de temps dans la région active, rendant négligeables les pertes d'admission complète par rapport à celles d'admission partielle [19].

Les pertes d'incidence s'expriment de la façon suivante [20] :

$$\Delta h_i = \frac{1}{2} \cdot \cos^2(\beta_1 - \beta_{pale}) \cdot W_1^2 \quad (1)$$

Les pertes de passage dues aux frottements dans les aubes mobiles sont prises en compte comme [21]:

$$\Delta h_p = \frac{1}{2} \cdot (1 - \Psi^2) \cdot W_1^2 \quad (2)$$

$$\text{Où } \Psi = 0.99 - \left(\frac{2.28 \cdot \Delta \beta}{10^4} \right) - \left(\frac{4.97}{180 - \Delta \beta} \right) \text{ et } \Delta \beta = \beta_1 - \beta_2$$

La puissance dissipée par ventilation est [22] :

$$P_v = k_v \cdot d_m \cdot b_1 \cdot \varepsilon \cdot \rho \cdot U^3, \quad \Delta h_v = \frac{P_v}{m} \quad (3)$$

Où ρ est la densité du fluide dans le carter, b_1 est la hauteur de la pale, d_m le diamètre moyen du rotor, U est la vitesse de rotation de la turbine et $k_v = 0.6 \sqrt{b_1}$.

Finalement en introduisant un coefficient $k_d = 1.2 \cdot 10^3$ la puissance dissipée pour les frottements sur les disques vaut [22] :

$$P_d = k_d \cdot d_m^2 \cdot \rho \cdot U^3, \quad \Delta h_d = \frac{P_d}{m} \quad (4)$$

Le rendement isoentropique total à total de la turbine est donc calculé comme suit:

$$\eta_{tt} = \frac{T_{idéal} - \Delta h_i - \Delta h_p - \Delta h_v - \Delta h_d}{\Delta h_{is}} \quad (5)$$

Les résultats du modèle pour l'ammoniac pur sont présentés en Figure 5. On peut noter que, à cause de la petite taille de la turbine et du fort taux d'admission partielle (soit le rapport du numéro des aubes actives sur le total) $\varepsilon = 3,7\%$, les pertes d'admission partielle deviennent prépondérantes par rapport à toutes les autres au-delà d'une certaine vitesse de rotation. On voit également que pour des vitesses de rotation élevées les pertes de ventilation associées à la partialisation prennent une valeur de plus en plus importante; elles déplacent le rendement maximal de la turbomachine (52%) à des vitesses de rotation inférieures par rapport à la courbe théorique, obtenue en absence de pertes dans le rotor, d'environ 100 000 tr/min à environ 60 000 tr/min.

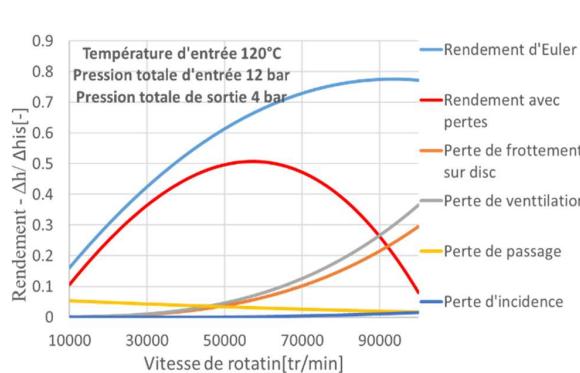


Figure 5: Caractéristique de rendement de la turbine

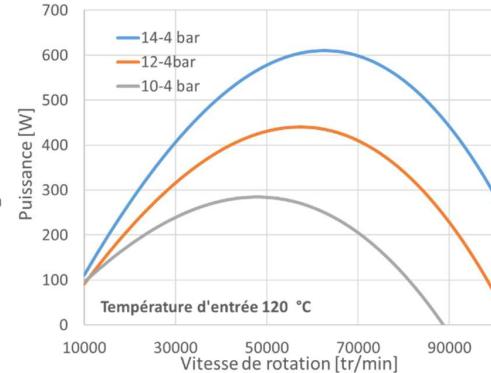


Figure 6: Caractéristique de puissance de la turbine

La Figure 6 montre la puissance produite par la turbine pour différentes valeurs de pression d'entrée. Lorsque la pression d'entrée augmente, la puissance produite augmente également, et sa valeur maximale se déplace vers des vitesses de rotation plus élevées.

4. Modèle du cycle complet

Un modèle numérique a été développé sur la base du cycle à absorption présenté. Pour chaque composant les équations de conservation de l'énergie et de la masse sont formulées sous l'hypothèse de stationnarité. La modélisation des échangeurs thermiques est alimentée avec des valeurs de pincement, de perte de charge et d'efficacité déterminées à partir d'expériences précédentes [23]. Enfin on suppose que les fluides sont à saturation à la sortie de chaque échangeur (exceptée une surchauffe imposée en sortie d'évaporateur).

Pour compléter le développement du cycle CFE, le modèle de turbine est intégré dans le modèle de machine à absorption, précédée d'un surchauffeur, modélisé sous la forme d'un apport de puissance réglable au fluide. Pour estimer le rendement de la production de froid du cycle CFE, le COP est défini ainsi :

$$COP = \frac{\dot{Q}_e}{\dot{Q}_g \cdot r_s} \quad (6)$$

Avec \dot{Q}_e la puissance thermique échangée à l'évaporateur, et \dot{Q}_{gen} celle au générateur et r_s égale au rapport entre le débit transitant dans la partie froide du circuit et le débit produit par le générateur. Le rendement du cycle de puissance est en revanche ainsi calculé :

$$\eta_{power} = \frac{\dot{W}_t}{\dot{Q}_g \cdot (1 - r_s) + \dot{Q}_{sh}} \quad (7)$$

Avec \dot{Q}_{sh} la puissance fournie au surchauffeur et \dot{W}_t la puissance produite par la turbine. D'abord, l'influence du générateur sur le cycle est étudiée en termes de puissance fournie et de température. Si on fixe une température du générateur, il y a une puissance minimale à lui fournir pour pouvoir produire le débit de vapeur requis par la turbine. Quand la puissance fournie au générateur augmente, le débit de vapeur produite augmente et, comme le débit traité par la turbine en conditions de blocage ne change pas, la valeur du rapport r_s augmente ainsi que celles du débit traversant le cycle de réfrigération et de la puissance froide produite.

Pour une valeur de puissance fournie au générateur fixée une température du générateur plus élevée implique une diminution du débit de vapeur produite qui se traduit en une diminution du débit circulant dans la partie froide du circuit. Par conséquent, la puissance minimale du générateur pour que le cycle puisse fonctionner en mode combiné augmente, passant de 8,5 kW pour des températures de générateur de 100 °C à environ 10 kW pour des températures de 150 °C. Ce qui précède a été obtenu dans l'hypothèse d'une demande de refroidissement à 0 °C. L'équation 6 montre que la puissance froide produite est proportionnelle au débit qui passe dans la partie froide du circuit (r_s), mais aussi au COP dont la tendance décroissante croissante avec T_g dépend fortement de la température de production froide .

La température de production du froid est en effet un paramètre fondamental dans la caractérisation du comportement du cycle et exerce une forte influence sur la puissance électrique et froide produite par le cycle, sur son rendement et sur la température optimale de la source chaude comme montré en Figure 7 et Figure 8.

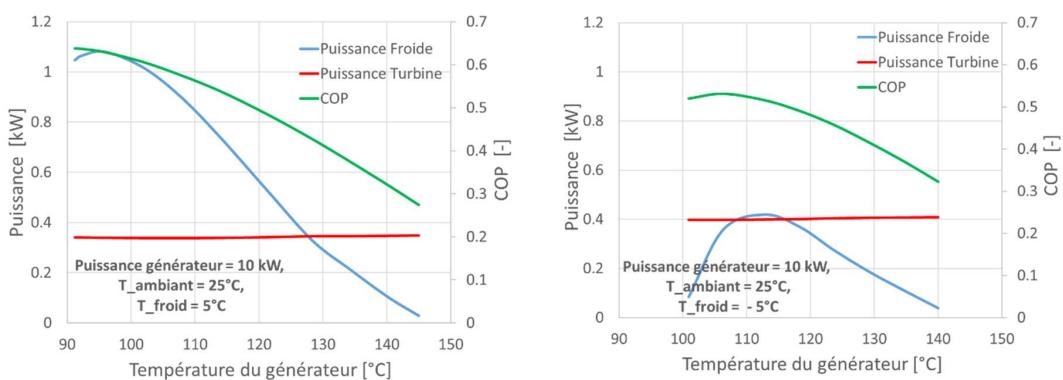


Figure 7: Influence de la température du générateur pour produire du froid à 5°C

Figure 8: Influence de la température du générateur pour produire du froid à -5°C

L'influence de la température de condensation sur le cycle est ensuite analysée (Figure 9). Une augmentation de celle-ci se traduit par une augmentation de la pression maximale du cycle et donc du rapport de pression disponible à la turbine, pour lequel la puissance produite et le débit nécessaire augmentent significativement. La puissance froide produite subit au contraire une diminution en raison du débit plus faible qui traverse la partie froide du cycle, et du changement du COP. Quant à la température de l'évaporateur, en revanche, une augmentation de celle-ci a un effet positif sur la puissance froide produite mais un effet négatif sur la production électrique.(Figure 10).

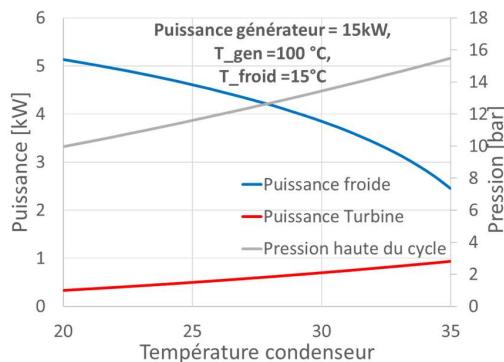


Figure 9: Influence Température condenseur

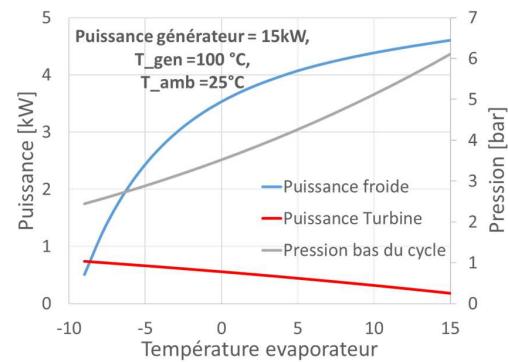


Figure 10: Influence température évaporateur

5. Conclusion

Une turbine à action comparée aux expandeurs volumétriques présente une série d'avantages, notamment la moindre influence des pertes dues aux fuites, qui jouent un grand rôle dans les machines de très petite taille.

L'expandeur atteint les conditions soniques avec des faibles rapports d'expansion, au-dessus desquels le débit dans le système ne change plus. La puissance produite par la turbine dépend fortement de sa vitesse de rotation et le fonctionnement optimal semble se situer autour de 50 000 - 70 000 tr/min selon les conditions de fonctionnement.

L'augmentation de la température de la source qui alimente le générateur a été évalué n'a pas d'effet majeur sur la puissance de la turbine parce qu'une réduction du débit est générée en même temps. Par contre l'influence de la température du condenseur (refroidi en général par l'air ambiant) semble forte sur la production électrique et sur la production de froid qui évoluent respectivement de manière proportionnelle et inversement proportionnelle à cette ci. La température du condenseur s'est avéré être un paramètre plus influent : elle a un effet positif sur la production électrique et négatif sur la production de froid, soulignant donc l'importance d'une définition préliminaire de la température de production du froid.

La turbine, en l'absence de possibilité de régulation du débit, fixe des strictes limites en termes de conditions de fonctionnement acceptables pour le cycle. Pour cette raison l'ajout d'un système de régulation sur le modèle est en cours d'étude en vue d'une application sur la configuration expérimentale.

Références

- [1] Herold, K. E., Radermacher, R., and Klein, S. A., 2016, *Absorption Chillers and Heat Pumps*.
- [2] Ayou, D. S., Bruno, J. C., Saravanan, R., and Coronas, A., 2013, “An Overview of Combined Absorption Power and Cooling Cycles,” *Renew. Sustain. Energy Rev.*, 21, pp. 728–748.
- [3] Khalil, A., 2017, “Energetic and Exergetic Performance Investigation of a Solar Based Integrated System for Cogeneration of Power and Cooling,” *Appl. Therm. Eng.*, 112, pp. 1305–1316.
- [4] Xu, F., Yogi Goswami, D., and S. Bhagwat, S., 2000, “A Combined Power/Cooling Cycle,” *Energy*.
- [5] Kumar, G. P., Saravanan, R., and Coronas, A., 2017, “Experimental Studies on Combined Cooling and Power System Driven by Low-Grade Heat Sources,” *Energy*, 128, pp. 801–812.
- [6] Wang, J., Dai, Y., Zhang, T., and Ma, S., 2009, “Parametric Analysis for a New Combined Power and Ejector-Absorption Refrigeration Cycle,” *Energy*, 34(10), pp. 1587–1593.
- [7] Voeltzel, N., Phan, H. T., Tauveron, N., Gonzalez, B., Blondel, Q., Wirtz, M., and Boudehenn, F., 2020, “Numerical Studies of a Hybrid Cycle for Power Production and Cooling,” *Proc. ISES Sol. World Congr. 2019 IEA SHC Int. Conf. Sol. Heat. Cool. Build. Ind. 2019*, pp. 2681–2690.
- [8] Muye, J., Ayou, D. S., Saravanan, R., and Coronas, A., 2016, “Performance Study of a Solar Absorption Power-Cooling System,” *Appl. Therm. Eng.*, 97, pp. 59–67.
- [9] Mendoza, L. C., Ayou, D. S., Navarro-Esbrí, J., Bruno, J. C., and Coronas, A., 2014, “Small Capacity Absorption Systems for Cooling and Power with a Scroll Expander and Ammonia Based Working Fluids,” *Appl. Therm. Eng.*, 72(2), pp. 258–265.
- [10] Alexis, G. K., 2007, “Performance Parameters for the Design of a Combined Refrigeration and Electrical Power Cogeneration System,” *Int. J. Refrig.*, 30(6), pp. 1097–1103.
- [11] Landelle, A., Tauveron, N., Haberschill, P., Revellin, R., and Collasson, S., 2017, “Organic Rankine Cycle Design and Performance Comparison Based on Experimental Database,” *Appl. Energy*.
- [12] Voeltzel, N., Phan, H. T., Blondel, Q., Gonzalez, B., and Tauveron, N., 2020, “Steady and Dynamical Analysis of a Combined Cooling and Power Cycle,” *Therm. Sci. Eng. Prog.*, 19(July), p. 100650.
- [13] Blondel, Q., Tauveron, N., Caney, N., and Voeltzel, N., 2019, “Experimental Study and Optimization of the Organic Rankine Cycle with Pure NovecTM649 and Zeotropic Mixture NovecTM649/HFE7000 as Working Fluid,” *Appl. Sci.*
- [14] <https://enogia.com/> (Accessed on 10 January 2021).
- [15] EES: Engineering Equation Solver|F-Chart Software: Engineering Software. Available Online: <http://www.fchart.com/ees/> (Accessed on 10 January 2021).
- [16] Ibrahim, O.M., Klein, S. A., “Thermodynamic Properties of Ammonia-Water Mixtures,” *ASHRAE Trans.: Symposia*, 21, 2, 1495 (1993).
- [17] Anderson, J. D., 1982, “Modern Compressible Flow with Historical Perspective.”
- [18] Dixon, S., and Hall, C., 2010, *Fluid Mechanics and Thermodynamics of Turbomachinery*.
- [19] Cho, S. Y., Cho, C. H., and Kim, C., 2007, “Performance Prediction on a Partially Admitted Small Axial-Type Turbine,” *JSME Int. Journal, Ser. B Fluids Therm. Eng.*, 49(4), pp. 1290–1297.
- [20] Czapla, J. P., 2015, “Investigation of Supersonic Impulse Turbines for Application to Geothermal Binary Power Stations.”
- [21] Vavra, M. H., 1960, *Aero-Thermodynamics and Flow in Turbomachines*, John Wiley.
- [22] Capetti, A., 1964, *Motori Termici*, UTET.
- [23] Boudéhenn, F., Bonnot, S., Demasles, H., Lefrançois, F., Perier-Muzet, M., and Triché, D., 2016, “Development and Performances Overview of Ammonia-Water Absorption Chillers with Cooling Capacities from 5 to 100 KW,” *Energy Procedia*, 91, pp. 707–716.

Remerciements

Les auteurs remercient le Commissariat à l’Energie Atomique et aux Energie Alternatives (CEA). Les auteurs souhaitent également exprimer leur gratitude à la société Enogia pour la mise à disposition de données relatives à l’expandeur.

S. Braccio a été soutenu par le programme CEA NUMERICS, qui a reçu un financement du programme de recherche et d’innovation Horizon 2020 de l’Union européenne dans le cadre de la convention de subvention Marie Skłodowska-Curie N° 800945.