

**REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE.
MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE
SCIENTIFIQUE.**



**UNIVERSITE SAAD DAHLAB DE BLIDA 1.
FACULTE DE TECHNOLOGIE.
DEPARTEMENT DE GENIE MECANIQUE.
LABORATOIRE D'ETUDES ET DE RECHERCHE EN TECHNOLOGIE
INDUSTRIELLE.**

**Projet de Fin d'Etudes Pour l'obtention du Diplôme de Master
en Fabrication Mécanique et Productique.**

**THEME:
SIMULATION NUMERIQUE D'UNE PILE
COMBUSTIBLE P.E.M.F.C.**

**Proposés et encadrés par:
Ph. D. ALLALI Abderrazak, Pr.
Dr. MEDKOUR Mihoub.**

**Réalisés par Melles:
DJERIDA Sondes.
ZAMIME Sara.**

ANNEE UNIVERSITAIRE : 2020/2021.

REMERCIEMENTS.

Je remercie tout d'abord, Dieu tout puissant de m'avoir donné le courage, la volonté et la patience d'achever ce modeste travail.

*Je tiens à remercier mon Directeur de Thèse, le Professeur **ALLALI Abderrazak**, et spécialement le docteur **MEDKOUR Mihoub** pour l'aide qu'il m'a apporté pour accomplir ce travail, ses orientations constructives, ses encouragements, son soutien morale qu'il m'a donné, ainsi que sa gentillesse qui m'ont permis de mener à bien ce travail. Nous tenons à remercier les membres du jury pour leur précieux temps pour lire et revoir ce travail.*

Nos remerciements vont également à tous les Enseignants qui ont Contribué à notre formation ainsi qu'à tout le personnel du Département de Génie Mécanique.

Nous voudrions exprimer notre reconnaissance envers les amis et collègues qui ont apporté leur support moral et intellectuel tout au long de la réalisation de ce modeste travail.

Enfin, nous voudrions exprimer notre gratitude à toutes les personnes qui ont contribué de près ou de loin à la réalisation de ce modeste travail.

DEDICACE.

Je dédie ce modeste travail.

**A mes chers parents ma mère (que dieu la garde pour moi), et mon père (الله
رحمه).*

**A mon frère et ma sœur Ahlam, qu'elle était Toujours à mes côtés.*

**A tous mes amis (es).*

**A toute la famille du Département de Génie Mécanique.*

**Et à tous ceux que je connais de près ou de loin.*

DJERIDA Sondes.

Je dédie ce modeste travail

**A mes chers parents ma mère (رحمها الله). Et mon père (que dieu le garde pour
moi).*

**Pour leur patience, leur amour, leur soutien et leurs encouragements.*

**A mes chères sœurs.*

**A mon binôme Sondes.*

**A mes amies et mes camardes, particulièrement : Sissa.*

Et à tous ceux que je connais de près ou de loin.

ZAMIME Sara.

RESUME.

L'objectif principal de ce master est l'étude théorique d'une Pile à Combustible à échange protons (PEMFC) à alimentation passive fonctionnant dans des conditions ambiantes. Un modèle deux dimensionnel à l'état stationnaire qui tient compte des processus de transfert de masse ainsi que les réactions électrochimiques qui se produisent dans la pile à combustible est développé à la fois pour les PEMFC. Ces PEMFC sont conçus avec une surface active de 25 cm^2 . Les courbes expérimentales de polarisation et de densité de puissance seront comparées aux modèles des prédictions et lorsque cela était possible, les résultats sont expliqués à la lumière de ces modèles de prédictions pour les profils de concentration en Oxygène et pour et l'étude des différentes températures...

L'effet des conditions opératoires (concentration d'alimentation en hydrogène et débit d'air) et des paramètres de conception (surface active, matériaux et épaisseur de la couche de diffusion, épaisseur de membrane) sur les performances de la pile à combustible est évalué. Les modèles développés sont intensivement utilisés pour mettre en place des conditions optimisées conduisant à des performances améliorées pour les PEMFC. Des assemblages d'électrodes membranaires sur mesure avec différentes structures et combinaisons d'épaisseurs des membranes, des couches de diffusion sont conçus et testés afin de sélectionner des conditions de travail optimales avec des concentrations élevées d'hydrogène. Les résultats rapportés dans ce travail de recherche sont pertinents pour la conception, l'optimisation et le fonctionnement des systèmes de piles à combustible.

Mots-clés:

PEMFC, fuel cell, modélisation, simulations...

ABSTRACT.

The main objective of this master is the theoretical study of a passively powered Proton Exchange Fuel Cell (PEMFC) operating under ambient conditions. A two-dimensional steady-state model which takes into account mass transfer processes as well as electrochemical reactions that occur in the fuel cell is being developed for both PEMFCs. These PEMFCs are designed with an active area of 25 cm^2 . The experimental polarization and power density curves will be compared to the prediction models and where possible the

results are explained in the light of these prediction models for the oxygen concentration profiles and for the study of different temperatures ...

The effect of operating conditions (hydrogen feed concentration and air flow) and design parameters (active area, materials and thickness of the diffusion layer, membrane thickness) on the performance of the fuel cell is evaluated. The models developed are extensively used to set up optimized conditions leading to improved performance for PEMFCs. Custom membrane electrode assemblies with different structures and combinations of membrane thicknesses, diffusion layers are designed and tested to select optimal working conditions with high concentrations of hydrogen. The results reported in this research work are relevant for the design, optimization and operation of fuel cell systems.

Keywords:

PEMFC, fuel cell, modeling, simulations...

ملخص.

الهدف الرئيسي من هذه الأطروحة هو الدراسة النظرية لخلية وقود التبادل البروتوني التي تعمل بالطاقة السلبية (PEMFC) والتي تعمل في ظل الظروف المحيطة. يتم تطوير نموذج الحالة المستقرة ثنائي الأبعاد الذي يأخذ في الاعتبار عمليات نقل الكتلة وكذلك التفاعلات الكهروكيميائية التي تحدث في خلية الوقود لكل من PEMFCs. تم تصميم PEMFCs بمساحة نشطة تبلغ 25 سم². تمت مقارنة منحنيات الاستقطاب وكثافة الطاقة التجريبية مع نماذج التنبؤ وحيثما أمكن، يتم شرح النتائج في ضوء نماذج التنبؤ هذه لملفات تركيز الأكسجين ولأجل دراسة درجات الحرارة المختلفة... يتم تقييم تأثير ظروف التشغيل (تركيز تغذية الهيدروجين وتدفق الهواء) ومعلمات التصميم (المنطقة النشطة، المواد وسمك طبقة الانتشار، سمك الغشاء) على أداء خلية الوقود. يتم استخدام النماذج المطورة على نطاق واسع لإعداد ظروف محسنة تؤدي إلى تحسين الأداء لـ PEMFCs. تجمعات أقطاب غشائية مخصصة مع هياكل وتركيبات مختلفة من سماكة الأغشية ، تم تصميم طبقات الانتشار واختبارها لتحديد ظروف العمل المثلى مع تراكيزات عالية من الهيدروجين. النتائج الواردة في هذا العمل البحثي ذات صلة بتصميم أنظمة خلايا الوقود وتحسينها وتشغيلها.

الكلمات الدالة:

PEMFC ، خلية الوقود ، النمذجة ، المحاكاة ...

TABLES DES MATIERES.

REMERCIEMENTS.....	I
DEDICACES	II
RESUME	III
TABLES DES MATIERES	V
LISTE DES TABLEAUX	VIII
LISTE DES FIGURES	IX
NOMENCLATURE	X
ABREVIATION	XIV
INTRODUCTION GENERALE.....	1
CHAPITRE 1 : GENERALITES SUR LES PILES COMBUSTIBLES.	
I.1.Introduction :	4
I.2.Etat de l'art :	4
I.2.1. Introduction.....	4
I.2.1.Etat des recherches :	4
I.3. Définition	6
I.4.Historique.....	7
I.5. Description de la pile à combustible.....	7
I.6.Types de piles à combustible... ..	10
I.6 .1Pile à combustible à membrane d'électrolyte de polymère(P.E.M.F.C)	11
I.6.2 Pile à combustible au Méthanol direct (D.M.F.C)	11
I.6 .3 Pile à combustible alcaline (A.F.C)	12
I.6 .4 Pile à combustible à acide phosphorique (P.A.F.C)	12
I.6 .5 Cellule de combustible de carbonate fondu (M.C.F.C)	13

I.6.6 Pile à combustible à oxyde solide (S.O.F.C)	14
I.7. Principaux composantes d'une pile à combustible.....	15
I.7 .1 Electrolytes (membrane).....	15
I.7 .2 Electrodes.....	16
I.7 .3 Anode.....	16
I.7 .4 Cathode.....	16
I.7 .5 Catalyseur.....	16
I.7 .6 Plaques bipolaires.....	16
I.7 .7 Couche de diffusion (Backing).....	17
I.8. Avantages et inconvénients.....	18
I.8.1.Avantages des piles à combustible.....	18
I.8.2.Inconvénients des piles à combustibles.....	19
I.9.Domaines d'application.....	19
I.9.1.Applications transports.....	19
I.9.2.Applications stationnaires.....	19
I.9.3.Applications portables.....	20
I.9.4.Applications militaires et spatiales.....	20
I.10. Conclusion.....	21

CHAPITRE II : MODELE PHYSIQUE ET MATHEMATIQUE.

II.1.Introduction.....	22
II.2.Modèle Physique.....	22
II.2.1.Géométrie de la structure modélisée.....	22
II.2.2.Hypothèses du modèle.....	24
II.3.Écriture du modèle.....	24
II.4.Tension de la cellule.....	29
II.5.conclusion.....	31

CHAPITRE III : DÉVELOPPEMENT DU MODÈLE PAR COMSOL MULTIPHYSICS.

III.1.Introduction.....	32
III.2.Simulation numérique.....	32
III.3.Historique.....	32
III.4. Principe d'utilisation.....	32
III.5. Algorithme de la Comsol Multiphysics.....	33
III.6.Géométrie et paramètres du modèle.....	37
III.6.Conclusion.....	43

CHAPITRE IV : RESULTATS ET INTERPRETATIONS.

IV.1.Validation du modèle.....	44
IV.2.Effet de température sur la performance de la pile PEMFC	45
IV.2.1.Effet sur la densité de courant dans la membrane la pile PEMFC.....	46
IV.2.2.Effet sur la densité de courant des électrodes la pile PEMC.....	47
IV.2.3.Effet sur la consommation de l'hydrogène et de l'oxygène dans la pile PEMFC.....	48
IV.2.4.Effet de température sur la diffusion de l'eau dans la pile PEMFC.....	51
IV.3.Effet de concentration de l'oxygène O_2 sur la performance de la pile PEMFC.....	52
IV.3.1.Effet sur la densité de courant dans la membrane la pile PEMFC.....	53
IV.3.2.Effet la densité de courant des électrodes la pile PEMC.....	54
IV.3.3.Effet la consommation de l'hydrogène et de l'oxygène dans la pile PEMFC.....	55
IV.3.4Effet sur la diffusion de l'eau dans la pile PEMFC.....	58
IV.4.Conclusion.....	59
CONCLUSION GENERALE ET PERSPECTIVES.....	60
REFERENCES.....	62

LISTE DES TABLEAUX.

Tableau I.1 : Caractéristiques principales des différents types des piles à combustible.....	10
Tableau II.1: Les termes sources des équations gouvernantes.....	29
Tableau III.1: Géométries et paramètres de fonctionnement.....	37
Tableau III.2: Propriétés des électrodes et de la membrane.....	38
Tableau III.3: Propriétés électrochimiques.....	38
Tableau III.4 : Diffusivités binaires à 1atm et à la température de la pile.....	39
Tableau III.5: Conductivité et accroissement d'hydrogène pour des différentes membranes composites.....	40

LISTE DES FIGURES.

Figure I.1. Pile combustible.....	6
Figure I.2. Coupe transversale de la pile à combustible générale.....	8
Figure I.3. Schéma représente la courbe de polarisation des piles à combustible.....	9
Figure I.4. Differentes éléments de pile PEM.....	15
Figure I.5. Membrane de pile à combustible.....	16
Figure I.6. Plaqué bipolaire.....	17
Figure I.7. Couches de diffusion.....	18
Figure II.1. Présentation de différents domaines d'étude de la pile PEMFC.....	23
Figure II.2. Les modèles bidimensionnel des domaines d'étude.....	24
Figure III.1. Sélection de fichier dans Comsol Multiphysique.....	33
Figure III.2. Sélection de bibliothèque d'application.....	33
Figure III.3. Sélection fuel cells.....	34
Figure III.4. Sélection pem_gdl_species_trasport_2d.....	34
Figure III.5. Section Parametres dans Multiphysics comsol.....	35
Figure III.6. Outil «Results » dans comsol Multiphysics.....	35
Figure III.7. Section Paramètres dans Multiphysics Comsol.....	36
Figure III.8. Outil « Results » dans Comsol Multiphysics.....	36
FigureIII.9. Présentation de différents domaines d'étude de la pile PEMFC.....	37
Figure IV.1. Comparaison des résultats de modélisation avec des données expérimentales moyennes.....	44
Figure IV.1.a. Données expérimentales moyennes.....	44
Figure IV.1.b. Résultats de modélisation.....	44
Figure IV.2. Performances de la pile à combustible ; tension (V) en fonction de la densité de courant (A/m^2).....	45

NOMENCLATURE.

a	Surface spécifique de l'anode, (cm^{-1})
A_a	Surface active, (cm^2)
A_1	Superficie totale sans les trous, (cm^2)
A_{holes}	Surface totale des trous, (cm^2)
C	Concentration, (mol/cm^3)
C_1	Concentration à l'interface AFC / ADL, (mol/cm^3)
C_2	Concentration à l'interface ADL / ACL, (mol/cm^3)
C_3	Concentration à l'interface ACL / M, (mol/cm^3)
C_4	Concentration à l'interface M / CCL, (mol/cm^3)
C_5	Concentration à l'interface CCL / CDL, (mol/cm^3)
C_6	Concentration à l'interface CDL / CFC, (mol/cm^3)
$C_{O_2,ref}$	Concentration de référence d'oxygène, (mol/cm^3)
C_p	Capacité thermique spécifique, $(J/mol.K)$
$\partial E / \partial T$	Taux de variation de la force électromotrice, (V/K)
D	Coefficient de diffusion, (cm^2/s)
D^{eff}	Coefficient de diffusion effectif, (cm^2/s)
E_{Cell}	Potentiel d'équilibre thermodynamique, (V)
F	Constante de Faraday, $96500(C/mol)$

G	Energie libre de Gibbs, (J/mol)
g	Accélération de la pesanteur, (cm^2/s)
H	Enthalpie de réaction, (J/mol)
h_{mass}	Coefficient de transfert de masse, (cm/s)
h_{heat}	Coefficient de transfert de chaleur, $(W/cm^2.K)$
I_{Cell}	Densité de courante de la cellule, (A/cm^2)
I_{CH_3OH}	Densité de courant de fuite en raison de crossover méthanol, (A/cm^2)
$I_{0,ref}^{CH_3OH}$	Echanger de densité de courant de méthanol, (A/cm^2)
$I_{0,ref}^{O_2}$	Echanger de densité de courant d'oxygène, (A/cm^2)
j_A	Densité de courant volumétrique, (A/cm^2)
k	Constant dans l'expression de taux,
K	Conductivité thermique, (W/cm^2K)
L	Longueur de la surface active, (cm)
n_d	Coefficient de traînée électro-osmotique de l'eau,
N	Flux molaire, (mol/cm^2s)
P_{air}	Pression de l'air dans la cathode, (atm)
R	Constante des gaz, $8.314(j/mol.K)$
R_{Cell}	Résistance interne de la pile à combustible, (cm^2/s)
R_{cond}	Résistance de conduction, (K/W)
R_{conv}	Résistance de convection, (K/W)

R_{total}	Résistance thermique totale, (K/W)
T	Température, (K)
U_{CH_3OH}	Potentiel d'équilibre thermodynamique de l'oxydation du méthanol, (V)
U_{O_2}	Potentiel d'équilibre thermodynamique de l'oxydation d'oxygène, (V)
V_{Cell}	Tension de cellule, (V)
x_{CH_3OH}	Fraction molaire du Méthanol,
x	Direction de coordonner normale à l'anode. (cm)

Lettres Grecques.

Δ	Variation,
α	Coefficient de transport de l'eau nette,
α_a	Coefficient de transfert anodique,
α_c	Coefficient de transfert cathodique,
δ	Épaisseur, (cm)
ε	Porosité,
η	Surtension, (V)
K	Conductivité ionique de la membrane, (S/cm)
λ	Constant dans l'expression de débit, (mol/cm^3)
μ	Viscosité dynamique, $(g/cm.s)$
ν	Viscosité cinématique, (cm^2/s)
ρ	Densité, (g/cm^3)

ν_{O_2}	Coefficients stœchiométriques d'oxygène dans la réaction de cathode,
ν_{H_2O}	Coefficients stœchiométriques d'eau dans la réaction de cathode,
ν_{cross,O_2}	Coefficients stœchiométriques d'oxygène dans la réaction de cathode,
ν_{cross,H_2O}	Coefficients stœchiométriques d'eau dans la réaction de cathode,
ζ_{CH_3OH}	Coefficient de traînée électro-osmotique de méthanol.

Indices.

A	Anode,
C	Cathode,
H ₂	hydrogène ,
<i>i</i>	Espèces <i>i</i> ,
<i>j</i>	Espèces <i>j</i> ,
H ₂ O	Eau,
O ₂	Oxygène.

Exposants.

AFC	Canal d'Ecoulement Anodique,
ADL	Couche de Diffusion Anodique,
ACL	Couche de Catalyseur Anodique,
M	Membrane,
CCL	Couche de Catalyseur Cathodique,
CDL	Couche de Diffusion Cathodique,
CFC	Canal d'Ecoulement Cathodique.

ABREVIATION.

PAC	Pile A Combustible.
PEMFC	Proton Exchange Membrane Fuel Cell.
M	Membrane.
CDA	Couche de diffusion anodique.
CDC	Couche de diffusion cathodique.

INTRODUCTION GENERALE.

L'hydrogène se montre comme un changement important aux sources d'énergies polluantes et intermittentes. Il est considéré comme un transmetteur énergétique permettant de stocker et de transporter de l'énergie sous sa forme chimique. Bien que la pile à combustible PEMFC soit un transformateur électrochimique fonctionnant selon le principe inverse de l'électrolyse de l'eau, elle est aussi considérée comme l'une des applications les plus courantes de l'hydrogène. L'étude et la compréhension des phénomènes physico-chimiques au coeur d'une cellule de la pile sont indispensables pour la prédiction de ses performances et même de sa durée de vie. Cet travail aider à l'étude des différents phénomènes de transferts couplés au coeur d'une cellule d'une pile PEM (transferts de charge, de masse et de chaleur). Il est le fruit de plusieurs années d'affectation et de traduction à partir des livres et des travaux de thèse réalisés durant des dernières années.

L'augmentation des nouvelles énergies est une bravade importante du 21ème siècle d'une part, faire face au réchauffement climatique et d'autre part, avoir des alternatives aux énergies fossiles. La croissante consommation mondiale en énergie primaire ainsi que la diminution prévue à moyen terme des combustibles fossiles et leur effet non négligeable sur l'environnement, font de l'hydrogène l'un des facteurs énergétique idéal pour remplacer à long terme les énergies fossiles. La production mondiale d'énergie repose aujourd'hui principalement sur les combustibles fossiles comme le pétrole, le charbon et le gaz naturel .l'accroissement de la population mondiale ajoutée au développement économique laisse pressentir le doublement des nécessité énergétiques au niveau mondial. Tant dit que les réserves s'épuisent, nous devons trouver une alternative aux combustibles fossiles, ce qui a poussé les scientifiques à rechercher de nouvelles sources de production d'énergie électrique qu'on appelle aujourd'hui les énergies renouvelables.

Les énergies renouvelables sont de nos jours aux coeurs de l'actualité et considérées comme une solution pour aider l'indépendance énergétique et réduire les émissions de gaz à effet de serre. Une nouvelle origine possible et renouvelable qui apparait comme une technologie prometteuse : est la pile à combustible. Elle est bon en terme de rendement et elle produit de l'énergie sans rejet polluant ni nuisance sonore. La pile à combustible est un système électrochimique qui convertit l'énergie chimique d'une réaction d'oxydoréduction en énergie électrique avec production simultanée d'eau et de chaleur, donc la pile à combustible est un convertisseur d'énergie performant en terme de rendement, qui transforme l'énergie

chimique contenue dans l'hydrogène en énergie électrique d'une part et en chaleur d'autre part .

Parmi les différents types de piles à combustible, la pile à membrane échangeuse de protons (PEMFC) peut être une grande alternative dans les années à venir, en raison de sa température de fonctionnement faible, réponse rapide, basse pression de fonctionnement, haute densité de courant, aucun déchet et zéro émission si elle est alimentée en l'hydrogène pur. Pour une bonne compréhension des caractéristiques, de la simulation et de l'analyse de conception des systèmes d'alimentation PEMFC, un modèle mathématique peut indiquer une description précise de la performance PEMFC est un outil extrêmement utile. Le système PEMFC est un système non linéaire, multi-variable et fortement couplé, ceci entraîne la difficulté de modéliser un tel système par des méthodes conventionnelles. Dans la littérature, divers modèles ont été développés pour le système PEMFC. Malgré de nombreuses avancées dans la modélisation PEMFC ; en raison de diverses hypothèses et approximations faites dans la modélisation, il existe toujours des écarts entre les résultats de simulation et les performances réelles. Afin d'améliorer la précision des modèles pour qu'ils puissent mieux révéler les performances réelles de la PEMFC, il est essentiel d'utiliser une technique d'optimisation pour identifier les paramètres des modèles. Ce modèle décrit avec une précision acceptable le comportement de la pile PEMFC. Certains paramètres empiriques du modèle électrochimique de la pile ne sont identifiés que par des plages de variation. Leur détermination par une méthode d'optimisation est l'un des objectifs de notre travail. Ces dernières années, l'algorithme PSO (Particle swarm optimization) en tant que technique de calcul évolutif a attiré beaucoup d'attention dans la recherche sur les systèmes globaux sera réalisée.

LE BUT DE NOTRE TRAVAIL :

Dans ce travail, un modèle thermodynamique de système de pile à combustible à membrane échangeuse de protons (PEMFC) contenant les principaux composants auxiliaires sera utilisé. Le système est composé d'une pile à combustible PEMFC, d'un échangeur de chaleur, d'un réservoir d'eau, de pompe et de composants de traitement des gaz à l'entrée (humidificateur et compresseur). Une identification des paramètres inconnus du modèle électrochimique d'une PEMFC sera effectuée. Une fois que le modèle sera validé par comparaison à des résultats expérimentaux ; une étude paramétrique en termes de comparaison des performances énergétiques et électriques de la pile à combustible et du système global sera réalisée.

Notre mémoire est organisé comme suit :

Ce volet de recherche commence par une introduction générale.

- Dans le premier chapitre En premier lieu nous présentons une synthèse sur les travaux de recherche effectués sur les piles à combustible à membrane échangeuse de protons PEMFC. Après quoi l'historique de développement de la pile à combustible, les différentes technologies de piles existantes, le principe de fonctionnement, ainsi que la description des éléments constituant la pile à combustible à membrane échangeuse de protons.
- Dans le deuxième chapitre, nous allons d'abord développer, un modèle mathématique unidimensionnelle, semi-empirique qui permet la prédiction de la performance d'une pile à combustible a hydrogéné (PEMFC) aux différentes températures pour une membrane d'échange de proton par l'intermédiaire des paramètres obtenus à partir des méthodes de caractérisation classique.
- Le troisième chapitre est consacré à la présentation des résultats de simulation à l'aide de l'outil COMSOL 5.5. Ainsi que les résultats d'optimisation.
- Le quatrième chapitre on expose les résultats obtenus avec leurs discussions.
- Et ce travail sera clôturé par une conclusion générale et des perspectives plus une bibliographie et des annexes.

CHAPITRE I : GENERALITES SUR LES PILES A COMBUSTIBLE.

I.1.Introduction :

Dans ce chapitre nous présentons tout d'abord état de l'art ensuite définitions, l'historique de développement de la pile à combustible, les différentes technologies de piles existantes, le principe de fonctionnement, ainsi que la description des éléments constituant la pile à combustible à membrane échangeuse de protons.

I.2.Etat de l'art :

Au cours des dernières années, l'Université de Blida 1, en particulier le Département de mécanique, a été témoin de recherches et des activités de la pile à combustible dirigée par le **Ph. D. ALLALI A**, qui a contribué de manière significative à améliorer et à définir le domaine dont lequel les étudiants ont participé activement. Dans la littérature plusieurs chercheurs se sont intéressés à l'étude de la pile à combustible de type PEMFC. Nous citons dans ce qui suit quelques travaux de recherches.

I.2.1.ETAT DES CHERCHES :

Plusieurs chercheurs se sont intéressés à l'étude de la pile à combustible de type PEMFC en utilisant des différentes approches et modèles mathématiques qui peuvent contribuer à maîtriser les paramètres de fonctionnement et de conception de la pile. Nous citons dans ce qui suit quelques travaux de recherches sur les piles à combustible PEMFC.

Dr. ABDI H. : a présenté un modèle bidimensionnelle basé sur les lois de conservation et des équations électrochimiques. Le modèle mathématique permet de mettre en lumière des impacts des paramètres de fonctionnement sur le comportement de la PEMFC. Le but recherché est d'avoir une densité de puissance la plus élevée et une prolongation de la durée de vie de la cellule PEM. Les paramètres opératoires de la PEMFC ont été aussi optimisés. Dans un premier temps l'objectif était d'obtenir les meilleures performances en termes de densité de puissance. Le problème est formulé comme étant un problème mono-objectif ou l'algorithme PSO a été adopté. Par la suite, les performances en termes de densité de puissance et une prolongation de la durée de vie de la cellule ont été considéré. Le problème a été traité comme étant un problème multi-objectif. L'algorithme Non-dominate Sorting Genetic Algorithm II (NSGA-II) a été utilisé. L'auteur a pu déterminer des solutions de compromis. [1]

Dr. EL ABBASSI A. : Le travail présenté concerne une pile PEMFC. Les résultats de cette étude paramétrique montrent que, la pile PEMFC est très sensible à deux facteurs principaux: la pression partielle effective dans la cathode, ainsi que la température de fonctionnement. Les résultats d'un cas de base ont été présentés et comparés à ceux obtenus par une optimisation basé sur l'utilisation de l'algorithme génétique. [2]

Dr. ATTIA E : a présenté une méthode d'optimisation Salp Swarm Optimizer (SSO) pour identifier les valeurs optimales des paramètres inconnus du modèle électrochimique d'une pile PEMFC. Une fonction objectif est formulée pour adapter les résultats obtenus par le modèle proposé aux données de tension mesurées. Deux cas d'étude ont été considérés pour des piles PEMFC déjà commercialisé. L'auteur a montré que la méthode utilisée convergence rapidement et les résultats obtenus sont plus meilleures comparativement à d'autres méthodes d'optimisation. Il a recommandé que la méthode SSO soit un outil efficace pour résoudre d'autres problèmes d'optimisation plus complexes. [3]

Dr. ALIREZA A et al : ont présenté un modèle électrochimique de pile à combustible à membrane échangeuse de protons (PEMFC). Afin d'améliorer la précision de ce modèle et pour qu'il reflète mieux les performances réelles de la PEMFC, les paramètres sont optimisés au moyen de l'algorithme d'optimisation par essaim particulaire modifié (Modified Particle Swarm Optimization algorithm)(MPSO). Le MPSO est une version modifié de l'algorithme PSO ou le coefficient d'inertie proposé est calculé en fonction de la distance de la position actuelle de la particule par rapport à la meilleure solution de l'essaim entier. Les résultats obtenus par le modèle correspondent bien aux données expérimentales. [4]

Dr. YUCEFI A et al : Ont présenté une modélisation mathématique d'une pile PEMFC qui prend en considération l'effet de la température et de la pression sur les caractéristiques de la pile. La simulation sous l'environnement Matlab a permis d'obtenir un rendement compris entre 30% et 45%. Le modèle est utilisé pour des applications hybrides. [5]

Dr. AMROUCHE F et al : Dans ce travail l'auteur présente un modèle semi empirique basé sur les travaux de " Amphlett et al". Le modèle a été modifié et validé par des résultats des travaux expérimentaux effectués au "Laboratoire Hydrogène Solaire - CDER". La modification du modèle électrochimique de " Amphlett et al". a été effectuée par la

proposition d'un nouveau coefficient empirique lié au modèle physique des piles utilisées. De plus, une modification de la modélisation de la cinétique électrochimique et de la conduction électrique des piles à combustible PEMFC. Ceci a permis d'exploiter et d'améliorer les modèles existants, grâce à l'optimisation et la validation des concepts selon des approches diverses dans des conditions optimales de fonctionnement de ces piles à combustible. [6]

Dr. BELHOUT K et al. : L'objectif de cette étude concerne la modélisation numérique, bidimensionnelle, stationnaire d'une pile à combustible PEMFC pour étudier la concentration en masse, la distribution des vitesses de réactifs, la distribution de la densité de courant, et les courbes de densité de courant à des tensions de fonctionnement différentes. Le modèle comprend le transport de gaz, le transport de charges dans les couches de diffusion. Toutes les équations du modèle sont résolues par la méthode des éléments finis. Les résultats de la modélisation piles à combustible PEM à des tensions de fonctionnement différentes sont ensuite comparées les unes aux autres. [7]

I.3.Définition :

Une pile à combustible est une pile dans laquelle la génération d'une tension électrique se fait grâce à l'oxydation sur une électrode d'un combustible réducteur (par exemple l'hydrogène) couplée à la réduction sur l'autre électrode d'un oxydant, tel que l'oxygène de l'air.

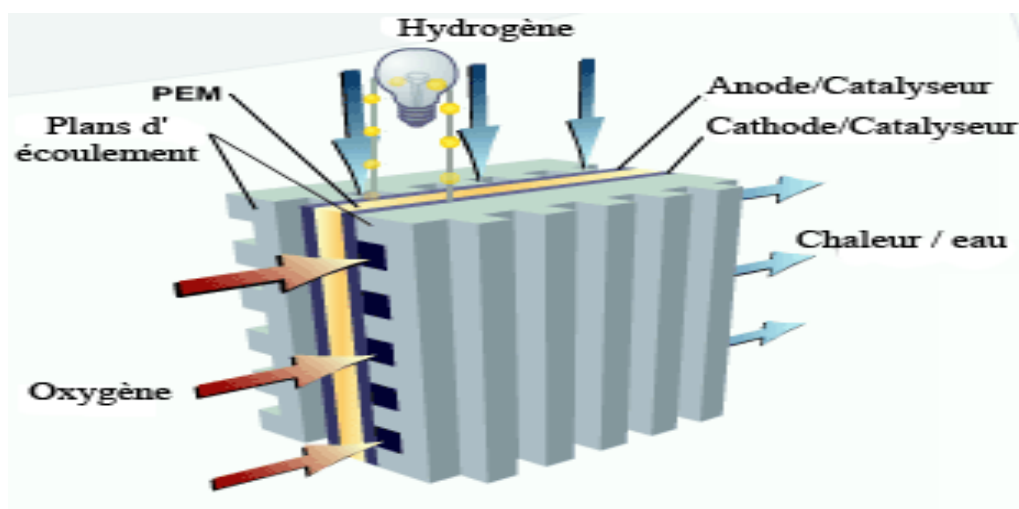


Figure I.1: Pile combustible.

I.4.Historique :

Lorsqu'en 1802 Sir Henry David énonce le principe de l'électrolyse inverse, il met en évidence la possibilité de produire de l'électricité et de la chaleur à partir de la réaction chimique entre l'oxygène et l'hydrogène. Partant de ce procédé, Sir William Grove expérimenta en 1839 la première PAC. En 1930, F. T. Bacon travailla sur une pile hydrogène/oxygène fonctionnant en milieu KOH aqueux. Dans les années 1960 et 1970, les PAC ont ensuite fait l'objet de nombreux travaux qui ont abouti aux applications spatiales : alimentation en énergie électrique des capsules Gemini (pile PEM), Apollo (pile alcaline) et de la navette spatiale. Au début des années 70, avec la mise au point de membranes polymères solides échangeuses de protons (à base de Nafion), par Dupont de Nemours, la technologie des piles PEM connut un développement important. Un contrat avec le département canadien de la défense pour la propulsion d'un sous-marin de poche est à l'origine des recherches sur les PAC effectuées dans les années 80 par la société Ballard, aujourd'hui leader dans le domaine de la pile PEM. Les travaux réalisés sur les matériaux mis en oeuvre dans les piles et sur l'intégration du système PAC ont ensuite donné lieu à des réalisations plus compactes. Les nouveaux générateurs ont alors permis d'envisager des applications potentielles dans le domaine de la fourniture d'énergie délocalisée et dans celui des transports. Depuis une dizaine d'années, de petites unités de production d'électricité et de chaleur fonctionnant à partir d'une PAC sont implantées un peu partout dans le monde. De plus, les grands constructeurs automobiles ont désormais tous présenté un ou plusieurs démonstrateurs à PAC. [8]

I.5.Description de la pile à combustible : [9]

Les piles à combustible fonctionnent via une réaction électrochimique qui convertit l'énergie chimique stockée dans un combustible directement en électricité. Cette conversion implique une étape de transfert d'énergie, où l'énergie de la source de carburant est transmise aux électrons constituant le courant électrique. Ce transfert à un taux fini et doit se produire au niveau d'une interface ou d'une surface de réaction. Il est clair que la quantité d'électricité produite dépend de la surface de réaction ou de la surface interrassiale disponible pour le transfert d'énergie. Les plus grandes surfaces entraînent des courants plus importants. Pour fournir de grandes surfaces de réaction, les piles à combustible sont transformées en structures planes minces et les électrodes utilisées sont très poreuses. Un côté est approvisionné en carburant (Côté anode) et l'autre en oxydant (Côté cathode). Une fine couche d'électrolyte sépare le combustible et les électrodes oxydantes et assure que les deux demi-réactions se

produisent isolées les unes des autres. Il existe une variété de types de piles à combustible qui utilisent différentes réactions électrochimiques, mais le processus général est toujours le même. La figure I.2 montre une vue en coupe transversale d'une pile à combustible générale illustrant les principales étapes de la production d'électricité.

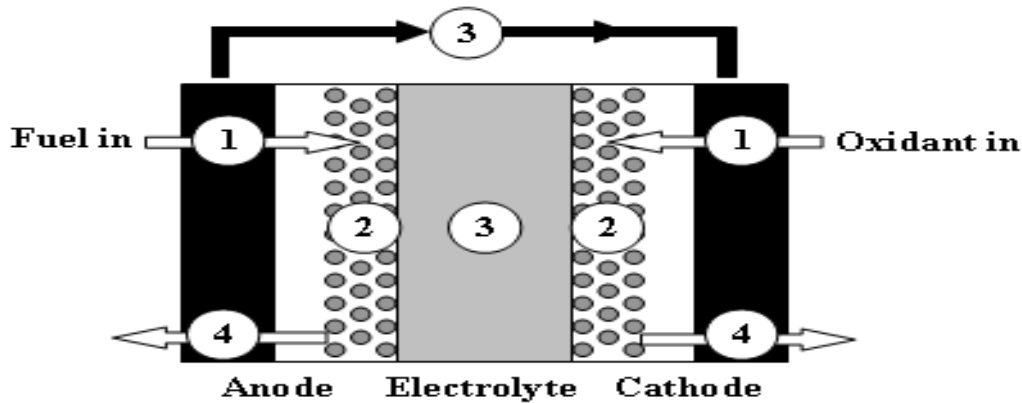


Figure I.2: Coupe transversale de la pile à combustible générale.

Dans l'étape 1, les réactifs, combustible et oxydant, sont délivrés dans la pile à combustible. Bien que cette étape semble simple, elle peut être assez complexe, car pour qu'une pile à combustible produise de l'électricité, elle doit être continuellement alimentée en combustible et en oxydant et lorsqu'elle est utilisée à des densités de courant élevées, la demande de réactifs est très élevée. La distribution des réactifs est plus efficace en utilisant des plaques de champ d'écoulement qui ont de nombreux canaux ou rainures fines pour acheminer le flux de gaz et le répartir sur la surface de la pile à combustible. La forme, la taille et les canaux d'écoulement du modèle peuvent influencer sur les performances de la pile à combustible.

Dans l'étape 2, les réactions électrochimiques ont lieu au niveau des électrodes. Le courant généré par la pile à combustible est directement lié à la rapidité avec laquelle les réactions électrochimiques se déroulent. Des réactions électrochimiques rapides entraînent une sortie de courant élevée de la pile à combustible. Pour augmenter la vitesse et l'efficacité des réactions électrochimiques, des catalyseurs sont utilisés. Les réactions électrochimiques survenant à l'étape précédente produisent ou consomment des ions et des électrons. Les ions et les électrons produits dans une électrode doivent être consommés à l'autre.

Dans l'étape 3, les ions sont conduits à travers l'électrolyte et les électrons à travers le circuit externe. En plus de l'électricité, toutes les réactions des piles à combustible génèrent au moins un produit et de la chaleur. Si ces produits ne sont pas éliminés, ils s'accumuleront au fil du temps, empêchant le nouveau combustible et l'oxydant de réagir.

A l'étape 4, les produits formés dans les réactions électrochimiques sont retirés de la pile à combustible. Une pile à combustible idéale fournirait n'importe quelle quantité de courant tout en maintenant une tension constante déterminée par la thermodynamique. Dans les piles à combustible réelles, cependant, la sortie de tension réelle est inférieure à la tension prédite thermodynamiquement idéale en raison de pertes irréversibles. Il y a trois types principaux de pertes (activation, région de transport ohmique et de masse) chacune de celles-ci est associées à l'une des étapes de base mentionnées ci-dessus. Chaque type de perte peut être le facteur de perte prédominant en fonction de la tension de la cellule et de la densité de courant. La perte d'activation est due à la réaction électrochimique car les réactions prennent plus d'énergie au catalyser que dans le cas idéal. La barrière d'activation est le principal facteur contribuant à l'inefficacité lors de l'exploitation d'une cellule à haute tension et faible densité de courant. Au milieu de la plage de fonctionnement, la perte prédominante est la perte ohmique et est due à la conduction ionique et électronique. À des densités de courant très élevées, la perte majeure est la perte de concentration due au transport de masse. Un exemple d'une courbe de polarisation de pile à combustible avec les trois pertes est montré à la Figure. I.3.

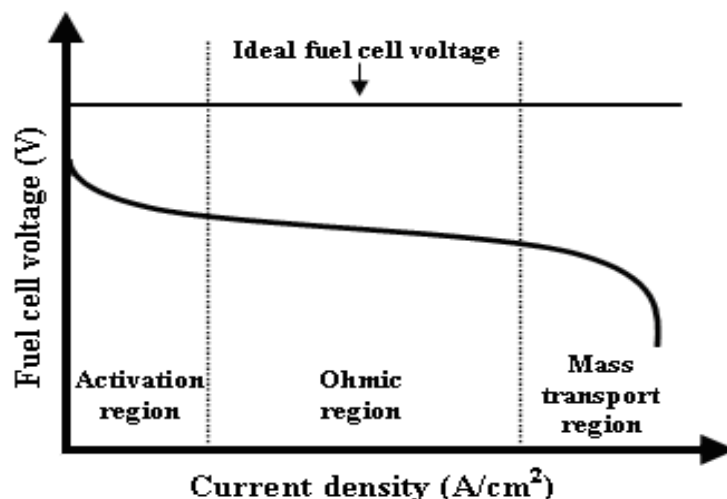


Figure I.3: Schéma Représente la courbe de polarisation des piles à combustible.

I.6.Types de piles à combustible :

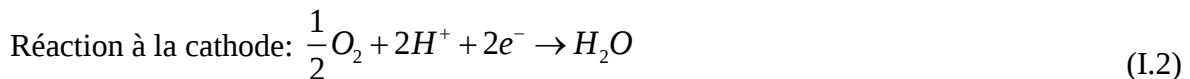
Les piles à combustible sont classées par leur matériau électrolytique. Actuellement il existe plusieurs types des piles à combustible qui sont développées pour différentes applications. Bien que tous les types de piles à combustible sont basés sur les mêmes principes électrochimiques sous-jacents, ils fonctionnent tous à des températures différentes, incorporent des matériaux différents et ils diffèrent souvent par leur tolérance au carburant et leurs caractéristiques de performance, comme le montre le tableau I.1.

Tableau I.1 : Caractéristiques principales des différents types des piles à combustible. [10]

Type de pile à combustible	Électrolyte	La charge transportée	Température de fonctionnement	Compatibilité carburant
1	2	3	4	5
PEMFC	Membrane polymère	H^+	20-80°C	Hydrogène
DMFC	Membrane polymère	H^+	20-80°C	Méthanol
AFC	Hydroxyde de potassium liquide	OH^-	60-220°C	Hydrogène
PAFC	Acide phosphorique liquide	H^+	200°C	Hydrogène
MCFC	Carbonate fondu	CO_3^{2-}	650°C	Hydrogène et Méthane
SOFC	Céramique	O^{2-}	600-1000°C	Hydrogène, Méthane et Carbone monoxyde

I.6.1.Pile à combustible à membrane d'électrolyte de polymère (PEMFC) : [11]

Les piles à combustible à électrolyte polymère utilisent une membrane polymère comme électrolyte. Ce polymère est perméable aux protons qui sont les porteurs de charge ioniques. Le combustible utilisé dans ce type de piles à combustible est l'Hydrogène et l'Oxygène pur oxydant ou de l'air. Au niveau de l'anode, la molécule d'Hydrogène est divisée en ions Hydrogène (protons) et électrons. Les protons passent à travers l'électrolyte jusqu'à la cathode pendant que les électrons circulent à travers un circuit externe et produisent de l'énergie électrique. L'Oxygène est fourni à la cathode et se combine avec les électrons et les protons pour produire de l'eau. Les réactions aux électrodes sont les suivantes:



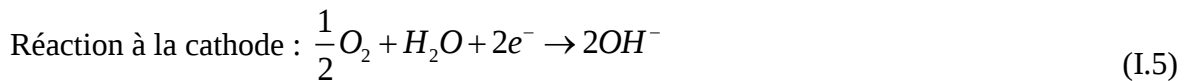
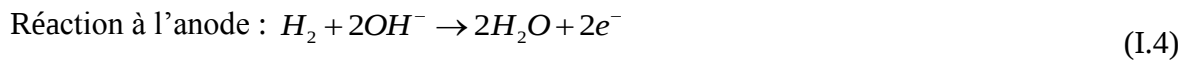
Par rapport aux autres types de piles à combustible, les PEMFC génèrent plus de puissance pour un volume ou un poids de pile à combustible donné, ce qui les rend compacts et légers. La température de fonctionnement est inférieure à 100°C, ce qui permet un démarrage rapide. Comme ce type de pile à combustible utilise un matériau solide comme électrolyte, l'étanchéité des gaz d'anode et de cathode est plus simple et donc moins coûteuse à fabriquer. L'électrolyte solide présente moins de problèmes de corrosion, ce qui entraîne une durée de vie plus longue des piles et des piles. En raison de leurs avantages, les PEMFC_s sont considérés comme le meilleur type de pile à combustible en tant que source d'énergie pour les moteurs à combustion interne Otto et Diesel.

I.6.2.Pile à combustible au méthanol direct (DMFC) :

La pile à combustible au Méthanol direct est similaire à la PEMFC car l'électrolyte est un polymère et le porteur de charge est l'ion Hydrogène (proton). Cependant, la DMFC extrait de l'Hydrogène du Méthanol liquide, éliminant ainsi le besoin d'un reformeur. Dans ce point, aucune autre information n'est donnée sur la DMFC puisque le chapitre 2 est consacré à une explication détaillée de ce type de pile à combustible.

I.6.3.Pile à combustible alcaline (AFC) :

Les Piles à combustible Alcalines utilisent un électrolyte qui est une solution aqueuse d'Hydroxyde de Potassium (KOH) retenue dans une matrice poreuse stabilisée. La concentration de la solution peut varier avec la température de fonctionnement de la Pile à combustible, qui varie de 65 à 220°C. Le porteur de charge pour un AFC est l'ion Hydroxyle (OH⁻) qui traverse l'électrolyte de la cathode à l'anode où il réagit avec l'Hydrogène pour produire de l'eau et des électrons. L'eau formée à l'anode migre vers la cathode pour régénérer les ions Hydroxyles. Les réactions dans ce type de pile à combustible produisent de l'électricité et de la chaleur. Les réactions qui se produisent du côté de l'anode et de la cathode sont :



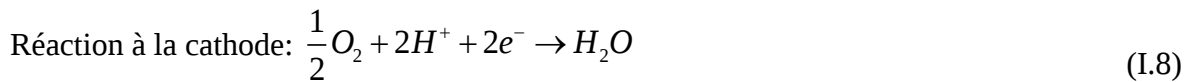
Les Piles à combustible alcalines sont l'une des technologies les plus développées et, comme il est mentionné plus haut, elles sont utilisées depuis le milieu des années 1960 par la NASA dans le cadre des programmes Apollo et de la navette spatiale.

Les AFC sont les piles à combustible les moins chères à fabriquer car le catalyseur requis au niveau des électrodes peut être l'un quelconque d'un certain nombre de matériaux différents qui sont relativement peu coûteux par rapport aux catalyseurs requis pour d'autres types de piles à combustible. Leur sensibilité à l'empoisonnement, qui nécessite l'utilisation d'Hydrogène pur, est un obstacle insurmontable. À l'inverse, les AFC fonctionnent à des températures relativement basses et sont parmi les piles à combustible les plus efficaces, leurs caractéristiques qui permettraient une source d'énergie de démarrage rapide et un rendement énergétique élevé.

I.6.4.Pile à combustible à acide phosphorique (PAFC) :

Les piles à combustible acide Phosphorique (PAFC) utilisent comme électrolyte l'acide Phosphorique qui peut atteindre des concentrations élevées. La conductivité ionique de l'acide Phosphorique est faible à basse température, tandis que les PAFC fonctionnent à des températures plus élevées. Le porteur des charges dans ce type de pile à combustible est l'ion

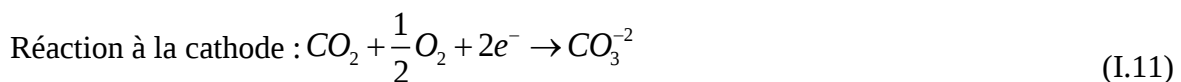
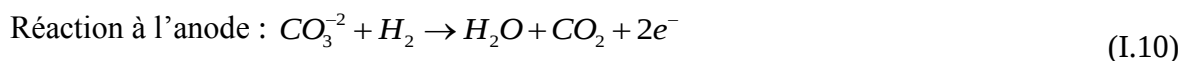
Hydrogène (proton). Similaire à la PEMFC, l'Hydrogène introduit à l'anode est divisé en protons et électrons. Les protons migrent à travers l'électrolyte et se combinent avec l'Oxygène, habituellement de l'air, à la cathode pour former de l'eau. Les électrons sont acheminés à travers un circuit externe où ils peuvent effectuer un travail utile. Ces réactions produisent de l'électricité et de la chaleur en tant que produit. Les réactions qui se produisent du côté de l'anode et de la cathode sont:



Le rendement élevé du PAFC en fonctionnement en cogénération est un avantage de ce type de pile à combustible. En outre, le CO₂ (Dioxyde de Carbone) n'affecte pas l'électrolyte de la cellule et peut donc être facilement utilisé avec un combustible fossile réformé. Une construction simple, une faible volatilité électrolytique et une stabilité à long terme sont des avantages supplémentaires. De telles caractéristiques ont fait du PAFC un bon candidat pour les applications stationnaires précoces.

I.6.5.Cellule de combustible de carbonate fondu (MCFC) :

Les piles à combustibles de carbonate fondu (MCFC) fonctionnent différemment des autres piles à combustible car elles utilisent un électrolyte composé d'un mélange fondu de sels de carbonate. Les deux mélanges qui pouvaient être utilisés sont le carbonate de Lithium et le Carbonate de Potassium. Pour faire fondre les sels de Carbonate et atteindre une grande mobilité ionique à travers l'électrolyte, les MCFC_s fonctionnent à des températures élevées. Lorsqu'ils sont chauffés, ces sels fondent et deviennent conducteurs d'ions Carbonate (CO₃⁻²). Ces ions s'écoulent de la cathode à l'anode où ils se combinent avec l'Hydrogène pour donner de l'eau, du Dioxyde de Carbone et des électrons. Ces électrons traversent un circuit externe vers la cathode, générant de l'électricité et de la chaleur. Les réactions qui se produisent du côté de l'anode et de la cathode sont les suivantes :

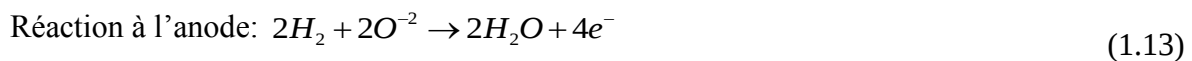




La pile à combustible de Carbonate fondu (MCFC) appartient à la catégorie des Piles à Combustible à haute température. À la température de fonctionnement plus élevée, le reformage de carburant du gaz naturel peut se produire à l'interne, éliminant le besoin d'un transformateur de carburant externe. Des avantages supplémentaires comprennent la possibilité d'utiliser des matériaux standard pour la construction, tels que des tôles en acier inoxydable, et permettent l'utilisation de catalyseurs à base de Nickel sur les électrodes. La chaleur produite par un sous-produit provenant d'un MCFC peut être utilisée pour générer de la vapeur à haute pression qui peut être utilisée dans de nombreuses applications industrielles et commerciales. Cependant, la température élevée nécessite un temps important pour atteindre les conditions de fonctionnement et répond lentement aux demandes d'énergie changeantes. Ces caractéristiques rendent les MCFC plus adaptés aux applications à puissance constante. L'électrolyte carbonate peut également causer des problèmes de corrosion de l'électrode. De plus, comme le CO₂ est consommé à la cathode et transféré à l'anode, l'introduction du CO₂ et son contrôle dans le flux d'air devient un problème important pour obtenir une performance optimale.

I.6.6.Pile à combustible à oxyde solide (SOFC) :

La pile à combustible à oxyde solide (SOFC) est actuellement la pile à combustible à plus haute température qui est en développement. Pour fonctionner à de telles températures élevées, l'électrolyte est un matériau céramique mince et solide (Oxyde Solide) qui est conducteur aux ions oxygène (O²⁻), le porteur de charge dans la SOFC. À la cathode, les molécules d'Oxygène de l'air sont divisées en ions d'oxygène avec l'addition de quatre électrons. Les ions d'Oxygène sont conduits à travers l'électrolyte et se combinent avec l'Hydrogène à l'anode, libérant quatre électrons. Les électrons parcourent un circuit externe fournissant de l'énergie électrique et produisant de la chaleur.



Le fonctionnement à haute température de la SOFC leur permet de tolérer des combustibles relativement impurs, tels que ceux obtenus à partir de la gazéification du

Charbon ou des gaz provenant de procédés industriels et d'autres sources. Cependant, les températures élevées exigent des matériaux de construction plus coûteux et entraînent un temps considérable nécessaire pour atteindre la température de fonctionnement et une réponse lente aux changements de la demande d'électricité.

Les SOFC sont donc considérées comme un candidat de premier plan pour les applications de haute puissance, y compris les centrales électriques industrielles et à grande échelle.

I.7.Principaux composants d'une pile à combustible :

La cellule de base d'une pile à combustible est constituée d'un empilement de deux électrodes poreuses séparées par un électrolyte solide. De chaque côté de l'électrode, on trouve deux couches de diffusion et deux plaques bipolaires. [12]

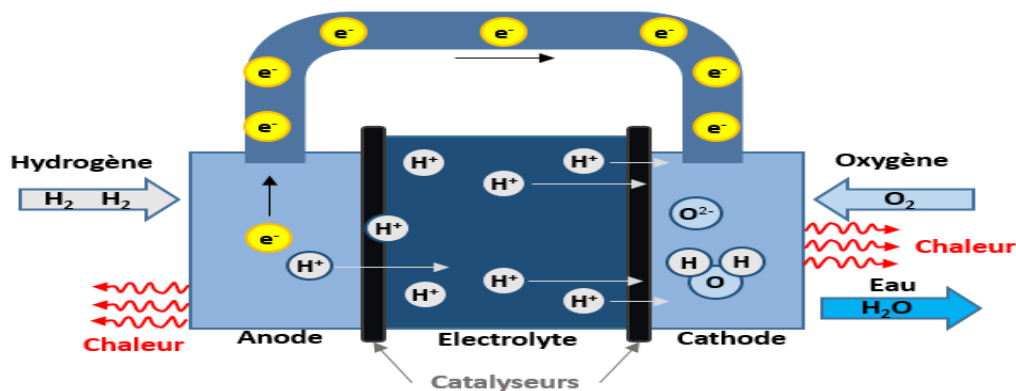


Figure I.4: Différents éléments de pile PEM.

Une pile à combustible est constituée :

I.7.1.Electrolytes (membrane):

L'électrolyte, ou membrane, constitue un des éléments principaux de la pile PEMFC. Son rôle est multiple et les performances de la pile dépendent fortement de ses caractéristiques mécaniques, électriques et chimiques. Elle assure notamment la séparation des deux compartiments anodique et cathodique. [14]



Figure I.5: Membrane de pile à combustible.

I.7.2. Electrodes :

Les électrodes doivent pouvoir assurer le transfert des protons depuis les sites catalytiques d'oxydation de l'hydrogène vers les sites de réduction de l'oxygène via la membrane. De même, les électrons produits par l'anode doivent pouvoir être évacués puis redistribués à la cathode par le circuit extérieur. Ainsi, les électrodes doivent assurer une bonne conductivité ionique et électronique. Pour cela, elles sont constituées d'un mélange intime de carbone (Conducteur électronique), d'électrolyte (conducteur protonique) et de platine (catalyseur). [15 et 16]

Anode: On réalise l'oxydation de l'hydrogène, selon la réaction précédente (pour une pile acide).

Cathode: On réalise la réduction de l'oxygène, selon la réaction précédente.

Catalyseur: pour que les deux demi-réactions soient possibles, il faut un catalyseur (c'est-à-dire un composé capable d'augmenter la vitesse de réaction, sans être consommé par lui-même). Afin que le catalyseur puisse travailler efficacement, la création de zones actives doit être assurée. Ces zones mettent en présence à la fois le gaz réactif, les électrons, les protons et le catalyseur, cela se réalise au niveau de l'interface électrode-électrolyte. [17]

1.7.3. Plaques bipolaires :

Ces plaques sont dites bipolaires car elles assurent simultanément l'alimentation en gaz (H_2 et O_2) des deux cellules les encadrant dans le cas d'empilement de cellules. Ainsi, une plaque apporte l'oxygène du côté cathodique et l'hydrogène du côté anodique de la cellule

suivante et l'évacuation de l'eau produite par la réaction. Ces plaques sont composées de graphite à haute densité. Elles, sont disponibles commercialement mais à des prix très élevés. [16 et 17]

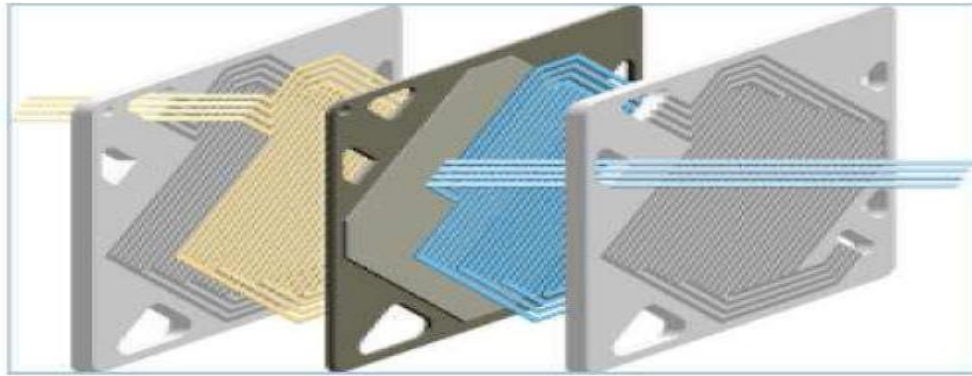


Figure I.6 : Plaque bipolaire.

1.7.4. Couches de diffusion(Backing) :

Entourant les électrodes, les couches de diffusion, d'une épaisseur comprise entre 300 μm et un millimètre ont un triple rôle. Elles doivent tout d'abord permettre la distribution et la diffusion des réactifs depuis les plaques bipolaires jusqu'aux électrodes, ainsi que permettre le transfert des électrons de l'anode ou de la cathode vers les plaques bipolaires. Elles assurent enfin un rôle essentiel dans la gestion de l'eau en permettant à la fois qu'elle soit évacuée et qu'elle humidifie la membrane. Elles doivent donc être à la fois conductrices de courant et de structure poreuse. La porosité peut varier entre 40 et 80% selon leur nature et leur application. La nature poreuse de ces supports permet aux réactifs de diffuser, ce qui leur permet d'entrer plus efficacement en contact avec la surface entière de l'électrode puis de la membrane. [18]

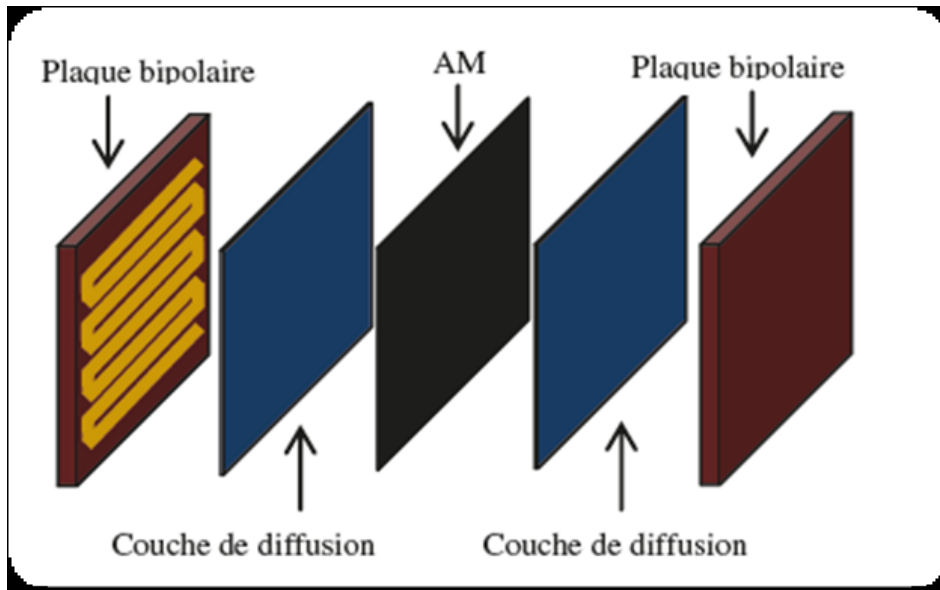


Figure I.7 : Couches de diffusion.

I.8. Avantages et inconvénients des piles à combustible :

Les avantages et inconvénients des piles à combustible dépendent bien entendu du type de pile considéré et donc de l'application envisagée.

I.8.1. Avantages des piles à combustible :

Les avantages les plus importants sont les suivants :

Très bon rendement énergétique (supérieur à 50 %) : en comparaison avec moteurs à combustion interne (25-30%). l'énergie non convertie en énergie électrique est émise sous forme de chaleur et est évacuée sous forme d'eau chaude ou de vapeur. Ceci est un point fort dans le cas des applications domestiques, car la pile à combustible est capable de fournir de l'électricité et également de l'eau chaude qui pourra être utilisée pour le chauffage domestique ce qui va augmenter le rendement de la pile à combustible jusqu'à 80-90%.

Protection de l'environnement : 99 % en moins de monoxyde de carbone en comparaison avec un véhicule à essence. [19]

Efficacité : les piles à combustible sont généralement plus efficaces que les moteurs à combustion à piston ou turbine fondée. Un autre indice pour cela est que les petits systèmes peuvent être tout aussi efficaces que les grands.

Modulabilité : Les piles à combustible ont la caractéristique importante d'être très modulables dans le sens où elles peuvent être facilement de tailles différentes. La taille d'une pile à combustible peut facilement être augmentée ou réduite et le rendement électrique est relativement indépendant de la taille de la pile. [20]

Silence : Les piles à combustible sont très calmes, même ceux qui ont d'importantes transformations au carburant supplémentaire équipement. Ceci est très important tant dans les applications portables que dans les productions combinées locales d'énergie et de chaleur. [21]

I.8.2.Inconvénients des piles à combustibles :

Les inconvénients associés aux piles à combustible sont liés à leur manque de développement : [22 et 23]

Coût trop élevé de production et de maintenance: Le coût qui est très élevé à cause de l'utilisation des métaux nobles comme le platine au niveau des électrodes et à cause du prix de fabrication de la membrane et des plaques bipolaires.

Poids et Volume : La durée de vie : La plupart des piles sont encore des prototypes, on a donc peu de renseignements sur la durée de vie des piles. Les contraintes diffèrent selon l'application :

Automobile : quelques milliers d'heures.

Stationnaire : au moins 40 000 heures

Le manque d'infrastructures au niveau de l'approvisionnement en carburant (hydrogène, méthane). Ceci nécessite la mise en place de systèmes de production, de transport et de distribution. Cependant, la mise en place de tels systèmes ne peut se faire avant la commercialisation de la PAC.

I.9.Domains d'application :

Les piles à combustibles sont utilisées dans une large gamme de domaines qui seront présentés ci-dessous:

I.9.1.Applications transports :

Parmi les applications des piles à combustible dans le domaine de l'automobile, on peut citer la PEMFC pour la propulsion du véhicule (20 à 50 kW) et les piles alcalines pour l'alimentation en électricité des appareils de bord (climatisation, appareils électroniques). [24]

I.9.2.Applications stationnaires :

L'avantage des piles à combustible dans ce domaine est la production simultanée de l'électricité et de la chaleur, les types SOFC et MCFC sont mieux adaptées à la cogénération

d'électricité et de chaleur. La pile à combustible commence à intéresser de nombreux industriels de ce secteur, en particulier en France, Japon, Etats-Unis, etc. L'activité est centrée sur deux grands domaines d'applications:

- Production collective (200 kW à quelques MW).
- Production domestique ou individuelle (2 à 7 kW). [25]

I.9.3.Applications portables :

Pour des applications portables, les piles à combustible sont en concurrence avec les batteries. On espère gagner en temps d'autonomie et pouvoir recharger plus vite des réserves d'énergie épuisées. Les piles utilisées dans ce domaine doivent être extrêmement robustes et peu sensibles aux conditions extérieures, seulement deux types de piles sont susceptibles d'avoir des applications portables, les PEMFC et DMFC, qui sont caractérisées par leur faible température de fonctionnement variable entre 60 et 80°C, ce qui diminue les problèmes de gestion thermique et fonctionnent à température ambiante. [26]

I.9.4.Applications militaires et spatiales :

Les spécificités des piles peuvent être utilisées pour ces secteurs de pointe que sont le militaire et le spatial. La NASA a utilisé des piles à combustible de type AFC pour alimenter en électricité les circuits de navettes spatiales notamment au cours du programme GEMINI et des missions APPOLO. Il est maintenant question qu'ils choisissent les PEMFC dans des applications futures. L'armée allemande a aussi développé un sous-marin fonctionnant grâce à des PAC.

I.10.Conclusion :

Nous venons d'étudier à travers ce chapitre des généralités sur la PAC ainsi que l'état de l'art. Nous avons passé en revue les constituants de la PEMFC. L'intérêt pour la pile à combustible particulièrement la PEMFC a connu une croissance importante qui se poursuivra sûrement dans les années à venir. Les avantages de la pile à combustible sont nombreux. Ce générateur produit sans bruit de l'énergie électrique et thermique et ne produisant que de l'eau et ne rejetant aucun gaz à effet de serre.

Les points freinant la commercialisation des piles à combustible peuvent être résumé par la durée de vie, la difficulté de maîtrise de la gestion de l'eau, liée surtout aux conditions d'hydratation convenable de la membrane, à cela s'ajoute le cout élevé des matériaux utilisés dans la fabrication et aux difficultés d'usinage surtout des canaux de distribution des gaz et de refroidissement sur les plaques bipolaires.

CHAPITRE II : MODELE PHYSIQUE ET MATHEMATIQUE.

II.1.Introduction :

L'amélioration des performances des piles à combustibles PEM doit passer par une meilleure compréhension des différents phénomènes internes ainsi que leurs interactions en son sein. Dans ce sens, la modélisation est un outil très puissant pour l'étude de ces interactions et de leurs rôles, ainsi que pour la prédiction et l'amélioration des conditions opératoires.

Ce chapitre décrit un modèle complet, stationnaire, monophasique (l'eau produit à l'état vapeur) avec le champ d'écoulement dans la totalité de la cellule du type PEM à géométrie 2D. Plus précisément, il s'agit de construire un modèle qui prend en compte la plupart des phénomènes interagissant au sein de la cellule, après une présentation de la structure de la cellule, les équations de transport de masse et de chaleur régissant le fonctionnement et les différentes propriétés de l'écoulement sont présentées. A travers ces équations adaptées au modèle.

II.2.Modèle Physique :

Les phénomènes physiques actifs rencontrés dans les différentes zones de la pile sont :

Le transport dans les milieux continu et poreux qui comportent les équations de conservation (quantité mouvement, chaleur, et masse) ainsi que les relations empiriques, avec des termes sources qui expliquent les réactions électrochimiques et l'effet Joule.

Pour pouvoir construire le modèle mathématique d'une cellule à géométrie planaire, il faut d'abord définir une image géométrique macroscopique, sur laquelle nous plaçons le système de coordonnées et nous définissons le système d'équations composant le modèle.

II.2.1.Géométrie de la structure modélisée : [27]

Les différents éléments du modèle sont présentés et détaillés dans ce paragraphe. La géométrie d'une cellule du modèle PEMFC se compose de deux canaux d'écoulement rectiligne coté cathodique et anodique. Ces canaux sont séparés par deux couches de diffusion (GDLs) à l'intérieur desquelles se trouvent les zones de réaction dites actives ou catalytiques

(CLs), situées de part et d'autre d'une membrane échangeuse de protons ou électrolyte, communément appelée Membrane-Electrod-Assembly (MEA) comme montré dans la (Figure II.1).

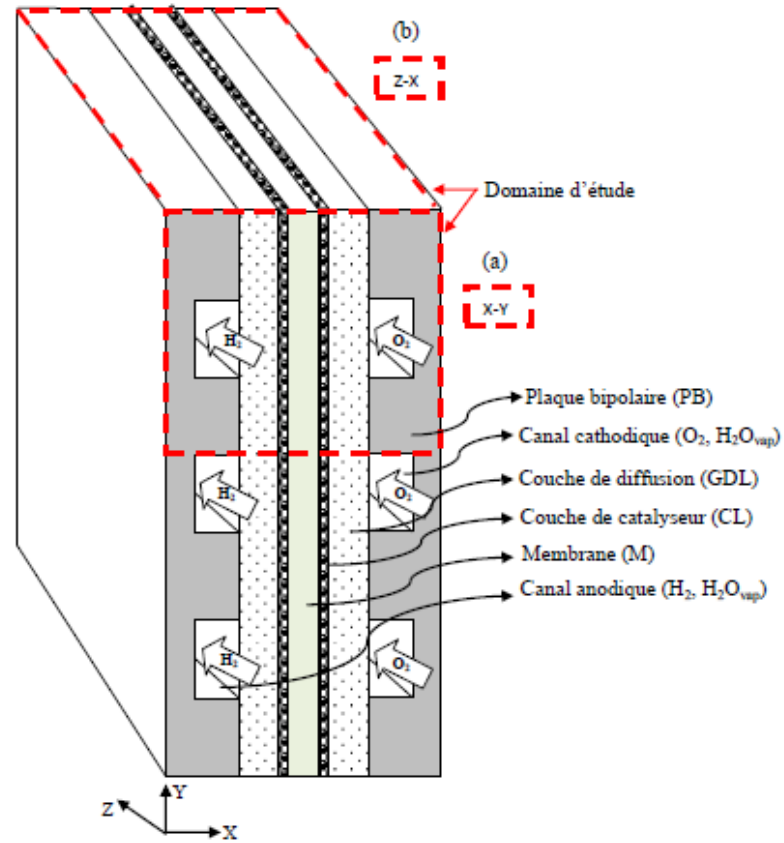


Figure II.1: Présentation de différents domaines d'étude de la pile PEMFC.

(a): (plan perpendiculaire $x-y$).

(b): (plan parallèle $z-x$).

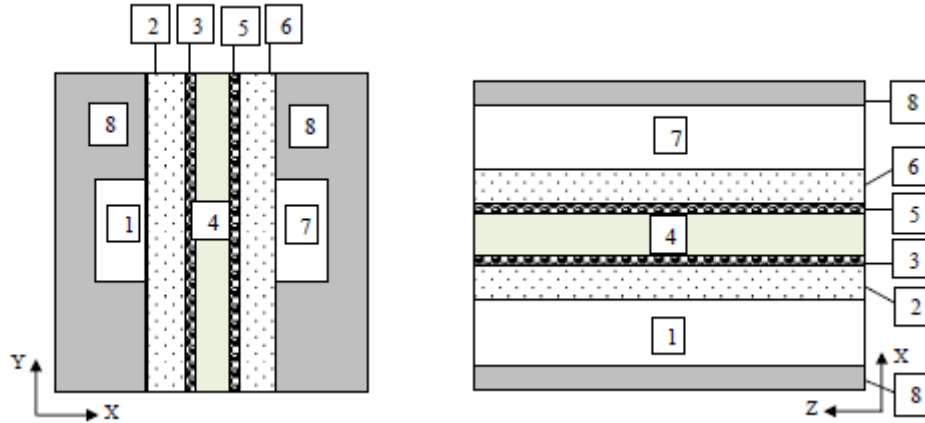


Figure II.2: Les modèles bidimensionnel des domaines d'étude: (a) plan (x–y) et (b) plan (z–x), ((1) canal anodique, (2) couche de diffusion anodique, (3) couche de catalyseur anodique, (4) membrane, (5) couche de catalyseur cathodique, (6) couche de diffusion cathodique, (7) canal cathodique, (8) plaque bipolaire).

A partir de cette description des différents constituants de la cellule, le domaine de modélisation décrit dans la figure (II.1), dans notre étude, nous considérons deux différents types de géométries les plus utilisés dans la littérature qui diffèrent selon le chemin d'écoulement des gaz. Le premier modèle perpendiculaire à l'écoulement (plan x-y) (Figure II.2: (a)), et le deuxième parallèle à l'écoulement (plan x-z) (Figure II.2: (b)).

II.2.2.Hypothèses du modèle :

La détermination d'un modèle mathématique d'un processus nécessite en général diverses hypothèses simplificatrices afin de limiter sa complexité. Notre modèle est basé sur les hypothèses suivantes :

- La cellule est alimentée par l'hydrogène et de l'oxygène humides.
- L'état de fonctionnement de la cellule est stationnaire.
- L'écoulement dans les canaux est considéré laminaire.
- Le fluide est incompressible.
- Modèle monphasique (l'eau à l'état vapeur).
- Les couches de diffusion de gaz, des couches de catalyseur, et la couche de membrane sont des matériaux isotropes.
- La membrane est considérée imperméable aux gaz

II.3.Écriture du modèle : [28]

Le transport des différentes espèces chimiques doit être pris en compte dans le système d'équations décrivant la dynamique des fluides dans les canaux et les zones poreuses. Le modèle consiste en un seul système d'équations à dérivées partielles non linéaires

représentant les équations de conservation de masse, de quantité de mouvement, de la continuité, et de l'énergie. Les équations de conservation sont écrites :

- **Equation de continuité :**

Le transport des différentes espèces chimiques doit vérifier l'équation de continuité suivante :

$$\frac{\partial \epsilon p U}{\partial x} + \frac{\partial \epsilon p V}{\partial y} = S_m \quad (\text{II.1})$$

Pour toutes les zones de ce modèle, le terme source de masse $S_m = 0$.

La porosité ϵ est égale 1 dans les canaux.

- **Equation de quantité de mouvement :**

Les champs de vitesse et de pression sont obtenus par la résolution des équations de mouvement qui s'écrivent comme suit :

$$U \frac{\partial \epsilon p U}{\partial x} + V \frac{\partial \epsilon p U}{\partial y} = -\epsilon \frac{\partial P}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\epsilon \mu^{eff} \frac{\partial U}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\epsilon \mu^{eff} \frac{\partial U}{\partial y} \right) + S_U \quad (\text{II.2})$$

$$U \frac{\partial \epsilon p V}{\partial x} + V \frac{\partial \epsilon p V}{\partial y} = -\epsilon \frac{\partial P}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\epsilon \mu^{eff} \frac{\partial V}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\epsilon \mu^{eff} \frac{\partial V}{\partial y} \right) + S_V \quad (\text{II.3})$$

Les termes sources S_U , S_V sont égaux à zéro dans toutes les zones sauf pour les couches de diffusion de gaz et les couches de catalyseur modélisent le comportement du milieu poreux ils sont basés sur la loi de Darcy.

$$S_U = -\epsilon \frac{\mu}{k} U \quad (\text{II.4})$$

$$S_V = -\epsilon \frac{\mu}{k} V \quad (\text{II.5})$$

Où : ϵ la porosité, k : la perméabilité de chaque milieu poreux de la pile μ : la viscosité.

- **Equation de conservation des espèces**

Le transport des différentes espèces chimiques doit être pris en compte dans le système d'équations décrivant la dynamique des fluides dans les canaux et les zones poreuses. Les

fractions massiques des différentes espèces obéissent à une équation de la même forme que l'équation de transport, ou la conservation des espèces est nécessaire pour calculer le bilan massique pour chaque réactif impliqué dans ce modèle.

$$U \frac{\partial \epsilon_p Y_i}{\partial x} + V \frac{\partial \epsilon_p Y_i}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho D_i^{eff} \frac{\partial C_i}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\rho D_i^{eff} \frac{\partial C_i}{\partial y} \right) + S_i \quad (II.6)$$

Où l'indice « i » désigne l'oxygène O₂ côté cathode et l'hydrogène H₂ côté anode et la vapeur d'eau H₂O_{vap} dans les deux côtés.

Où D_i^{eff} et Y_i indiquent respectivement les coefficients de diffusion effective et les fractions molaires des espèces « i ».

Afin de tenir compte des contraintes géométriques des milieux poreux, les diffusivités sont corrigées en utilisant la formule de correction de Bruggemann : [29 et 30]

$$D_i^{eff} = D_i \cdot \epsilon^{1.5} \quad (II.7)$$

D_i Représente les coefficients de diffusion des espèces « i » en fonction de température et de pression est exprimée par :

$$D_i = D_i^0 \left(\frac{T}{T^0} \right)^{1.5} \left(\frac{P^0}{P} \right) \quad (II.8)$$

Trois espèces sont prises en compte dans le calcul des termes sources. Ce sont l'hydrogène (H₂) à l'anode, l'oxygène (O₂), et la vapeur d'eau (H₂O_{vap}) à la cathode. Les termes sources S_{H_2} et S_{O_2} correspondent à la diminution dans les volumes de contrôle relatifs aux zones de réaction de l'hydrogène et de l'oxygène. Le terme source de l'eau S_{H_2O} , à la cathode est déduit quant à lui des termes sources S_{H_2} et S_{O_2} . La variation des espèces à travers la zone de réaction est imposée par la réaction électrochimique. C'est une fonction qui ne dépend que de la densité de courant et elle est donnée par la loi de Faraday :

$$S_i = -\frac{M_i}{nF} i \quad (II.9)$$

Où : i est la densité de courant en (A.cm⁻²), n le nombre d'électrons échangés lors de la réaction, F la constante de Faraday, M_i la masse molaire des constituants « i » en (kg.mol⁻¹). Les réactions chimiques des produits et des réactifs à l'anode et à la cathode sont respectivement :



Dans le cas de la décomposition de l'hydrogène à l'anode, $n=2$ dans l'équation (III.10). Le terme consommation d'hydrogène s'obtient avec :

$$S_{H_2} = -\frac{M_{H_2}}{2F} i \quad (II.12)$$

L'oxygène étant réduit à la cathode, $n = 4$ dans l'équation (III.11) et le terme source est :

$$S_{O_2} = -\frac{M_{O_2}}{4F} i \quad (II.13)$$

La quantité d'eau générée à la cathode est donnée par la relation suivante :

$$S_{H_2O} = -\frac{M_{H_2O}}{2F} i \quad (II.14)$$

À l'intérieur des zones catalytiques, les densités de courant local i ($A.cm^{-2}$) sont définies de façon générale comme suit : [31]

$$i_a = i_{0,a}^{ref} \left(\frac{C_{H_2}}{C_{H_2}^{ref}} \right)^{1/2} \left[\exp \left(\frac{\alpha_a F}{RT} \eta_{act} \right) - \exp \left(-\frac{\alpha_c F}{RT} \eta_{act} \right) \right] \quad (II.15)$$

$$i_c = i_{0,c}^{ref} \left(\frac{C_{O_2}}{C_{O_2}^{ref}} \right)^{1/2} \left[\exp \left(\frac{\alpha_a F}{RT} \eta_{act} \right) - \exp \left(-\frac{\alpha_c F}{RT} \eta_{act} \right) \right] \quad (II.16)$$

Où i : la densité de courant locale, $i_{0,c}^{ref}$ la densité de courant d'échange de référence, C : les concentrations d'espèces ($kg \cdot mol / m^3$). α : le coefficient de transfert (adimensionnel), η : surtension électrique ou pertes d'activation, F : la constante de Faraday ($C.kg/mol$).

Les équations (II.15) et (II.16) sont une formulation générale de la fonction de Butler-Volmer. La simplification de cette fonction en tenant compte des termes prépondérants donne les équations de Tafel qui peuvent encore s'écrire :

$$i_a = i_{0,a}^{ref} \left(\frac{C_{H_2}}{C_{H_2}^{ref}} \right)^{1/2} \exp \left(\frac{\alpha_a F}{RT} \eta_{act} \right) \quad (II.17)$$

$$i_c = i_{0,c}^{ref} \left(\frac{C_{O_2}}{C_{O_2}^{ref}} \right)^{1/2} \exp \left(-\frac{\alpha_a F}{RT} \eta_{act} \right) \quad (II.18)$$

• **Equation d'énergie**

Il est également important de comprendre les effets de la variation de température à travers une pile à combustible.

$$(p C_p)_{eff} \left(U \frac{\partial T}{\partial x} + V \frac{\partial T}{\partial y} \right) = \frac{\partial}{\partial x} \left(k_{eff} \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k_{eff} \frac{\partial T}{\partial y} \right) + S_T \quad (II.19)$$

Avec K^{eff} : la conductivité thermique effective.

Le terme source de chaleur dans l'équation d'énergie (II.19) inclut :

-La génération de chaleur interne dans la pile à combustible est à l'effet des deux termes dont l'un est dû à des changements d'entropie et l'autre est issu de la chaleur produite par la surtension d'activation des réactions dans le catalyseur : [32]

$$S_T = \left[\frac{T - (\Delta S)}{n F} + \eta_{act} \right] i \quad (II.20)$$

Où : ΔS est le changement d'entropie dans les réactions chimiques, n est le nombre d'électrons et η_{act} est la surtension d'activation.

-La source de chaleur associée à l'effet Joule qu'est provoqué par la résistance au transfert protonique dans la membrane est donné par :

$$S_T = \frac{i^2}{\sigma_m} \quad (II.21)$$

Où σ_m : conductivité de la membrane, exprimée en fonction de la température et de la teneur en eau λ , exprimé par la corrélation suggérées par Springer. [33 et 34]

$$\sigma_m = (5.139\lambda - 3.26) \exp \left[1268 \left(\frac{1}{303} - \frac{1}{T} \right) \right] \quad (II.22)$$

Les termes sources S_m , S_v , S_U , S_T , S_i , sont résumés dans le tableau (II.1).

Tableau II.1: Les termes sources des équations gouvernantes.

Équation gouvernante	Termes sources volumétriques et lieu d'application
Conservation de masse	Pour les canaux de gaz, GDL, la couche de catalyseur anodique et cathodique et la membrane: $S_m = 0$
Conservation de quantité de mouvement	Pour les canaux de gaz: $S_U = S_v = 0$ Pour GDLs, CLs et la membrane : $S_U = -\varepsilon \frac{\mu}{k} U$, et $S_V = -\varepsilon \frac{\mu}{k} V$
Conservation d'énergie	Pour les canaux de gaz et GDLs: $S_T = 0$ Pour CLs anodique : $S_T = \eta_{act} \cdot i + \frac{i^2}{\sigma_{cat}}$ Pour CL cathodique : $S_T = \left[\frac{T - (\Delta S)}{n_e - F} + \eta_{act} \right] i + \frac{i^2}{\sigma_{cat}}$ Pour la membrane : $S_T = \frac{i^2}{\sigma_m}$
Le transport de l'hydrogène	Pour la couche de catalyseur d'anode : $S_{H_2} = \frac{M_{H_2}}{2F} i$
Le transport de l'oxygène	Pour la couche de catalyseur de cathode : $S_{O_2} = \frac{M_{O_2}}{4F} i$
Transport de la vapeur d'eau	Pour la couche de catalyseur de cathode : $S_{H_2O} = \frac{M_{H_2O}}{2F} i$

III.4. Tension de la cellule :

Le potentiel réel d'une cellule (V) est diminué de son potentiel thermodynamique d'équilibre (E_{Nemest}) en raison de pertes irréversibles. Le potentiel V est obtenu en soustrayant toutes les surtensions (pertes) de la potentielle thermodynamique d'équilibre comme l'expression suivante : [34 et 35]

$$V_{pile} = E_{Nemest} - \eta_{act} - \eta_{ohm} - \eta_{conc} \quad (II.23)$$

-Le potentiel d'équilibre E_{Nemest} est déterminé en utilisant l'équation de Nernst : [35 et 36]

$$E_{Nemest} = 0,0025T + 0,2329 \quad (II.24)$$

-Les principales sources de surtensions ohmiques η_{ohm} sont attribuées au transport des protons dans la membrane.

$$\eta_{ohm} = R_m \cdot i \quad (II.25)$$

La résistance de la membrane R_m (Ωm^2) dépend fortement de son taux d'humidification et de sa température. Le matériau le plus utilisé dans la membrane de la pile PEM est le Nafion 112. L'expression de la résistance électrique du Nafion 112 d'après la loi d'Hom : [37]

$$\eta_{ohm} = \frac{H_m}{\sigma_m(\lambda)} \quad (II.26)$$

σ_m : Conductivité de la membrane (S/m),

H_m : Epaisseur de la membrane (m).

-Lorsque l'équation de Tafel est écrite en termes de surtension d'activation η_{act} , la forme d'expression devient :

$$\eta_{act} = 2,303 \frac{RT}{\alpha_c} \ln \left(\left[\frac{i}{i_0} \right] \right) \quad (II.27)$$

Le transport de masse affecte les concentrations d' H_2 et d' O_2 à cause de la diminution des pressions partielles de ces gaz. Cette polarisation est exprimée par la relation de J.Larminie : [38]

$$\eta_{conc} = -B \ln \left(1 - \frac{i}{i_L} \right) \quad (II.28)$$

i_L : Courant limite,

B : Terme relatif à chaque réactif, est égal :

- Pour l'hydrogène : $\left(\frac{RT}{2\alpha F} \right)$

- Pour l'oxygène : $\left(\frac{RT}{4\alpha F} \right)$

-A partir des équations précédentes il est intéressant de tracer les densités de puissance électrique utile en fonction de la densité de courant. Cette densité de puissance Pelec est donnée par :

$$p_{elec} = V_{pile} \times i \quad (w/m^2) \quad (II.29)$$

III.5.Conclusion :

Dans ce chapitre nous avons présenté le modèle physique et mathématique avec une description générale sur la géométrie de structure ; avec hypothèse et l'écriture du modèle et la tension de cellule et ces équations de transport de masse pour tenir comptent des propriétés de l'écoulement, ainsi que les conditions aux limites et les différents termes source dans l'équation.

CHAPITRE III : DÉVELOPPEMENT DU MODÈLE PAR COMSOL MULTIPHYSICS.

III.1.Introduction :

Dans le cadre de cette thèse, tous les modèles développés sont simulés à l'aide logiciel sous licence Comsol multiphysics 5.5 et de son module Piles à combustible et batteries. Le modèle comprend le transport des gaz réactifs pour le côté anodique, la diffusion dans les couches de catalyseur, le transport de l'eau et le transport des électrons dans la phase solide.

III.2.Simulation numérique :

La simulation se définit comme l'utilisation ou la résolution de modèle correspondant à un système donné pour étudier le comportement de ce dernier dans un contexte précis. Elle est la suite logique de la modélisation qui est la première approche d'une simulation.

III.3.HISTORIQUE :

Historique Le logiciel COMSOL et la société correspondante ont été créés en 1986 par des étudiants de Germund Dahlquist, dans la suite de son cours consacré à la simulation numérique à l'Institut royal de technologie (KTH)¹ à Stockholm en Suède. La première version de COMSOL Multiphysics est sortie en 1998. La version initiale (avant 2005) de COMSOL Multiphysics s'appelait FEMLAB. [39]

III.4. Principe d'utilisation :

L'utilisateur définit ses couplages ou sélectionne les interfaces prédéfinies. Les différentes étapes du processus de modélisation - définir la géométrie, les propriétés matériaux, le maillage, choisir la ou les physiques, résoudre et afficher les résultats - sont intégrées dans une seule interface. Des modules d'applications optionnels offrent des interfaces spécialisées notamment en mécanique linéaire et non linéaire, acoustique, écoulement, transfert de chaleur, génie chimique, géophysique, électromagnétisme basse et haute fréquence, corrosion, plasma, suivi de particules, optimisation, MEMS, ainsi qu'avec les logiciels de CAO et Matlab. Ce logiciel est multiplateforme (Windows, Mac, Linux). En plus des physiques précitées, COMSOL Multiphysics autorise l'utilisateur à définir ses propres systèmes d'équations aux dérivées partielles (EDP), soit sous forme différentielle, soit sous

formulation faible. Les couplages avec des équations aux dérivées ordinaires (EDO) et des équations algèbro-différentiels (EAD) sont également possibles. [40]

III.5. Algorithme de la Comsol Multiphysics :

Afin de développer un modèle mathématique par Comsol Multiphysics, plusieurs outils doivent être utilisés pour un algorithme ordonné. Le ComsolMultiphysics permet de construire un modelzero-dimensional (0-D), one dimensional (1-D), axisymmetric(1-D), two-dimensional (2-D), axisymmetric(2-D)outhree-dimensional (3-D).



Figure III.1: Sélection de « fichier » dans Comsol Multiphysique.



Figure III.2: Sélection de « bibliothèque d'application ».

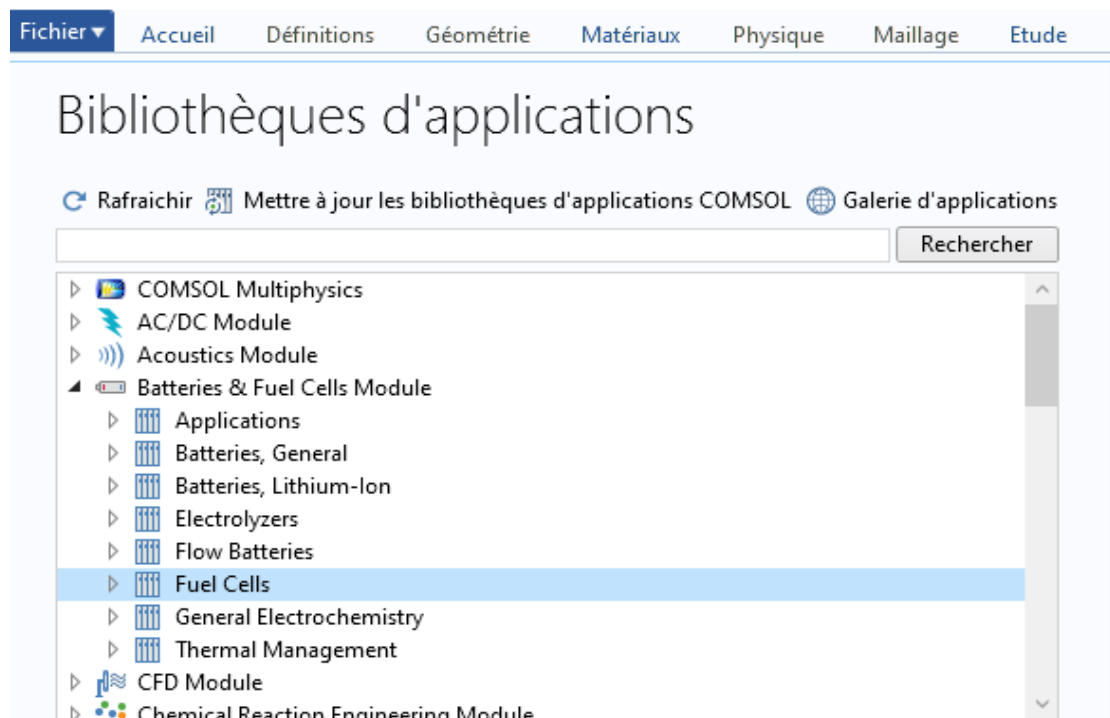


Figure III.3: Sélection « Fuel cells ».

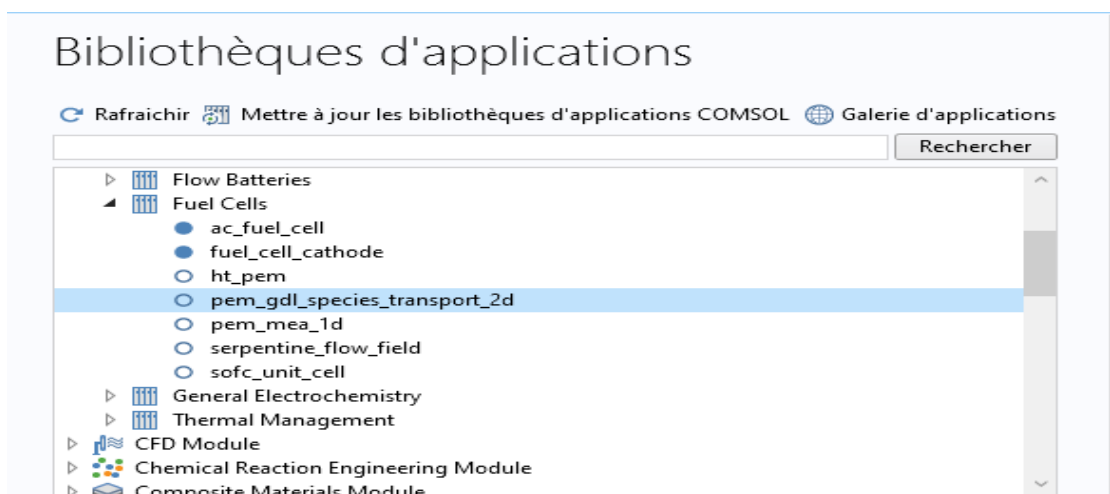


Figure III.4: Selection « pem_gdl_species_trasport_2D ».

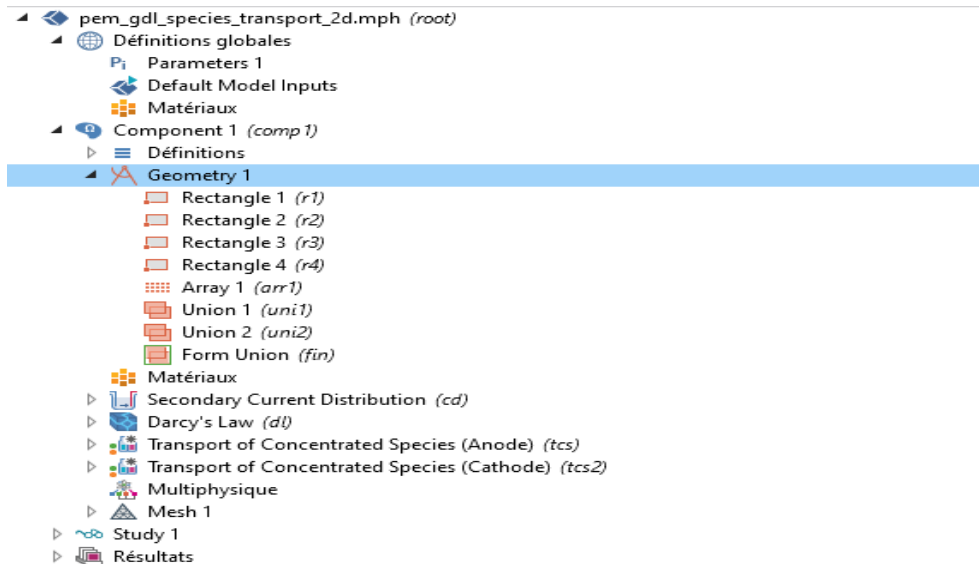


Figure III.5: Geometries de model etude considerer en 2D.

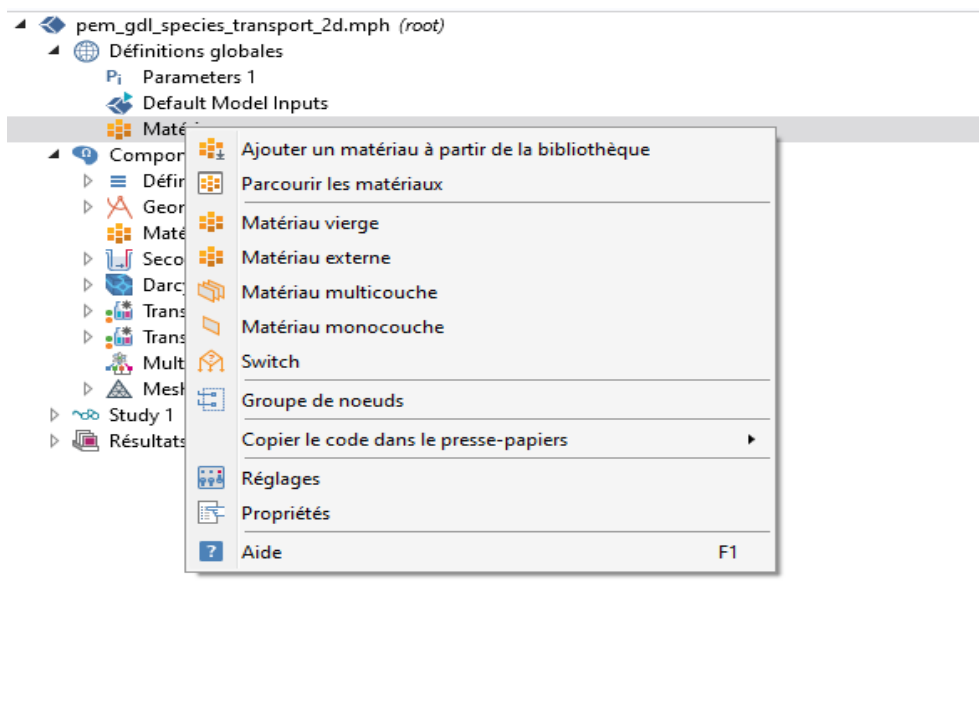


Figure III.6: Matériaux de model considerer en 2D.

Pour la modélisation PEMFC, 38 paramètres différents sont introduits dans le programme, notamment les dimensions des cellules, les propriétés des composants et des matériaux. La Figure III.7 montre l'interface de la section «Paramètres» dans Multiphysics Comsol.

Paramètres			
Nom	Expression	Valeur	Description
kappa_s	1000[S/m]	1000 S/m	Conductivity, solid phase
kappa_m	9[S/m]	9 S/m	Conductivity, membrane
V_cell	0.7[V]	0.7 V	Cell voltage
T	353[K]	353 K	Temperature
kappa_p	1e-13[m^2]	1E-13 m ²	GDL permeability
eta	2.1e-5[Pa*s]	2.1E-5 Pa·s	Fluid viscosity
p_ref	1[atm]	1.0133E5 Pa	Reference pressure
p_a_in	1.1*p_ref	1.1146E5 Pa	Anode inlet pressure
p_c_in	1.1*p_ref	1.1146E5 Pa	Cathode inlet pressure
drag	3	3	Proton-Water drag coeffi...
E_eq_a	0[V]	0 V	Equilibrium potential, an...
E_eq_c	1[V]	1 V	Equilibrium potential, cat...
i0_a	1e5[A/m^2]	1E5 A/m ²	Exchange current density...
i0_c	1[A/m^2]	1 A/m ²	Exchange current density...
S	1e7[m^2/m^3]	1E7 1/m	Specific surface area
R_agg	0.1[um]	1E-7 m	Aggregate radius
eps_mic	0.2	0.2	Microscopic porosity insi...
eps_mac	0.4	0.4	Macroscopic porosity bet...
D_agg	1.2e-10[m^2/s]*((1-eps_mac)*eps_mic)^1.5	4.9883E-12 m ² ...	Effective diffusion coeffic...
D_effH2_...	0.915e-4[m^2/s]*(T/307.1[K])^1.5*(eps_mac)^1.5	2.8527E-5 m ² /s	Effective binary diffusivit...
D_effO2_N2	0.22e-4[m^2/s]*(T/293.2[K])^1.5*(eps_mac)^1.5	7.3524E-6 m ² /s	Effective binary diffusivit...
D_effH2O...	0.256e-4[m^2/s]*(T/307.5[K])^1.5*(eps_mac)^1.5	7.9657E-6 m ² /s	Effective binary diffusivit...
D_effO2_...	0.282e-4[m^2/s]*(T/308.1[K])^1.5*(eps_mac)^1.5	8.7491E-6 m ² /s	Effective binary diffusivit...
wH2_in	0.1	0.1	Inlet weight fraction H2
wO2_in	0.21*0.8	0.168	Inlet weight fraction O2
wH2Oc_in	0.2	0.2	Cathode inlet weight frac...
MH2	2[g/mol]	0.002 kg/mol	Molar mass, H2
MO2	32[g/mol]	0.032 kg/mol	Molar mass, O2
MH2O	18[g/mol]	0.018 kg/mol	Molar mass, H2O
MN2	28[g/mol]	0.028 kg/mol	Molar mass, N2

Figure III.7: Section Paramètres dans Multiphysics Comsol.

Une fois la simulation du modèle terminée, les résultats peuvent être obtenus en utilisant l'outil « Results ». Pour la modélisation PEMFC, le résultat de la densité de courant dans la membrane, la densité de courant des électrodes, la consommation de l'hydrogène, la consommation de l'oxygène et la diffusion de l'eau est acquis en 2-D. La Figure III.8 illustre la liste des résultats qui pouvant être obtenus à la fin de la simulation du modèle PEMFC.

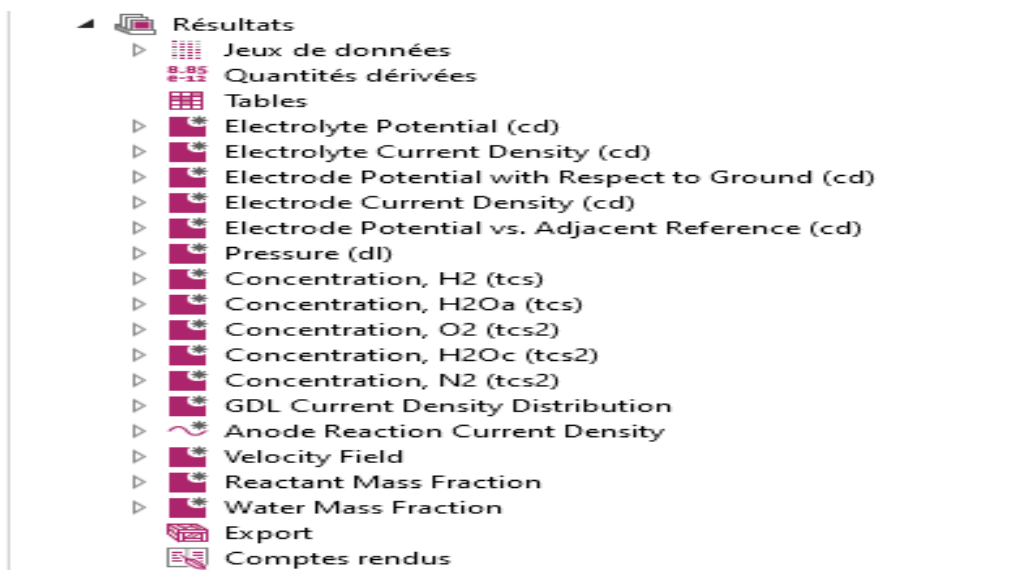


Figure III.8: Outil « Results » dans Comsol Multiphysics.

III.6.Géométrie et paramètres du modèle :

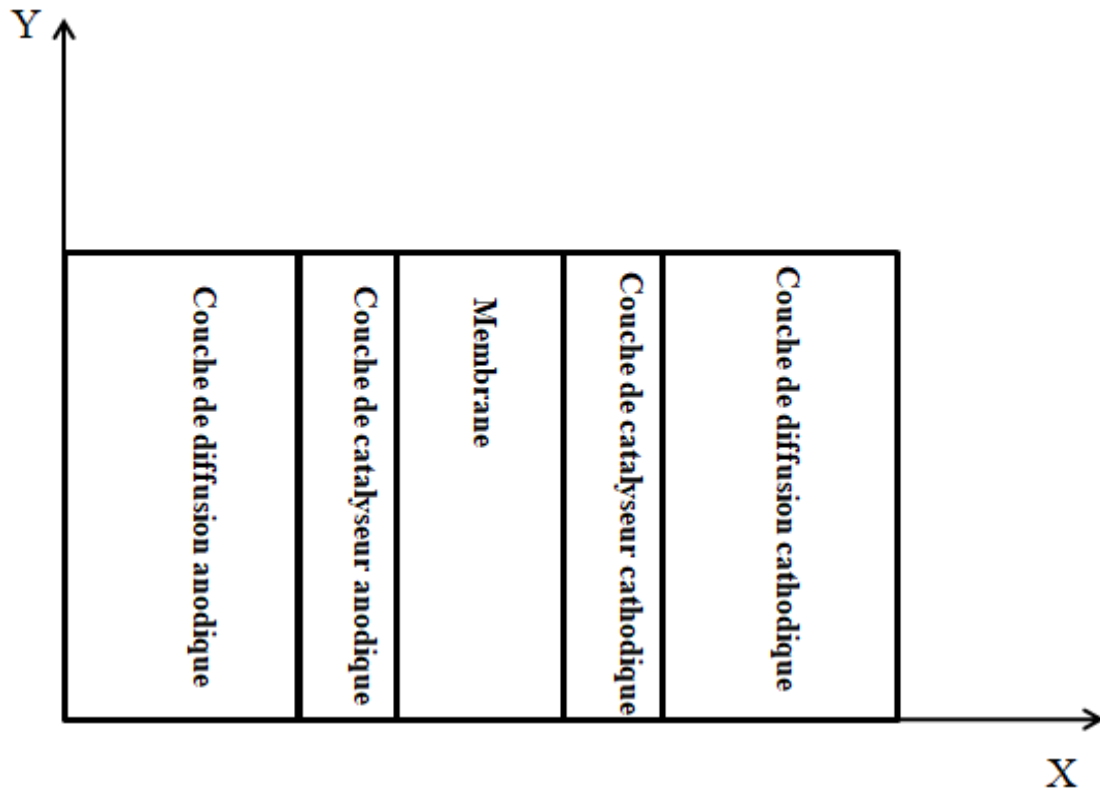


Figure III.9: Présentation de différents domaines d'étude de la pile PEMFC.

Le choix des bons paramètres de modélisation est très important et il est difficile d'établir un modèle de calcul d'une pile à combustible entièrement PEM pour la simulation numérique. Des résultats expérimentaux très limités sont disponibles dans la littérature avec des spécifications détaillées de la géométrie cellulaire et des conditions expérimentales.

Tableau III.1: Géométries et paramètres de fonctionnement.

Paramètre.	Symbole.	Valeur.
1	2	3
Longueur de cellule.	L	$0.023[m]$
Hauteur du canal.	H_{ch}	$0.8 \times 10^{-3}[m]$

1	2	3
Largeur de canal.	W_{ch}	$0.8 \times 10^{-3}[m]$
Largeur de nervure.	W_{rib}	$0.8 \times 10^{-3}[m]$
Largeur de la GDL.	H_{gdl}	$380 \times 10^{-6}[m]$
Épaisseur d'électrode poreuse.	$H_{\text{électrode}}$	$50 \times 10^{-6}[m]$
Épaisseur de membrane.	H_{membrane}	$100 \times 10^{-6}[m]$
Température de la pile	T	$80+273.15[K]$

Tableau III.2: Propriétés des électrodes et de la membrane.

Paramètre.	Symbole.	Valeur.	Référence.
Porosité GDL.	ε_{gdl}	0.4	[41]
Porosité Membrane.	ε_M	0.413	[41]
Perméabilité GDL.	$K_{p.gdl}$	1.18×10^{-11} [m ²]	[41]
Perméabilité à la membrane saturée N112 [A.Z. Weber, JES 152 (2005) A681.]	$K_{p,M}$	$1.8 \times 10^{-7}[m^2]$	[41]
Perméabilité (électrode poreuse).	$K_{p.CL=K_{p.GDL}}/5$	$1.8 \times 10^{-7}/5$ [m ²]	[41]

Tableau III.3: Propriétés électrochimiques.

Paramètre.	Symbole.	Valeur.	Référence.
1	2	3	4
Densité de courant d'oxydation d'hydrogène a	$i_{0_{H_2a}}$	$94.5[A/m^2]$	[41]

l'anode.			
1	2	3	4
Densité de courant d'oxydation d'hydrogène à l'cathode.	$i_{0_{H_2c}}$	$0[A/m^2]$	[41]
Concentration de référence en oxygène.	C_{O_2-ref}	$40.88[mol/m^3]$	[41]
Concentration de référence en hydrogène.	C_{H_2-ref}	$100[mol/m^3]$	[41]

Tableau III.4 : Diffusivités binaires à 1atm et à la température de la pile.

Paramètre	Symbole	Valeur	Référence.
1	2	3	4
H_2-H_2O Coefficient de diffusion binaire.	$D_{H_2-H_2O}$	$9.15 \times 10^{-5} \times [T/307.1]^{1.75}[m^2/s]$	[41]
N_2-H_2O Coefficient de diffusion binaire.	$D_{N_2-H_2O}$	$2.56 \times 10^{-5} \times [T/307.1]^{1.75}[m^2/s]$	[41]
O_2-N_2 Coefficient de diffusion binaire.	$D_{O_2-N_2}$	$2.2 \times 10^{-5} \times [T/293.2]^{1.75}[m^2/s]$	[41]
O_2-H_2O Coefficient de diffusion binaire.	$D_{O_2-H_2O}$	$2.82 \times 10^{-5} \times [T/308.1]^{1.75}[m^2/s]$	[41]

A partir de **Tableau III.5**, on pourra choisir un composite avec la plus grande conductivité.

Tableau III.5: Conductivité et accroissement d'hydrogène pour des différentes membranes.[42]

Nano composites.	Conductivité protonique S/cm.	Densité puissances mAc ^{m-2} .
1	2	3
sulfonated poly(phthalazinone ether sulfone ketone) (SPPEsk).	1.3×10^{-2} à 3.0×10^{-2}	
polyéther-éther-cétone sulfoné à l'acide tungstosilicique supporté sur silice- l'aluminium oxydé.	6.1×10^{-2} (s/cm)	
sulfone Poly (arylene éther sulfone)-silice SPAES-SiO ₂ .	0.1	234.8
poly-(vinylidene fluorid-hexa fluoropropylene) (PVdF -HFP)/nafion inomere/aluminium oxy hydroxyde.	5×10^{-3}	
Organic silica/Nafion® composite membrane.	1.57×10^{-2}	20 à 65
Sulfonated polyimide (SPI) membranes.	la conductivité protonique de la SPI est comparable à celle du Nafion ®.	>0.1
Nafion-polybenzimidazole.	<0.11 >0.015	>0.8 V
Quaternized poly(vinylalcohol). /alumina (QPVA/Al ₂ O ₃).	< 10 ⁻³ > 10 ⁻²	28.33 (mw/cm ²)
poly(vinyl alcohol)/titanium oxide nanotubes/poly(styrene sulfonic acid).	10 ⁻³	12.85 (mw/cm ²)
Crosslinked PVA/SSA .	(0.0419 à 0.0573	4.13 (mWcm ⁻²)
composite silica/nafion.	0.069-0.028	300 (A/cm ²) 64 (mW/cm ²)

1	2	3
(aluminophosphates triethylamine) (APO-TE).	2.4×10^{-3}	
poly(alcool vinylique) hydroxyapatite (PVA/HAP).	0.0182 à 0.0542	$11.48 \left(\frac{\text{mw}}{\text{cm}^2} \right) 20-40 \text{ mAc} \text{cm}^{-2}$
zéolithes (DEZ 25-5).	1.5×10^{-2} 2.135×10^{-2}	1600 à 2000 $\text{mAc} \text{cm}^{-2}$
polyamides sulfones (SPI).	7.9×10^{-3} 7.2×10^{-2} (S/cm)	Faible densité
sulfonés poly (éther éther cétone) (SPEEKs) nitrés S63N17.	~ 0.085 (s cm^{-1})	23–25 (mWcm^{-2})
sulfonés poly (éther éther cétone) (SPEEKs) nitrés S63N38.	~ 0.085 (s cm^{-1})	24–29 (mWcm^{-2})
Nafion117.	(0.1 S/cm)	Faible densité
poly sulfoné réticulé (arylène éther sulfone).	0.1 à 0.093	Faible densité
polyimides sulfonés de naphtalène.	$7.9 \cdot 10^{-3}$ à $7.2 \cdot 10^{-2}$	Faible densité
The crosslinked sulfonated poly (ether ether ketone)/2-acrylamido-2-methyl- 1-propanesulfonic acid (SPEEK/AMPS) blend membranres.	0.013 à 0.05	Faible densité
sulfated zirconia/Nafion®115 nanocomposite membrane.	5.0×10^{-3} Scm^{-1}	(5 à 35)
polyaniline/Nafion.	1.66×10^{-6}	70 (mWcm^{-2})
poly(vinylidene fluoride)- <i>graft</i> - poly(styrene sulfonic acid) (PVDF- <i>g</i> - PSSA).	8.0 Sm^{-1}	250-1100 (A/m^2)
PVA/TiO2 composite polymer membrane.	0.0181 à 0.0310	7.54 20 ($\text{mAc} \text{cm}^{-2}$)

1	2	3
Sulfonated aromatic hydrocarbon polymers.	6.0×10^{-3} S/cm	
sulfonated poly(ether ether ketone)s (C-SPEEKs).	0.007 - 0.08	
perfluorosulfonic acid (PFSA).	0.088	
Nafion®/nitrated sulfonated poly(ether ether ketone).	~ 0.085 Scm $^{-1}$.	and 24–29 mWcm $^{-2}$
(PVA)/poly(styrene sulfonic acid-co-maleic acid) (PSSA MA).	0.0386 to 0.053	190-250 mA/cm 2
sulfonated poly(styrene-ranethylene) (SPSE) infiltrated.	1.25×10^{-7} à 2.80×10^{-6}	50.2 mA/cm 2
Nafion 1135.	2.46×10^{-6}	40.8
PVA/PAMPS [poly(vinyl alcohol)/poly(2-acrylamido-2-methyl-1-propanesulfonic acid)].	0.06-0.1	15.8 à 42.9
sulfonated-sulfinated poly(oxa-p-phenylene-3,3-phthalido-p-phenylene-oxa-p-phenyleneoxy-phenylene) (SsPEEK-WC).	2.9×10^{-2}	
Nafion_ 117.	6.2×10^{-2}	52.9
Benzimidazolecontaining sulfonated poly(ether ether ketone) SPEEK-BIm.	2.3×10^{-3} 0.032	

III.6.Conclusion :

Au cours de ce quatrième chapitre nous avons présenté les étapes suivies pour développés un modèle de simulation à l'aide d'un programme de logiciel sous licence, Comsol Multiphysics 5.5 et son application au Batteries Fuel Cells. Et en termine par les paramètres des propriétés des différentes composantes de la PEMFC incluse dans notre programme de Comsol Multiphysics 5.5.

CHAPITRE IV : RESULTATS ET INTERPRETATIONS.

IV.1. Validation du modèle :

Pour valider le modèle établi dans cette étude, des comparaisons doivent être effectuées entre les résultats de la simulation correspondant aux conditions de base et les données expérimentales obtenues par [43], pour la courbe de polarisation, c'est-à-dire la courbe de tension de cellule en fonction de la densité de courant. Les courbes de polarisation sont étroitement liées aux diffusions de chaque espèce dans une pile à combustible PEMFC qui peuvent être mesurées expérimentalement.

On constate un bon accord entre les deux ensembles des résultats dans les plages de densité de courant observées, comme est indiqué.

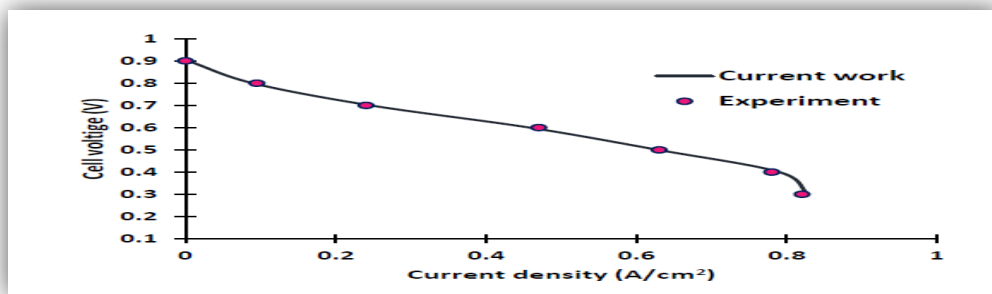


Figure IV.1.a : Données expérimentales moyennes (Jung et al, 2005).

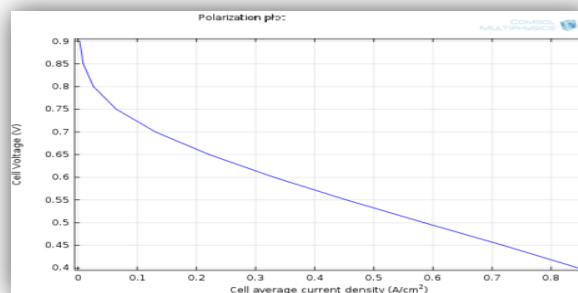


Figure IV.1.b : Résultats de modélisation.

Figure IV.1 : Comparaison des résultats de modélisation avec des données expérimentales moyennes (Jung et al, 2005). [44]

IV.2.Effet de température sur la performance de la pile PEMFC :

Les paramètres qu'on peut modifier pour améliorer les performances de la pile à combustible type PEMFC est la température, La température influe fortement sur les performances de la pile à combustible. La Figure IV.2 montre l'effet de différentes températures ($293\text{ K}^\circ, 313\text{ K}^\circ, 333\text{ K}^\circ, 353\text{ K}^\circ, 373\text{ K}^\circ, 393\text{ K}^\circ$) sur une pile PEMFC en utilisant une membrane de **Nafion 112** et du hydrogène à $1(\text{Mol/L})$. L'augmentation de la température de la pile à combustible PEM entraîne une diminution de la performance globale de cette dernière. Notons bien que cette température augmente en raison de l'amélioration de la cinétique chimique qui résulte de l'oxydation de l'hydrogène à la couche catalyseur anodique. Ce qui diminue la conductivité protonique des protons H^+ au niveau de la membrane. Exemple à température de (293K°) en aura une différence de densité de courant de $(\approx 100(\text{A/m}^2))$, et avec l'augmentation de la température la différence de potentiel diminue de façon significative. On conclue que avec cette température de (293K°) on aura la meilleure performance souhaitée.

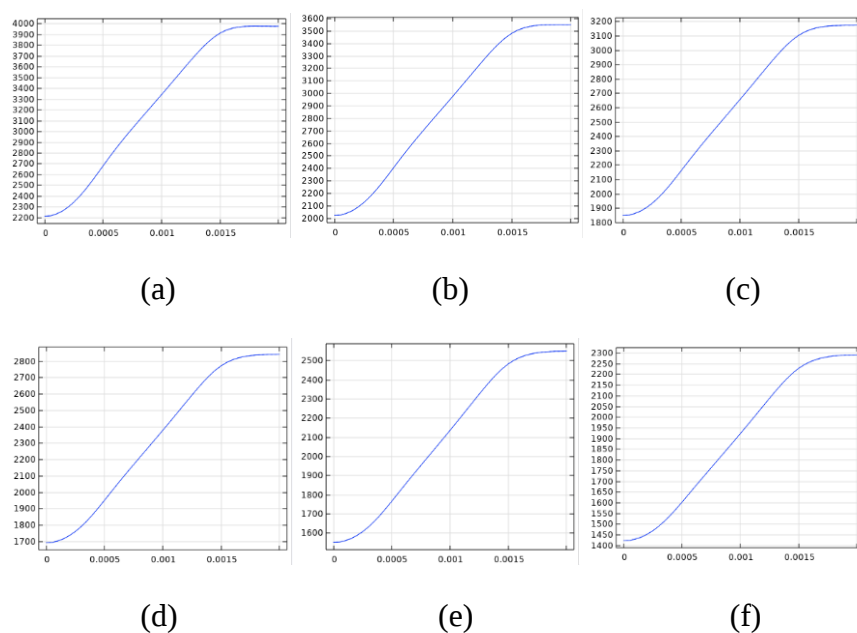


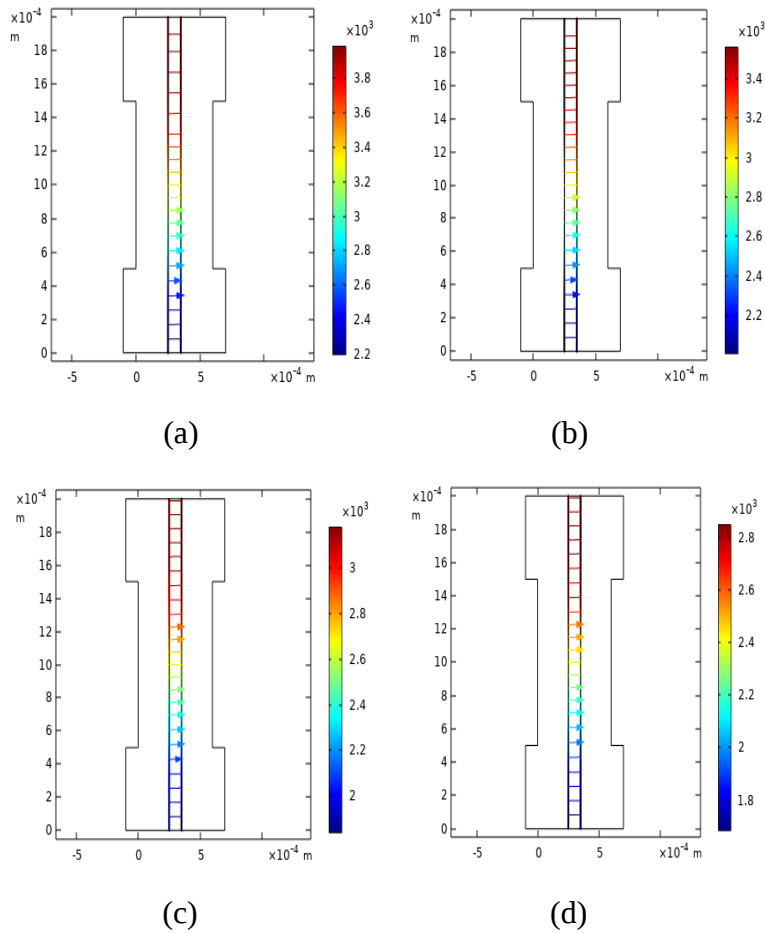
Figure IV.2 : Performances de la pile à combustible, la densité de courant (A/m^2). Conditions de modélisation

((a) 293K° , (b) 313K° , (c) 333K° , (d) 353K° , (e) 373K° , (f) 393K°), avec $1(\text{Mol/L})$ d'hydrogène.

IV.2.1.Effet sur la densité de courant dans la membrane la pile PEMFC :

L'effet de la température sur les performances de la pile à combustible n'est pas pris en compte dans la plupart des modèles publiés dans la littérature. Ils ont supposé que la température du côté de l'anode est toujours suffisante pour qu'elle n'affecte jamais sur les performances de la cathode. L'anode a été modélisée, et son potentiel correspondant a était associé à la limite inférieure de l'électrolyte. Dans le présent travail, le changement de la température a été pris en compte dans les équations du modèle. Par conséquent, l'anode est également incluse dans la modélisation à cellule complète. La figure montre la comparaison entre les résultats du modèle avec des différentes températures ((a)293K°, (b) 313K°, (c)333K°, (d) 353K°, (e)373K°, (f) 393K°)

Notons bien qu'à une certaine température on aura une sécheresse de la membrane ce qui diminue la performance de la pile.



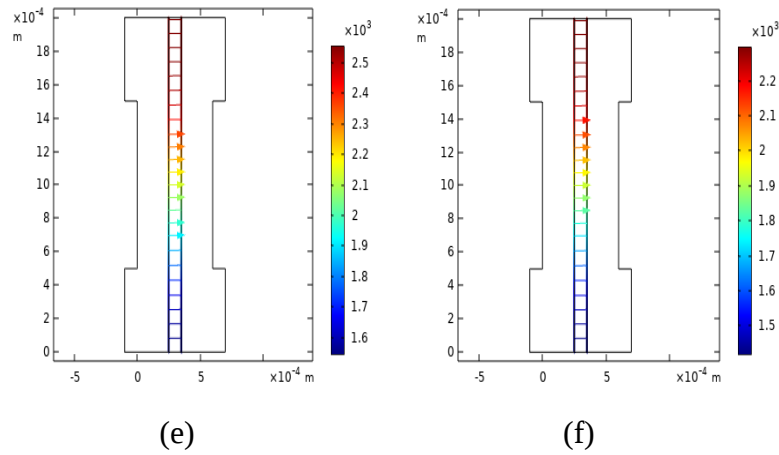
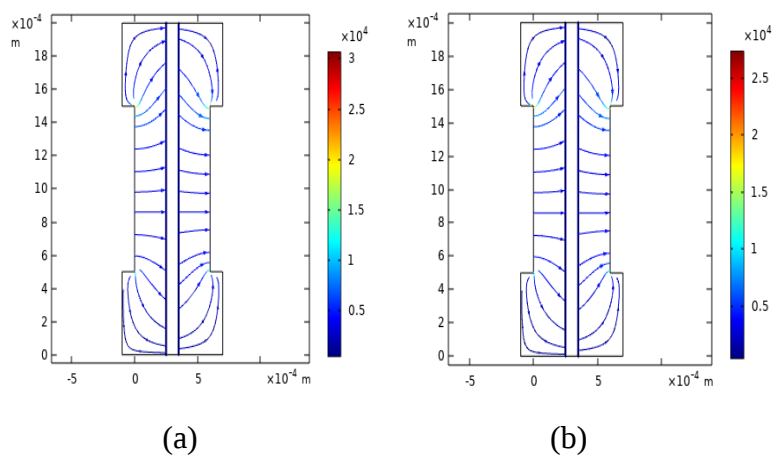


Figure IV.3 : Performances de la pile à combustible, la densité de courant (A/m^2) dans la membrane. Conditions de modélisation ((a)293K°, (b) 313K°, (c)333K°, (d) 353K°, (e)373K°, (f) 393K°), avec 1(Mol/L) d'hydrogène.

IV.2.2.Effet sur la densité de courant des électrodes la pile PEMFC :

L'effet de la température sur les électrodes est étudié pour une pile à combustible PEM. Notre modèle, ayant différentes températures de fonctionnement de ((a)293K°, (b) 313K°, (c)333K°, (d) 353K°, (e)373K°, (f) 393K°).. Sur la figure IV.4 les courbes de densité de courant des électrodes sont illustrées. Ces courbes montrent qu'il y a une diminution continue de la puissance dans la plage (0,15-0,2 A/m^2) avec l'augmentation de la température.



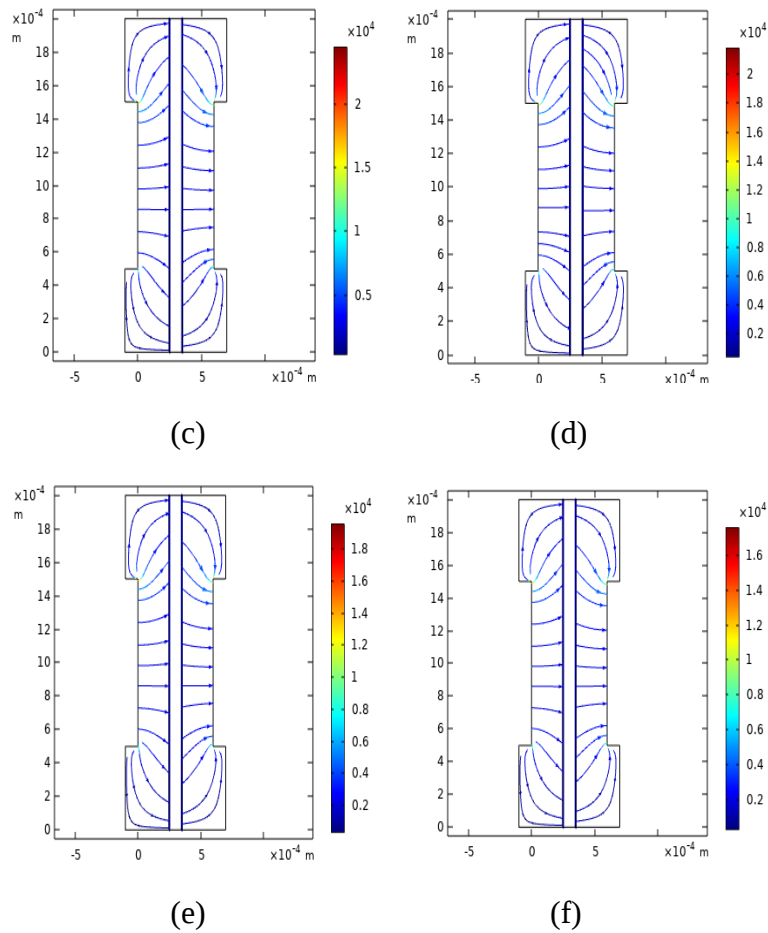


Figure IV.4 : Performances de la pile à combustible, la densité de courant (A/m^2) dans les électrodes. Conditions de modélisation

((a) $293K^\circ$, (b) $313K^\circ$, (c) $333K^\circ$, (d) $353K^\circ$, (e) $373K^\circ$, (f) $393K^\circ$)

, avec $1(Mol/L)$ d'hydrogène.

IV.2.3.Effet sur la consommation de l'hydrogène et de l'oxygène dans la pile PEMFC :

Avec l'augmentation de la température on aura plus de consommation pour l'hydrogène. La figure IV.5 montre l'effet de la température sur cette consommation qui augmente de la plage de ($4 mol/m^3$), ce qui nous conduit à la discussion sur la consommation de l'oxygène du cote cathodique et qui devrait augmenter de son cote avec l'augmentation de température. La figure IV.6 montre cette augmentation significative.

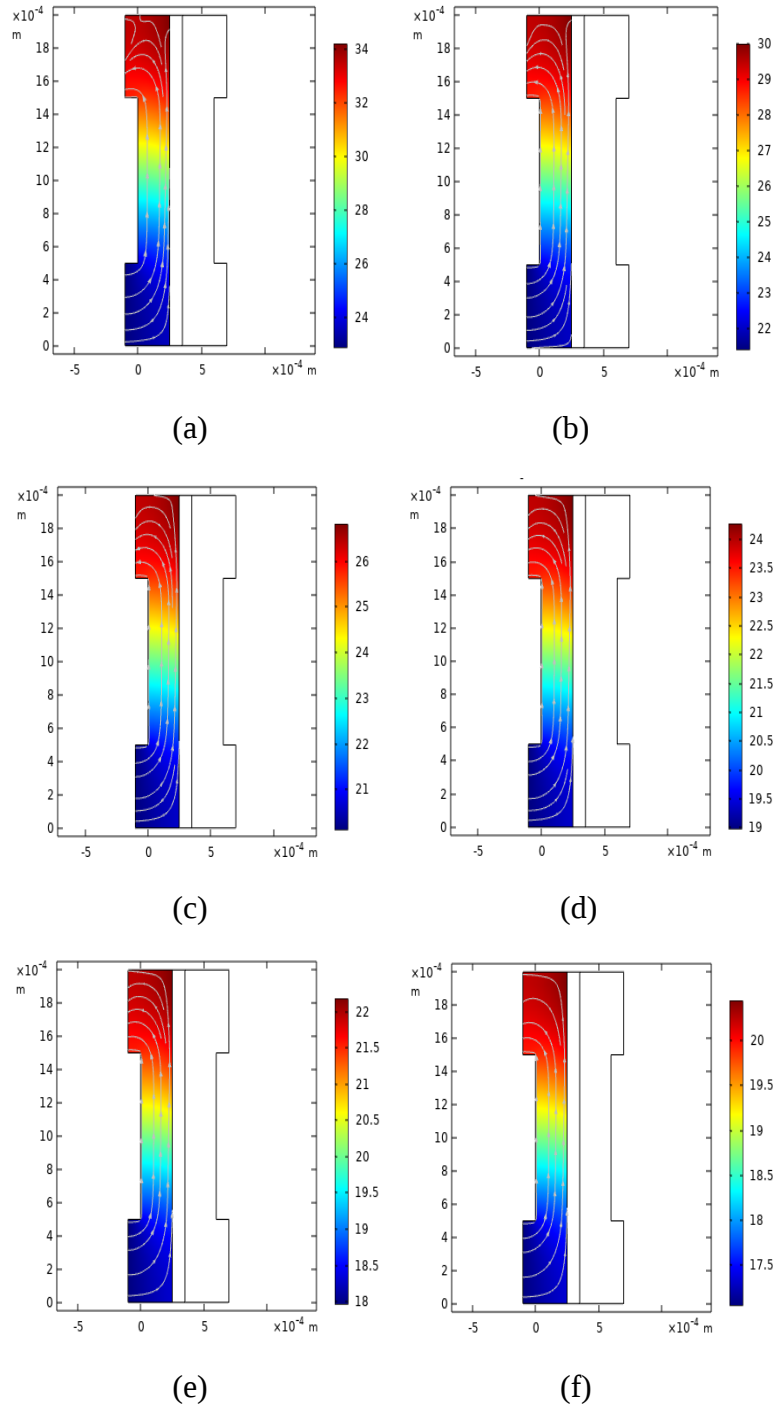


Figure IV.5 : Consommation de l'hydrogène (mol/m^3). Conditions de modélisation ((a) 293K° , (b) 313K° , (c) 333K° , (d) 353K° , (e) 373K° , (f) 393K°), avec $1(\text{Mol/L})$ d'hydrogène.

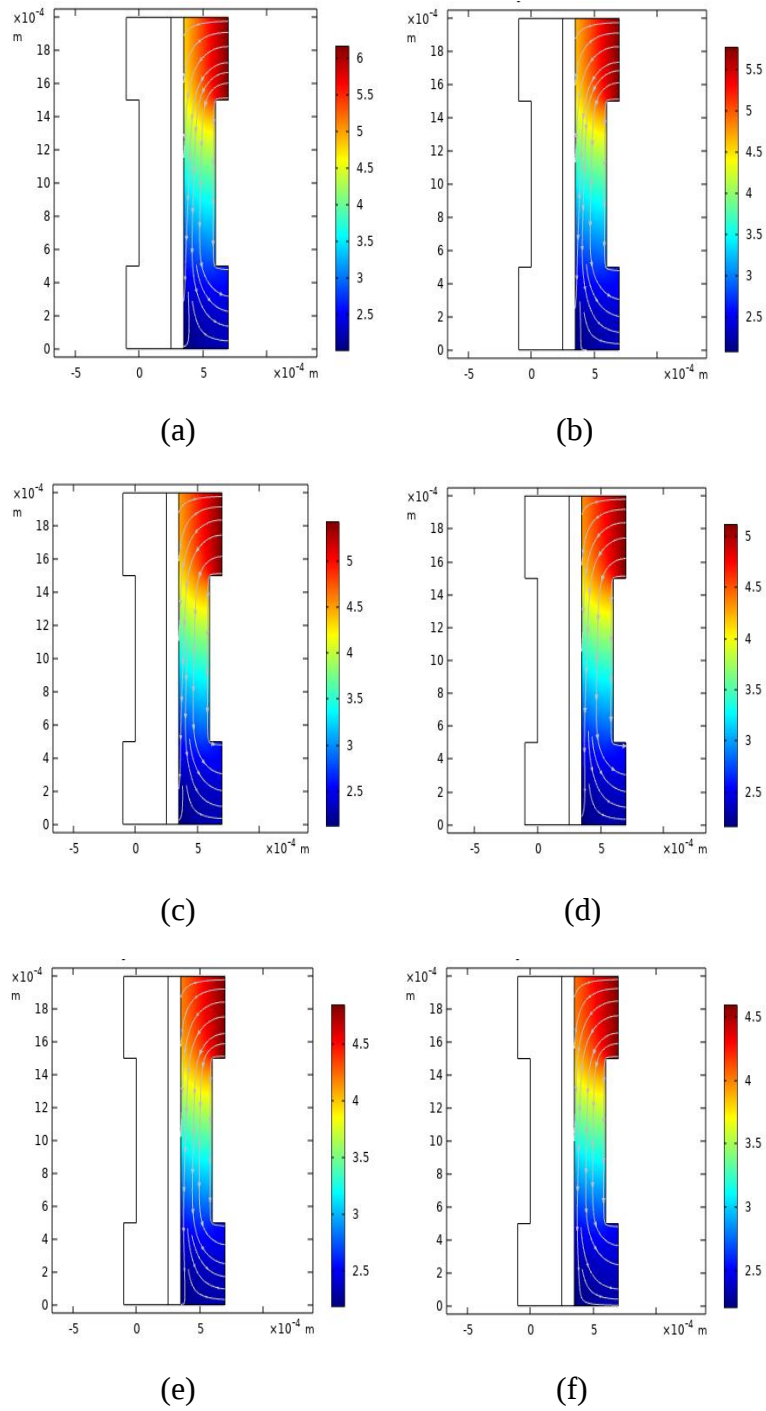


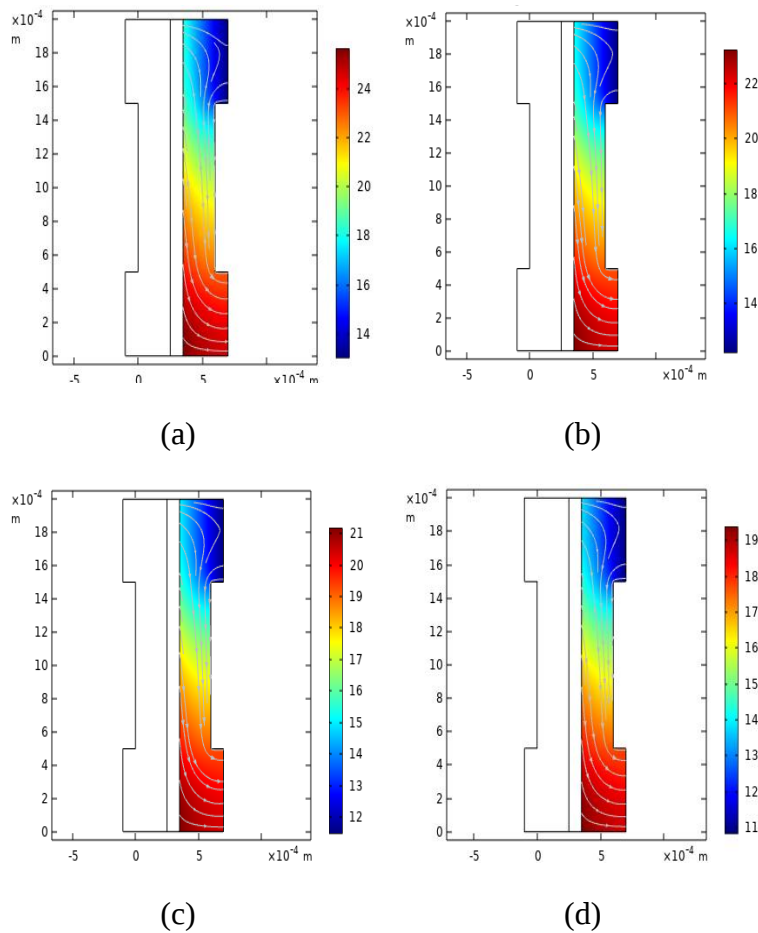
Figure IV.6: consommation de l'oxygène (mol/m^3). Conditions de modélisation ((a) 293K° , (b) 313K° , (c) 333K° , (d) 353K° , (e) 373K° , (f) 393K°), avec $1(\text{Mol/L})$ d'hydrogène.

Plus de consommation pour l'hydrogène plus on peut avoirs augmentation de consommation de l'oxygène au cote cathode.

IV.2.4.Effet de température sur la diffusion de l'eau dans la pile PEMFC :

Avec l'augmentation de la température on aura plus de consommation pour l'hydrogène et de l'oxygène de cote cathodique et qui devrai produire plus d'eau. La figure IV.7 montre cette augmentation significative.

NB : que dans la réalité l'augmentation de la température évapore l'eau ce qui diminue la performance de la pile et ceci résulte de la sècheresse de la membrane qui diminue l'emplacement des protons de l'anode vers la cathode.



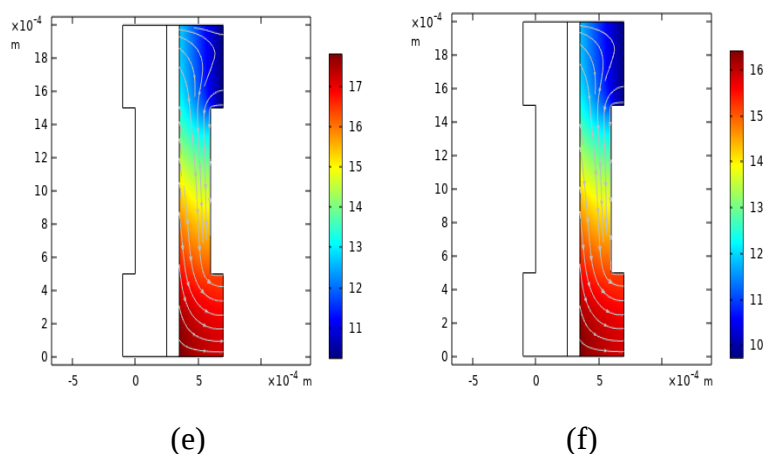


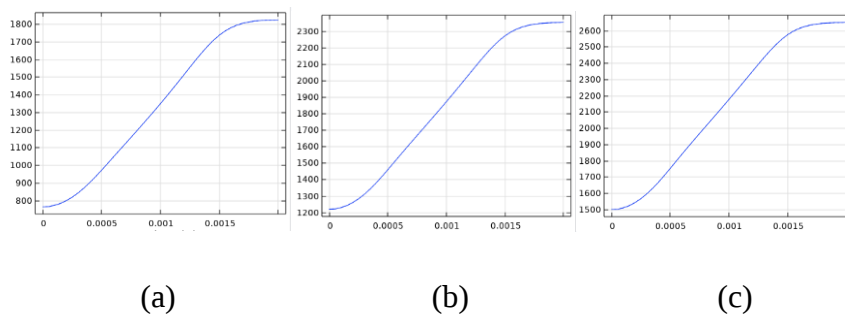
Figure IV.7 : Distribution de l'eau (mol/m^3). Conditions de modélisation

((a) 293K° , (b) 313K° , (c) 333K° , (d) 353K° , (e) 373K° , (f) 393K°), avec $1(\text{Mol/L})$ d'hydrogène.

Plus de consommation pour l'hydrogène plus on peut avoirs augmentation de consommation de l'oxygène et plus on aura augmentation dans les produits résultants comme l'eau H_2O au cote cathode.

IV.3.Effet de la concentration de l'oxygène O_2 sur la performance de la pile PEMFC :

Pour l'effet de la concentration de l'oxygène O_2 on a constaté que l'utilisation d'une concentration plus élevée améliore la tension, densité de puissance et les densités de courant. Comme la montre la Figure IV.8, une analyse à (293K°) et à différentes concentration ((a) 0.042 , (b) 0.084 , (c) 0.126 , (d) 0.168 , (e) 0.21 , (f) 0.294), indique que l'oxygène a 0.294 donné les meilleurs résultats. Cela se produit car il y a plus de O_2 à réagir et donc plus de puissance par unité de volume.



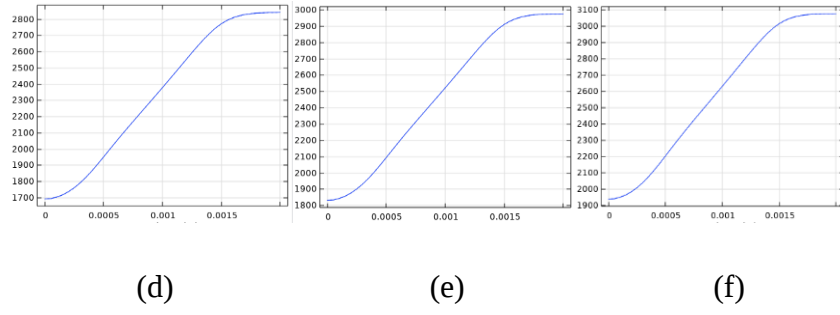
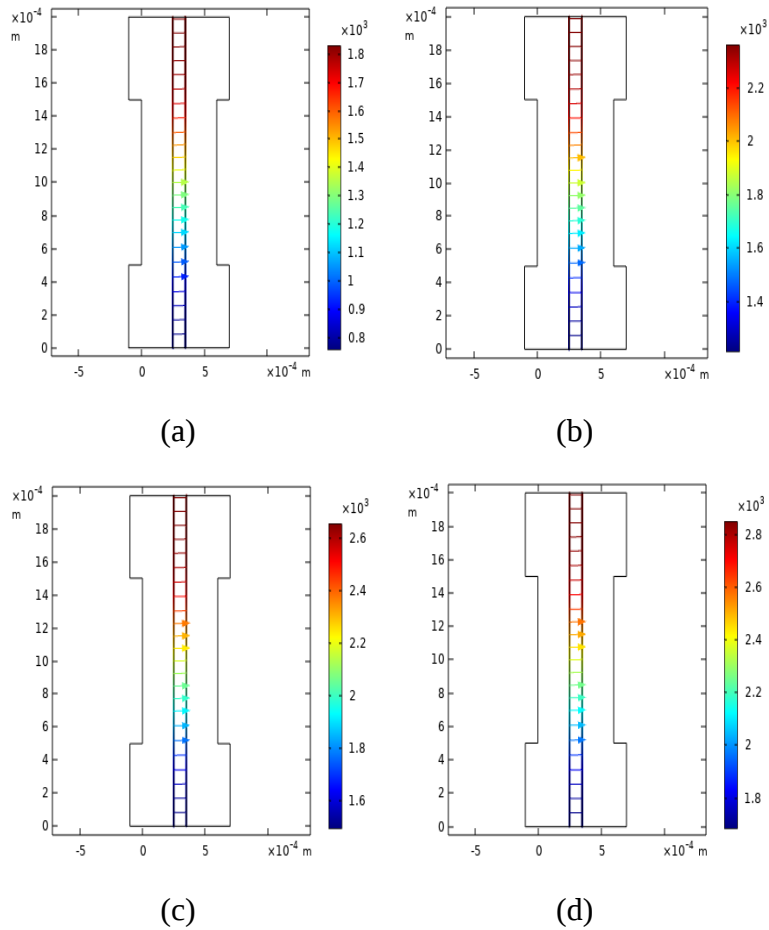


Figure IV.8: Fonctionnement d'une pile PEMFC a différentes concentration de O_2 ((a)0.042, (b) 0.084, (c)0.126, (d) 0.168, (e)0.21, (f) 0.294) à (293K°).

Donc on a préféré d'utiliser la concentration de l'oxygène qui est 0.294 nous permettent d'avoir la meilleur performance pour cette pile à combustible type PEMFC.

IV.3.1.Effet sur la densité de courant dans la membrane la pile PEMFC :



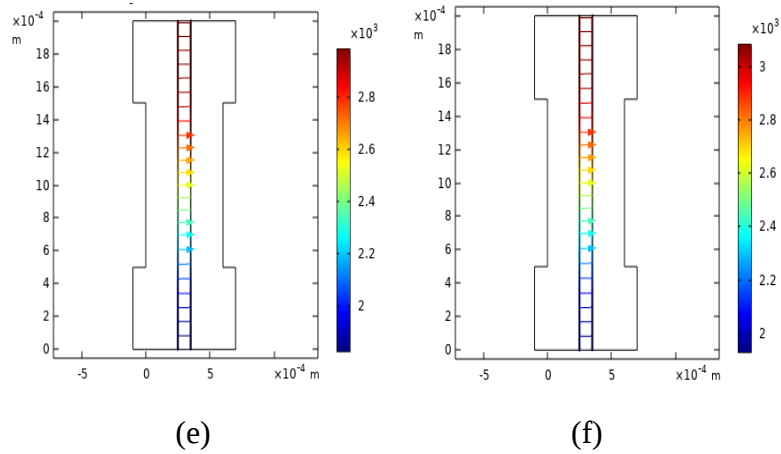
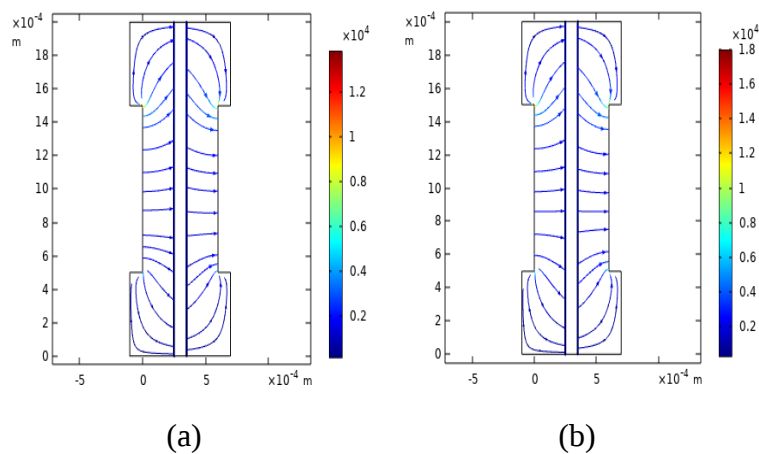


Figure IV.9 : Performances de la pile à combustible, la densité de courant (A/m^2) dans la membrane. Conditions de modélisation

((a)0.042, (b) 0.084, (c)0.126, (d) 0.168, (e)0.21, (f) 0.294), avec 1(Mol/L) d'hydrogène.

IV.3.2.Effet la densité de courant des électrodes la pile PEMFC :

L'effet de la concentration de l'oxygène O_2 sur les électrodes est étudié pour une pile à combustible PEM à haute température. Notre modèle, ayant différentes températures de fonctionnement de ((a)0.042, (b) 0.084, (c)0.126, (d) 0.168, (e)0.21, (f) 0.294) est développé. Sur la figure IV.10 les courbes de densité de courant des électrodes sont illustrées. Ces courbes montrent qu'il y a une augmentation continue de la puissance dans la plage (0,15-0,2 A/m^2) et avec l'augmentation de la concentration de l'oxygène O_2 .



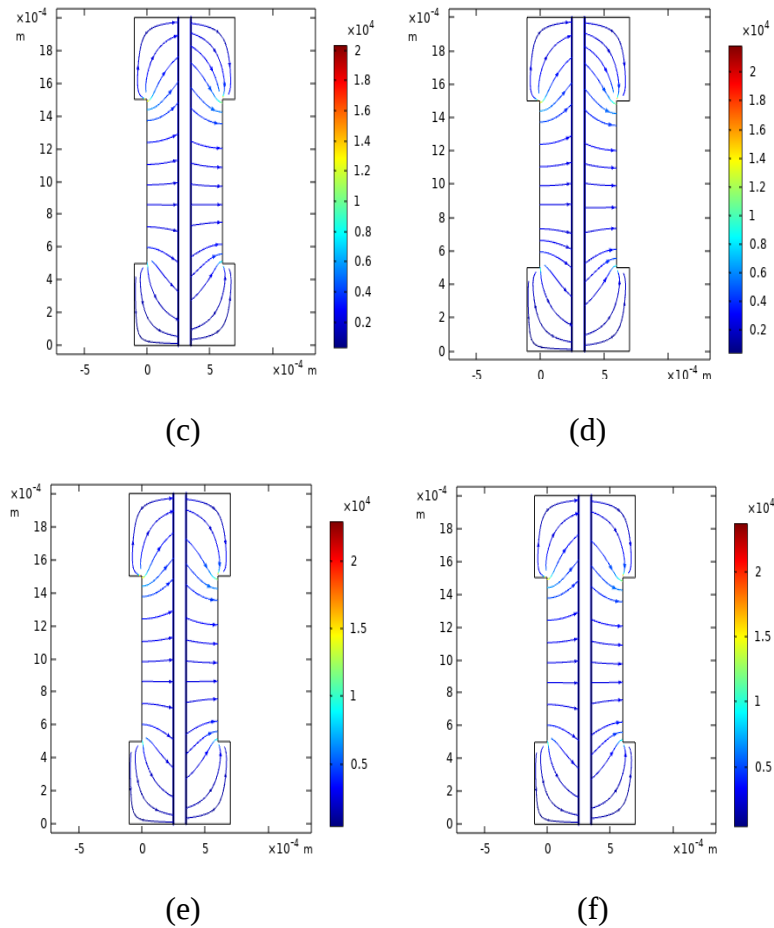


Figure IV.10 : Performances de la pile à combustible, la densité de courant (A/m^2) dans les électrodes. Conditions de modélisation ((a)0.042, (b) 0.084, (c)0.126, (d) 0.168, (e)0.21, (f) 0.294), avec 1(Mol/L) d'hydrogène.

IV.3.3.Effet la consommation de l'hydrogène et de l'oxygène dans la pile PEMFC :

Avec l'augmentation de la concentration de l'oxygène O_2 on aura plus de consommation pour l'hydrogène ce qui signifie l'augmentation de densité de courant. La figure IV.11 montre l'effet de la concentration de O_2 sur cette consommation, ce qui nous conduits à la discussion sur la consommation de l'oxygène du cote cathodique et qui devrai augmenter de son cote avec l'augmentation de la consommation de l'oxygène O_2 . La figure IV.12 montre cette augmentation significative.

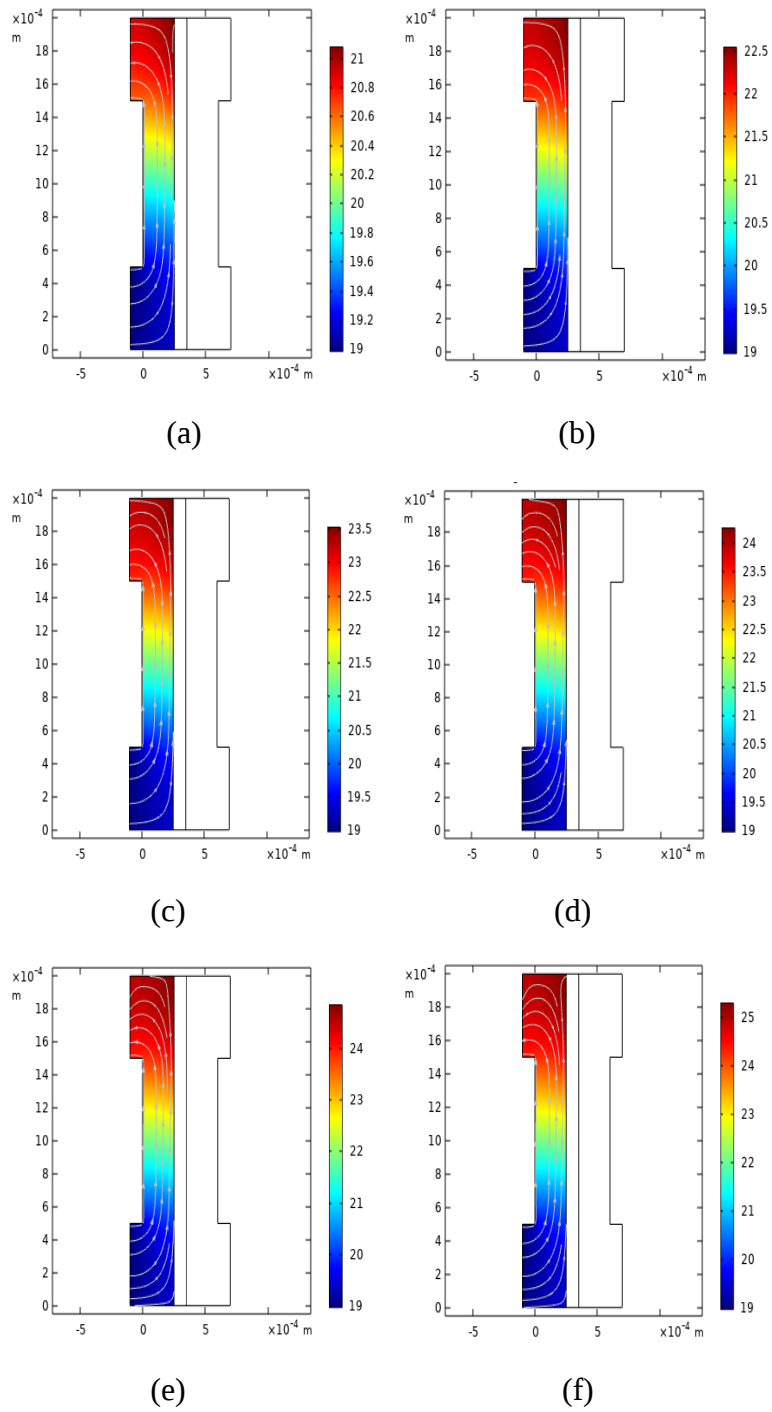


Figure IV.11: Consommation de l'hydrogène (mol/m^3). Conditions de modélisation ((a) 0.042, (b) 0.084, (c) 0.126, (d) 0.168, (e) 0.21, (f) 0.294), avec 1 (Mol/L) d'hydrogène.

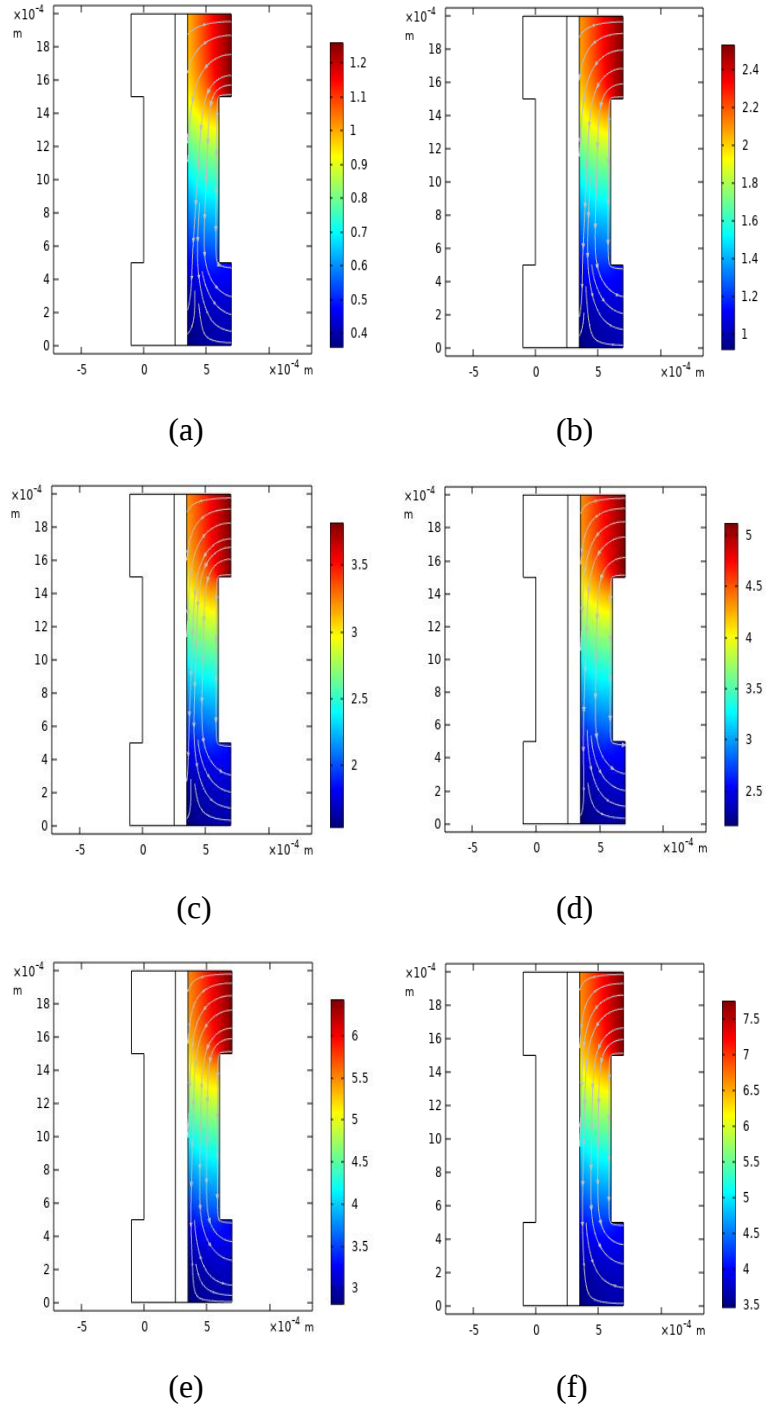


Figure IV.12: Consommation de l'oxygène (mol/m^3). Conditions de modélisation ((a)0.042, (b) 0.084, (c)0.126, (d) 0.168, (e)0.21, (f) 0.294), avec 1(Mol/L) d'hydrogène.

Plus de consommation pour l'hydrogène plus on peut avoirs augmentation de consommation de l'oxygène au cote cathode ce qui signifie l'augmentation de densité de courant.

IV.3.4 Effet de température sur la diffusion de l'eau dans la pile PEMFC :

Avec l'augmentation de la concentration de l'oxygène O_2 on aura plus de consommation pour l'hydrogène et de l'oxygène de cote cathodique et qui devrait produire plus d'eau. La figure IV.13 montre cette augmentation significative.

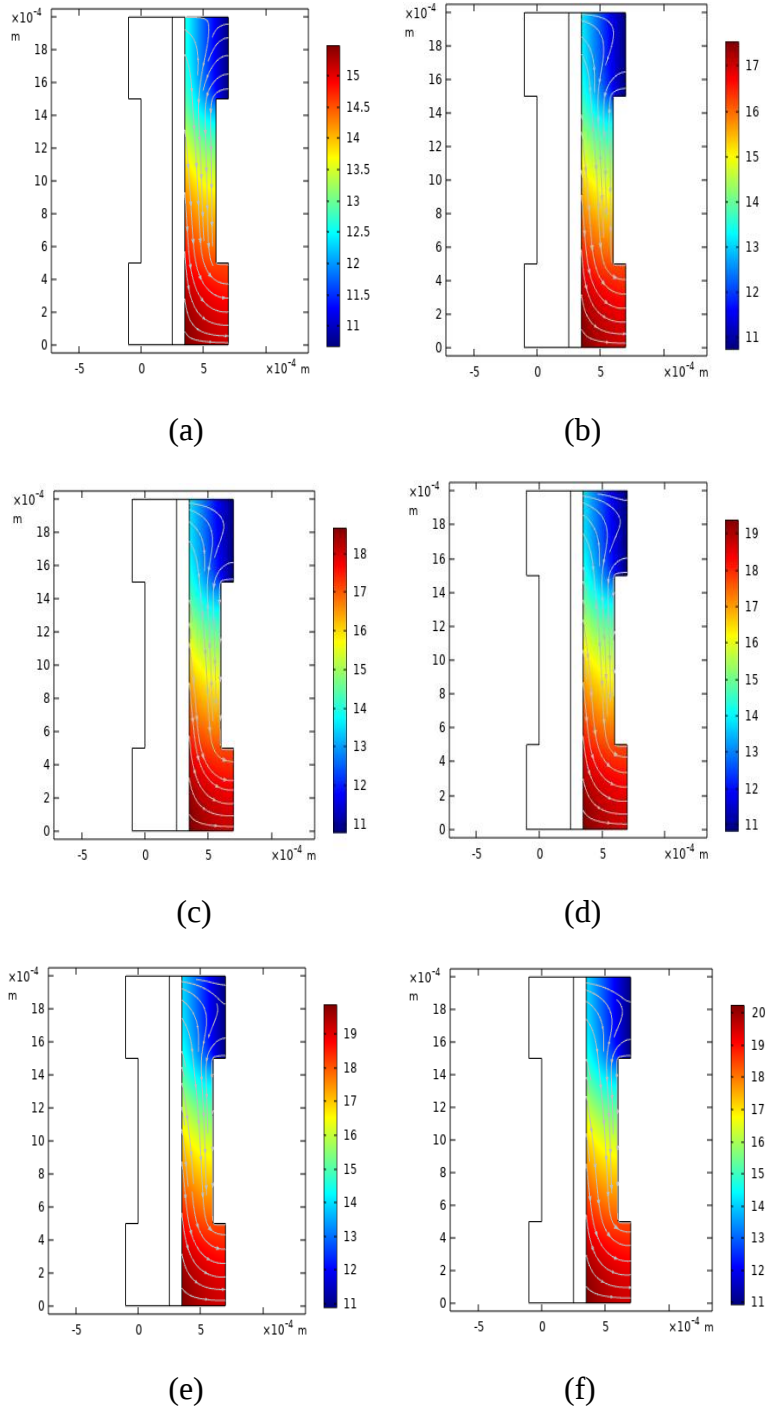


Figure IV.13 : Distribution de l'eau (mol/m³). Conditions de modélisation

((a) 0.042, (b) 0.084, (c) 0.126, (d) 0.168, (e) 0.21, (f) 0.294), avec 1 (Mol/L) d'hydrogène.

IV.4.Conclusion :

Les résultats ont conduit à la conclusion qu'une amélioration considérable des performances de la pile à combustible influencer par une meilleure température et meilleure concentration de l'O₂.

CONCLUSION GENERALE ET PERSPECTIVES.

Le travail présenté dans ce mémoire de fin d'étude concerne l'optimisation des paramètres du modèle électrochimique d'une pile à combustible de type PEMFC. Notre travail est subdivisé en quatre parties. Une première partie, qui concerne la recherche bibliographique sur les piles à combustibles afin de donner leurs développements dans le temps, leurs principes de fonctionnement ainsi que leurs applications et l'état de l'art sur les PEMFC. La deuxième partie concerne la modélisation de la pile à combustible. Alors que la troisième partie concerne le modèle par **COMSOL 5.5 MULTIPHYSICS** en 2D, à la fin le quatrième chapitre concerne la présentation et l'interprétation des résultats obtenus.

Pour une meilleure compréhension des phénomènes ayant lieu dans une PEMFC ; un modèle mathématique a été utilisé l'outil numérique choisi pour la résolution de ces équations est logiciel COMSOL MULTIPHYSICS en 2D.

Ceci nous a permis de connaître mieux les phénomènes ayant lieu à l'intérieur des milieux poreux de la couche de diffusion (GDL), de la couche catalyseur (CL) dans les deux côtés anodique et cathodique ainsi que la membrane.

Les paramètres qu'on peut être modifiés pour améliorer les performances de la PEMFC est la température, la concentration de l'oxygène.

Les conclusions de cette étude peuvent être récapitulées dans les points suivants :

- La température influe fortement sur les sur la performance de la pile à combustible.
- La température de $(293K^0)$ on aura la meilleur performance de la pile.
- L'augmentation de température on aura une diminution sur la densité de courant dans la membrane ; sécheresse de la dernière ce qui diminue la performance de la pile. et aussi une diminution des électrodes de la pile PEMFC.
- L'augmentation de température on aura plus de consommation de l'hydrogène et de l'oxygène de cote anodique et cathodique et H₂O comme produit.
- La concentration de l'oxygène de (0.294) on aura la meilleure performance de la pile.

- La concentration de l'oxygène O_2 on a constaté que l'utilisation d'une concentration plus élevée améliore la tension, densité de puissance et les densités de courant. On aura plus de consommation pour l'hydrogène et le contraire est juste ce qui signifie l'augmentation de densité de courant.
- l'augmentation de la concentration de l'oxygène O_2 on aura plus de consommation pour l'hydrogène et de l'oxygène de cote cathodique et qui devrai produire plus d'eau.

REFERENCE.

- [1] ABDI Hamid, «Ecoulements diphasiques dans les milieux poreux : application aux piles à combustible», Thèse de doctorat, Université De BLIDA 1, Janvier 2019.
- [2] EL ABBASSI Abderrezak, «Modélisations d'une cellule de pile pemfc et Optimisation de ses paramètres de fonctionnement par l'algorithme génétique», Mémoire de master, Université de Saad Dahleb BLIDA, 2015.
- [3] Attia A. El-Fergany, «Extracting optimal parameters of PEM fuel cells using Slap Swarm Optimizer», Renewable Energy 119 (2018) 641e648.
- [4]Alireza Askarzadeh and Alireza Rezazadeh, «Optimization of PEMFC model Parameters with a modified particle swarm optimization» Int. J. Energy Res. 2011; 35:1258–1265.
- [5]Youcef Abdelhak, Telemcani Belkacem, «Modélisation d'une pile à combustible de type PEM», Mémoire de master, Université de M'sila, 2017.
- [6] F. Amrouche, B. Mahmah, M. Belhamel et H. Benmoussa, Modélisation d'une pile à combustible PEMFC alimentée directement en hydrogène-oxygène et validation expérimentale, Centre de Développement des Energies Renouvelables, B.P. 62, Route de l'Observatoire, Bouzaréah, Alger,2005.
- [7] Belhout karim, Simulation d'une pile à combustible de type PEMFC, Thèse, USDB, 2012.
- [8]. Bouchra Wahdame, «Analyse et optimisation du fonctionnement de piles à Combustible par la méthode des plans d'expériences», Energie électrique. Université de Franche-Comté; Université de Technologie de Belfort-Montbéliard, 2006. Français. tel-00163317.
- [9] MEDKOUR mihoub «etude théorique et expérimentale d'une pile d.m.f.c. » 2019
- [10] MEDKOUR mihoub «etude théorique et expérimentale d'une pile d.m.f.c. » 2019
- [11] Saïd KHOUDIRI, «Commande et Optimisation d'un Système Energétique Hybride (SEH): Application à l'Énergie Renouvelable», Thèse de doctorat, 22 November 2018.
- [12]. J.RAMOUSSE (2005) : Transferts couples masse-charge-chaleur dans une cellule de pile a combustible a membrane polymère, thèse de doctorat, Institut National Polytechnique de Lorraine.

- [13]. J. LACHAIZE(2004): Etude des stratégies et des structures de commande pour le pilotage des systèmes énergétiques à Pile à Combustible (PAC) destinés à la traction, thèse de doctorat, Institut National Polytechnique De Toulouse
- [14]. H.BEKKOUCHE(2014) : Etude numérique des phénomènes de transferts de chaleur et de masse dans une pile a combustible de type PEMFC, thèse de magistère, Université Constantine 1
- [15].M.HAMOUR(2012) : Contribution A L'étude Des Contraintes Thermodynamique Dans Les Piles A Combustible, thèse de doctorat, Université mouloud Mammeri-Tizi-Ouzou
- [16].M. BELATEL *, F.Z. AISSOUS et F. FERHAT(2012) : Contribution à l'étude d'une pile à combustible de type PEMFC utilisée pour la production d'énergie électrique verte, Revue des Energies Renouvelables Vol. 15 N°1 (2012) 13 – 28
- [17]. J. LACHAIZE(2004): Etude des stratégies et des structures de commande pour le pilotage des systèmes énergétiques à Pile à Combustible (PAC) destinés à la traction, thèse de doctorat, Institut National Polytechnique De Toulouse
- [18].D.NGUYEN(2010) : Modélisation Dynamique Du « Cœur » De Pile A Combustible De Type PEM, thèse de doctorat, Institut National Polytechnique de lorraine
- [19].F.AMROUCHE(2004) : Caractérisation Expérimentale D'un Assemblage Stacks De Piles A Combustibles A Membrane Echangeuse De Protons, thèse d'ingénieur d'état, Université des sciences et de la technologie Houari Boumediene
- [20]. Zerhouni Fatima Zohra, « Développement et optimisation d'un générateur énergétique hybride propre à base de PV-PAC », thèse de doctorat, USTOMB, 2009. Tableau .
- [21]. DANA-MARIA PACLISAN(2013) : *optimisation par la modélisation de l'expérimentation vibratoire des systèmes pile a combustible pour le transport terrestre*, thèse de doctorat, Université de technologie de Belfort-Montbéliard
- [22]. H.MAHCENE(2012) : *Etude des causes d'augmentation de la température dans une pile à oxyde solide (SOFC): Etude bidimensionnelle du champ de température*, thèse de doctorat, Université Kasdi Merbah Ouargla

- [23]. S. BELKACEM BOUZIDA (2011) : *Etude des phénomènes des écoulements des gaz dans les canaux dans une pile à combustible de type PEMFC*, thèse de magistère, Université El Hadj Lakhdar, Batna.
- [24]. A.HADDAD(2009) : *Modélisation dynamique non linéaire de la pile à combustible du type PEM : Application à la régulation de l'humidité dans la membrane électrolytique*, thèse de doctorat, Université De Technologie De Belfort-Montbéliard.
- [25]. EL-HASSANE AGLZIM (2009) : *Caractérisation Par Spectroscopie d'impédance De l'impédance Complexe d'une Pile A Combustible En Charge – Evaluation De l'influence De l'humidité –*, thèse de doctorat, Université Henri Poincaré – Nancy1.
- [25]. E.FRAPPÉ (2012) : *Architecture de convertisseur statique tolérante aux pannes pour générateur pile à combustible modulaire de puissance-traction 30kW*, thèse de doctorat, Université Paris-Sud
- [26].N.MEDDOUR (2010) : *simulation numérique du transfert thermique incluant le mode de rayonnement dans une pile à combustible à oxyde solide*, thèse de magistère, Université Kasdi Merbah Ouargla
- [27]. J. B. Zina, "Phénomènes de transport dans les piles à combustible à membrane échangeuse de protons (PEMFC)," *université de batna*, 2017.
- [28]. B. Zina, "Phénomènes de transport dans les piles à combustible à membrane échangeuse de protons (PEMFC)," *université de batna*, 2017.
- [29]. B. Zina, "Phénomènes de transport dans les piles à combustible à membrane échangeuse de protons (PEMFC)," *université de batna*, 2017.
- [30] Berning T, Lu DM, Djilali N, Three-dimensional computational analysis of transport phenomena in a PEM fuel cell, *J Power Sources*, 106(1–2) (2002) 284–94.
- [31] Nguyen PT, Berning T, Djilali N. Computational model of a PEM fuel cell with serpentine gas flow channels, *J Power Sources*, 130(1–2) (2004) 149–57.
- [32] A.J.Bard, L.R.Faulkner, *Electrochemical Methods*, Wiley, New York, 1980.

- [33] Lampinen MJ, Fomino M. Analysis of free energy and entropy changes for half-cell reactions. *J Electrochem Soc*, 140(12) (1993) 3537–46.
- [34] T.E. Springer, T.A. Zawodzinski, S. Gottesfeld, Polymer electrolyte fuel cell model, *Journal of the Electrochemical Society*, 138 (8) (1991) 2334-2342.
- [35] T.A. Zawodzinski, T.E. Springer, J. Davey, A comparative study of water uptake by and transport through ionomeric fuel cell membranes, *Journal of Electrochemical Society*, 140 (1993) 1981.
- [36] D.M. Bernardi, M.W. Verbrugge, A mathematical model for the solid-polymer-electrode fuel cell, *J. Electrochem. Soc*, 139 (1992) 2477–2491.
- [37] Gurau V, Liu H, Kakac S, Two-dimensional model for proton exchange Membrane fuel cells, *AIChEJ*, 44 (11) (1998) 2410–22.
- [38] Al-Baghdadi MARS, Al-Janabi HAKS, Modeling optimizes PEM fuel cell performance using three-dimensional multi-phase computational fluid dynamics model, *Energy Convers Manag*, 48(12) (2007) 3102–19.
- [39] I. Pivac, F. Barbir Inductive phenomena at low frequencies in impedance spectra of proton exchange membrane fuel cells a review, *J Power Sources*, 326 (2016), pp. 112-119
- [40] Shima Shari, Rahbar Rahimi¹, Davod Mohebbi-Kalhari, C. Ozgur Colpan, Numerical investigation of methanol crossover through the membrane in a direct methanol fuel cell, *Iranian Journal of Hydrogen & Fuel Cell* 1(2018) 21-33
- [41] Z. Shi and X. Wang, Two-Dimensional PEM Fuel Cells Modeling using COMSOL Multiphysics, in *Modelling and Simulation*, G. Petrone and G. Cammarat, Eds. I-Tech Education and Publishing, 2008.
- [42] D. Cheddier and N. Munroe, Mathematical model of a PEMFC using a PBI membrane, *Energy Convers. Manag.*, vol. 47, no. 11–12, pp. 1490–1504, Jul. 2006.
- [43] O. F. Atacan, D. Ouellette, and C. O. Colpan, Two-dimensional multiphase non-isothermal modeling of a flowing electrolyte Direct methanol fuel cell, *Int. J. Hydrog. Energy*, Jul. 2016.

[44] Saied ME, Ahmed KI, Ahmed MA, Nemat- alla MM, El- Sebaie MG. Numerical Study of Solid Oxide Fuel Cell Performance with Helical and Serpentine Flow Field Designs. Int J. 2015; 4(3): 27- 33.