



MINISTRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR
ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE
UNIVERSITE « Abbès LAGHROUR » DE KHENCHELA
FACULTE DES SCIENCES ET DE TECHNOLOGIE



Département de Génie Mécanique

N° de série :.....

Mémoire de fin d'études

Pour l'obtention du diplôme de Master (L.M.D)

Spécialité : Génie Mécanique

Option : Construction Mécanique

Thème

*Etude Numérique De L'influence Des
Conditions Opératoires D'une Pile A Combustible
PEMFC Sur La Conductivité De La Membrane*

Réalisé par : - MEBROUKI Toufik
- DJEBNOUNE Fateh Eddine

Dirigé par : Dr. ZAAMOUCHE Radhia

Membres de jury :

Mr. KHADRAOUI Fayçal

M.A.A

Université de Khenchela

Président

Mr. BERKIA Abdelhak

M.A.A

Université de Khenchela

Examineur

Présenté le 11/07/2021

Remercîment

Tout d'abord, nous tenons à remercier Dieu Tout-Puissant qui nous a aidés à faire ce travail.

Nous tenons à remercier Dr. ZAAMOUCHE Radia, qui a géré et suivi ce travail, et nous la remercions pour son aide et son soutien.

Nous remercions également les professeurs du Département de Génie Mécanique de l'Université Abbas Laghrour de Khenchela : Mansouri Khelifa, Berkia Abdelhak, Khadraoui Fayçal, Chitour Moura, Sid Noureddine, Hannachi Bouzid, Himeur Nabil, Messaoudi Issam.

Meilleures salutations aux membres du jury pour l'honneur qu'ils nous ont fait en participant à l'évaluation de notre travail.

Toutes les personnes qui nous ont aidés directement ou indirectement à terminer cette affaire.

A nos chers parents.

à tous nos amis.

Dédicaces

Tout d'abord, je rends grâce à Allah pour toutes ses bénédictions et la grâce de la réussite.

A toute ma famille.

A tous les enseignants du département Génie mécanique ;

Je dédie ce modeste travail.

Mebrouki .t

Djebnourne .f

Sommaire

Liste Des Figures	I
Liste des tableaux	III
Nomenclature	IV
Introduction générale.....	1

Chapitre I : GENERALITES SUR LES PILES A COMBUSTIBLES

I.1. Historique des piles à combustible.....	3
I.2.Principe de fonctionnement de la pile à combustible	3
I.3. Éléments composant une cellule de PEMFC.....	5
I.3.1.La membrane (électrolyte).....	5
I.3.2. Les électrodes.....	7
I.3.3.Couches de diffusion (Backing).....	8
Assemblage Membrane – Electrodes.....	8
I.3.4. Les plaques bipolaires.....	9
I.4.Les grands domaines d’applications de la pile à combustible PEMFC.....	9
I.4.1.Les applications portables.....	9
I.4.2.Les applications transport.....	10
I.4.3.Les applications stationnaires.....	10
I.5.Les différents types de piles à combustible.....	10
I.6.Les avantages et inconvénients de la Pile à combustible	11
I.6.1.Les avantages.....	11
I.6.2.Les inconvénients.....	11
I.7.Performance idéales des PEMFC (Phénomène thermodynamique).....	12
I.8.Performance actuelles.....	15
I.8.1. Polarisation d'activation (perte d'activation).....	15
I.8.2. Polarisation ohmique (perte Ohmique)	15
I.8.3. Polarisation de concentration.....	16
I.9. L'eau dans la membrane d'une PEMFC.....	16
L'assèchement.....	16
Le noyage	17

Chapitre II : MODELISATION NUMERIQUE

II.1. Introduction.....	21
II.2. Transport dans la membrane.....	21
II.2.1. Transport de charge.....	21
II.2.2. Transport de l'eau.....	22
II.2.2.1. Transport de l'eau par diffusion.....	23
Teneur en eau.....	23
Coefficient de diffusion de l'eau.....	23
II.2.2.2. Transport de l'eau par électro-osmose.....	25
Coefficient de transport électro-osmotique:	25
II.2.2.3. Transport de l'eau par convection.....	26
II.3. Equations gouvernantes les phénomènes de transport.....	26
II.3.1. Equation de conservation de masse	26
II.3.2. Loi de DARCY.....	27
II.3.3. Equation de conservation d'énergie.....	27
II.3.4. Loi d'Ohm	28
II.4. Méthode numérique.....	28
II.4.1. Discrétisation de l'équation de conservation de masse.....	28
II.4.2. Discrétisation de l'équation de l'énergie.....	29
II.2.3. Conditions initiales et conditions aux limites.....	30
II.5. Organigramme de calcul.....	32

Chapitre III : RESULTATS ET DISCUSSIONS

III.1. Introduction.....	34
III.2. Influence de la densité de courant.....	35
III.3. Influence des pressions aux interfaces.....	39
III.4. Influence des humidités relatives.....	42
III.5. Influence de la perméabilité de la membrane.....	46
Conclusion générale.....	49
Bibliographie.....	51

Liste des figures

Figure I. 1 : La pile de W.Grove.....	3
Figure I.2 : Principe de fonctionnement d'une pile à combustible.....	5
Figure I. 3 : Décomposition d'une PEMFC.....	5
Figure I.4 : Différentes familles de membranes.....	7
Figure I.5 : Structures chimiques des membranes.....	7
Figure I.6 : L'électrode de pile à combustible.....	7
Figure I.7 : le cœur de la pile à combustible.....	8
Figure I.8 : plaque dipolaire	8
Figure I.9 : types de piles à combustible en fonction de leur puissance.....	11
Figure I.10 : types de piles à combustible en fonction de la température de Fonctionnement et de l'électrolyte.....	12
Figure I.11 :Allure schématique d'une courbe de polarisation.....	16
Figure I.12 : Schéma récapitulatif des scénarios d'assèchement et de noyage.....	17
Figure III.1: Profils de concentration à différentes densités de courant Pour $a_a = 0.5$ et $a_c = 0.319$	30
Figure III.2: Profils de concentration à différentes densités de courant Pour $a_a = 0.3$ et $a_c = 0.5$	31
Figure III.3 : Teneur en eau de la membrane à $x = e_m/2$ en fonction du temps Pour $a_a = 0.6$, $a_c = 0.3$	32
Figure III.4 : Profils de température à différentes densités du courant pour $a_c = 0.3$, $a_a = 0.5$	33
Figure III.4 : Profils de concentration à différentes pressions anodiques pour $a_c = 0.3$, $a_a = 0.5$ et $i = 0.5 \text{ A/cm}^2$	34
Figure III.6 : Profils de concentration à différentes pressions cathodiques pour $a_a = 0.5$, $a_c = 0.3$, $i = 0.5 \text{ A/cm}^2$	35
Figure III.7 : Pertes ohmiques pour différentes pressions appliquées aux cotés de la membrane pour $a_a = 0.3$, $a_c = 0.6$	36
Figure III.8 : Concentration en eau pour différentes humidités relatives à l'interface anode-membrane à $i = 0.5 \text{ A/cm}^2$	37
Figure III.9 : Concentration en eau pour différentes humidités relatives à l'interface cathode- membrane à $i = 0.5 \text{ A/cm}^2$	37

Figure III.10 : Pertes ohmiques à différentes humidités relatives à l'interface anode-membrane.....	30
Figure III.11 : Profils de la température à différentes humidités relatives côté cathode pour $a_a = 0.2$, $i = 0.5 \text{ A/cm}^2$	39
Figure III.12 : Profils de la température à différentes humidités relatives coté anode pour $a_c = 0.2$, $i = 0.5 \text{ A/cm}^2$	40
Figure III.13 : Concentration en eau pour différentes perméabilités de la membrane pour $a_a = 0.3$, $a_c = 0.6$, $i = 0.4 \text{ A/cm}^2$, $P_{\text{cat}} = 2 \text{ bar}$, $P_{\text{an}} = 1 \text{ bar}$	41
Figure III.14 : Pertes ohmiques pour différentes perméabilités de la membrane.....	42

Liste des tableaux

Tableau I.1 : type de piles à combustible en fonction de leur température de fonctionnement.....	11
Tableau III. 1 : Résultats de simulation obtenue par la modélisation unidimensionnelle des phénomènes de transports de masse et de chaleur dans une membrane Nafion d'une pile PEMFC.....	33

Nomenclature

Lettres romaines

a	[-]	Activité de l'eau
C_{H^+}	[mol/m ³]	Concentration de proton
C_{H_2O}	[mol/m ³]	Concentration locale en eau dans la membrane
C_{p_s}	[J/Kg.K]	Chaleur spécifique de la membrane sèche
$C_{p_{H_2O}}$	[J/Kg.K]	Chaleur spécifique de l'eau
$C_{p_{H^+}}$	[J/Kg.K]	Chaleur spécifique de proton
D_{H^+}	[m ² /s]	Coefficient de diffusion effectif des protons dans l'eau
D_{H_2O}	[m ² /s]	Coefficient de diffusion effectif de l'eau dans la membrane
E_{pile}	[V]	Tension réelle de la pile
E_{th}	[V]	Tension théorique
E_w	[g/mol]	Poids équivalent de la membrane
e_m	[m]	Epaisseur de la membrane
F	[C]	Constante de Faraday (F = 96485 C)
ΔG	[J/mol]	Variation de l'énergie de Gibbs
I	[A/m ²]	Densité de courant
$J_{i,CONV}$	[mol/m ² .s]	Flux global de l'espèce i par convection
$J_{i,DIFF}$	[mol/m ² .s]	Flux global de l'espèce i par diffusion
$J_{i,NET}$	[mol/m ² .s]	Flux global de l'espèce i
$J_{i,os}$	[mol/m ² .s]	Flux global de l'espèce i par électro-osmose
K_p	[m ² /s]	Perméabilité de la membrane
M	[Kg/mol]	Masse moléculaire
M_{H^+}	[Kg/mol]	Masse moléculaire de proton
n	[-]	Nombre théorique d'électrons
P	[bar]	Pression
R_{mem}	[Ω]	Résistance équivalente de la membrane à la conduction des protons
R	[J/mol.K]	Constante des gaz parfaits (R = 8.314 J/mol.K)
T_f	[K]	Température de fonctionnement
t	[s]	Temps
U_m	[m/s]	Vitesse de mélange (eau et proton)

Lettres grecques

\emptyset	[V]	Potentiel électrique
μ	[Kg/m.s]	Viscosité dynamique
η_{ohm}	[V]	Polarisation ohmique
λ	[-]	Teneur en eau de la membrane
λ_m	[W/m.K]	Coefficient de conduction thermique de la membrane
ρ_s	[g/m ³]	Masse volumique de la membrane sèche
ρ_{H^+}	[g/m ³]	Masse volumique de proton
ρ_{H_2O}	[g/m ³]	Masse volumique de l'eau
ξ	[-]	Coefficient de transport électro-osmotique
σ_m	[Ω ⁻¹ .m ⁻¹]	Conductivité protonique de la membrane

Indices

s	S èche
an	Interface membrane- an ode
cat	Interface membrane- cat hode
os	O smose
diff	D iffusion
con	C onvection
mem	M embrane
a	A node
c	C athode

INTRODUCTION

GENERALE

Introduction générale

L'évolution de l'humanité et sa demande incessante en énergie ont fait que la détérioration de notre planète verte devient inévitable si des solutions viables ne sont pas mises à jour pour la contrer. Ce duel universel de l'exploitation acharnée de l'homme et son Environnement peut être résolu, non seulement donner un nouveau souffle à l'épuisement de l'énergie fossile, mais aussi, permettre à notre environnement de connaître enfin un développement durable loin de toute pollution. La solution est le recours aux énergies renouvelables et nouvelles, renouvelables, car inépuisables, nouvelles, car même si ses sources d'énergie existent depuis la nuit des temps, mais leurs exploitations techniques ne sont révélées qu'à la fin du dix-neuvième siècle pour certaines. Le choix de l'hydrogène comme vecteur énergétique n'est plus une question à débattre car mis à part ces quelques inconvénients, totalement maîtrisable par le développement de la technologie, il convient absolument à ce que l'hydrogène devienne le vecteur énergétique du futur et cela grâce à la pile à combustible [1].

Les piles à combustible sont des dispositifs électrochimiques qui convertissent directement l'énergie chimique d'une réaction d'un carburant et d'un oxydant (habituellement hydrogène et l'oxygène) en électricité. Contrairement aux batteries, qui sont des dispositifs de stockage d'énergie, les piles à combustible sont considérées comme une énergie nette, sans émissions des produits polluants et nocifs, mais produisant de l'eau et de la chaleur. Selon la température de fonctionnement, on peut distinguer plusieurs types des piles à combustible, parmi les quel son cite la pile à membrane échangeuse de protons ou PEMFC. Cette pile a l'avantage de la technologie tout solide et un fonctionnement à basse température. La membrane y joue le double rôle de séparateur et d'électrolyte [2].

Afin d'assurer le bon fonctionnement de la pile PEMFC, la membrane doit présenter, en particulier un transfert efficace des protons de l'anode vers la cathode. En effet, une grande conductivité protonique est requise. De plus, la membrane doit être imperméable aux gaz (l'hydrogène et l'oxygène).

La membrane la plus employée est le Nafion de Dupont, car elle possède une grande stabilité chimique et thermique. Bien que cette membrane ait une très bonne conduction protonique lorsqu'elle est bien hydratée, car la performance de la pile varie beaucoup en fonction de la teneur en eau de la membrane.

Le but de notre travail est l'étude des phénomènes de transport de masse dans la membrane d'une pile à combustible et l'étude de l'influence des conditions opératoires (pression, humidité relative, densité de courant...) sur les profils de concentration en eau et de température dans l'épaisseur de la membrane. Ces derniers ont une importante influence sur les pertes ohmiques de la pile à combustible.

Ce mémoire comporte trois chapitres :

Le premier chapitre présente des généralités sur les piles à combustible et le mode de fonctionnement des piles à combustible à membrane échangeuse de protons (PEMFC). On a présenté alors, les composantes d'une cellule élémentaire, les domaines d'application et les performances de ce type de piles, enfin on a présenté la problématique de gestion de l'eau dans une cellule de pile.

Le second chapitre présente une modélisation unidimensionnelle des phénomènes de transport dans l'épaisseur de la membrane. Ensuite, les différentes équations, ainsi que les conditions limites et initiales sont établies.

Dans le troisième chapitre les résultats de la simulation sont présentés dans le but d'illustrer l'influence de différentes conditions de fonctionnement (la densité de courant, la pression et l'humidité relative des gaz) sur les profils de concentration en eau et de température.

Enfin, une conclusion générale sur le problème étudié est présentée.

CHAPITRE I

***GENERALITES SUR LES
PILES A COMBUSTIBLES***

I.1. Historique des piles à combustible

En 1839 William GROVE décrit la première pile à combustible (figure : I.1). Elle fonctionne à l'hydrogène et à l'oxygène, à basse température, avec des électrodes de platine et de l'acide sulfurique comme électrolyte. Dès 1855 de nouveaux concepts, à haute température, utilisant des électrolytes fondus, sont mis au point. Les résultats sont modestes et en 1939, le bilan du premier siècle de recherche est plutôt pessimiste, malgré les potentialités indéniables de la filière Hydrogène.

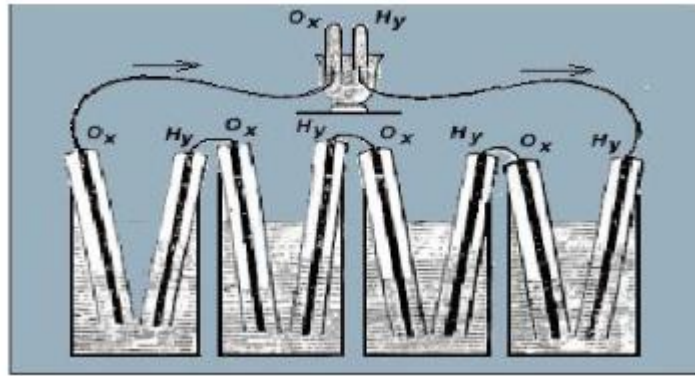


Figure I. 1 : La pile de W.Grove.

Après 1945, trois groupes de recherche (aux Etats Unis, en Allemagne et en URSS) reprennent les études sur les principaux types de générateur, en apportant les améliorations technologiques nécessaires à un développement “ industriel ”. Ces travaux ont débouché sur les concepts actuels. Les premières applications des piles à combustible sont les programmes spatiaux (NASA : les années 60, APOLLO : 1968). L'un des moments clefs du développement des recherches sur les piles à combustible est le premier choc pétrolier de 1973. Pour la première fois apparaît la nécessité d'être indépendant sur le plan énergétique. Ceci accélère les recherches tant aux Etats-Unis qu'en Europe et au Japon. Les recherches menées pendant cette période seront essentiellement fondamentales et viseront à développer et à améliorer les différents composants de la pile. En 1970, Du Pont met au point la membrane Nafion, qui sert d'électrolyte aux piles de type PEMFC. Malgré quelques réussites, les piles restent à cette époque coûteuse, de faible durée de vie, avec un volume et un poids trop importants pour être insérées dans un véhicule. Pour ces raisons, les travaux ralentissent ; en France, seule une veille technologique ainsi que des travaux universitaires sont maintenus. En revanche, les états Unis, le Japon et l'Allemagne ont poursuivi leurs recherches. Les PEMFC

ont connu un développement accentué après 1987 avec la création de la firme canadienne Ballard.

C'est réellement au début des années 1990 que les piles connaissent un regain d'intérêt. Cela est dû à plusieurs facteurs déterminants. L'aggravation des problèmes environnementaux liés à l'effet de serre, les progrès technologiques et les premiers prototypes (véhicules, installations stationnaires) sont développés.[1].

I.2. Principe de fonctionnement de la pile à combustible

Les piles PEMFC fonctionnent selon le principe inverse de l'électrolyse de l'eau. L'hydrogène est utilisé comme carburant et l'oxygène (ou l'air) sert de comburant. Le principe de fonctionnement des piles consiste à récupérer l'énergie de combustion de l'hydrogène pour la convertir en énergie électrique. La réaction globale se produisant dans la pile peut s'écrire :



Afin de récupérer l'énergie dégagée par la réaction, il est nécessaire de dissocier la réaction totale en deux demi-réactions, séparées spatialement par un électrolyte. L'électrolyte d'une pile PEMFC est une membrane polymère imperméable aux gaz, isolant les réactions d'oxydation de l'hydrogène à l'anode et de réduction de l'oxygène à la cathode. Cet électrolyte permet le passage de protons sans être conducteur électronique, donc sans passage d'électrons. Les groupements acides présents dans sa structure, généralement SO₃H ou COOH, assurent le transfert des protons entre l'anode et la cathode.

Les électrodes (anode et cathode) sont les lieux de demi-réactions électrochimiques suivantes:



Ces demi-réactions sont catalysées, à l'aide de platine en général, pour augmenter les cinétiques de réactions, relativement lentes aux faibles températures de fonctionnement de la pile. A l'anode, l'hydrogène se dissocie en protons et électrons. Les protons traversent alors l'électrolyte pour se recombiner à la cathode avec les molécules d'oxygène, et ainsi former de l'eau. Les électrons circulent dans un circuit externe pour boucler le circuit électrique. Un schéma de fonctionnement est donné sur la (Figure : I. 2) [3].

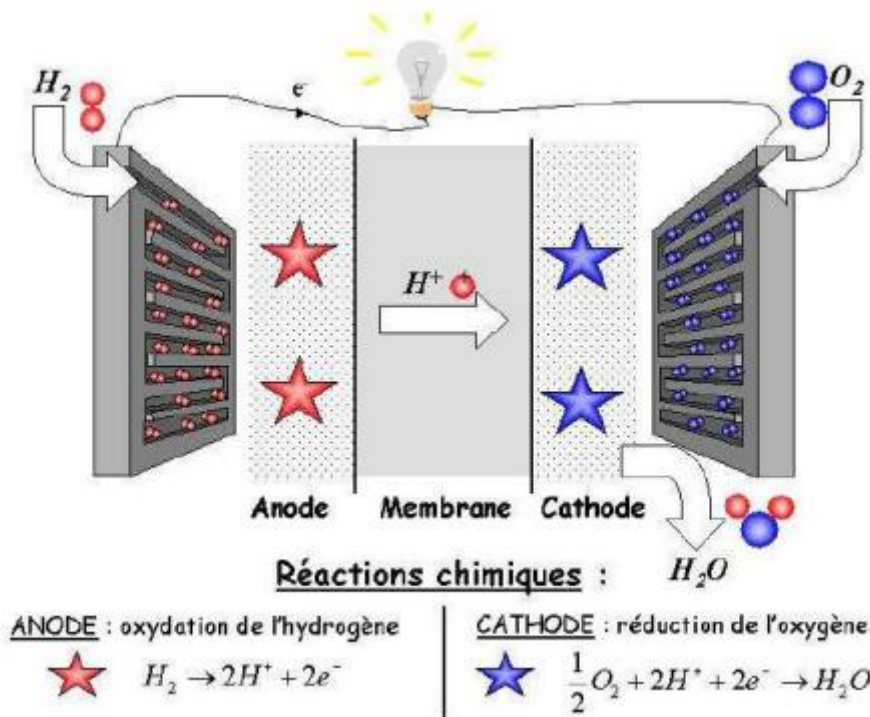


Figure I.2 : Principe de fonctionnement d'une pile à combustible

I.3. Éléments composant une cellule de PEMFC

Les PEMFCs ont une structure de base commune à toutes les technologies de pile. Il s'agit d'un assemblage anode / électrolyte / cathode (Électrode / Membrane / Électrode ou MEA) [4].

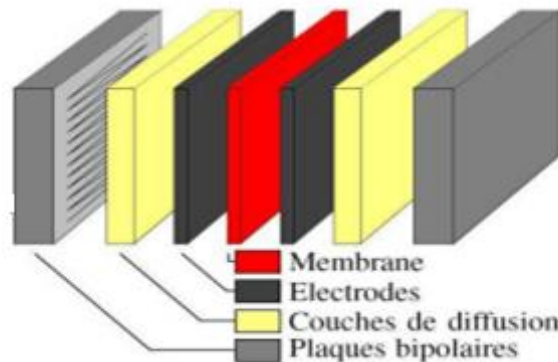


Figure I.3 : Décomposition d'une PEMFC

I.3.1. La membrane (électrolyte)

Dans les PEMFC, le rôle de l'électrolyte est assuré par une membrane polymère d'une épaisseur comprise actuellement entre 25 et 50 μm . La membrane garantit le transport des protons depuis l'anode vers la cathode tout en préservant une isolation électronique entre les

deux compartiments. Par ailleurs, elle doit offrir une faible perméabilité aux gaz. Parmi les différentes familles de membrane utilisées dans les PEMFC (figure : I.4), les membranes acides perfluorosulfoniques (PFSA) répondent au mieux à ces critères. La structure chimique de ces membranes est rappelée par la (figure: I.5) [5].

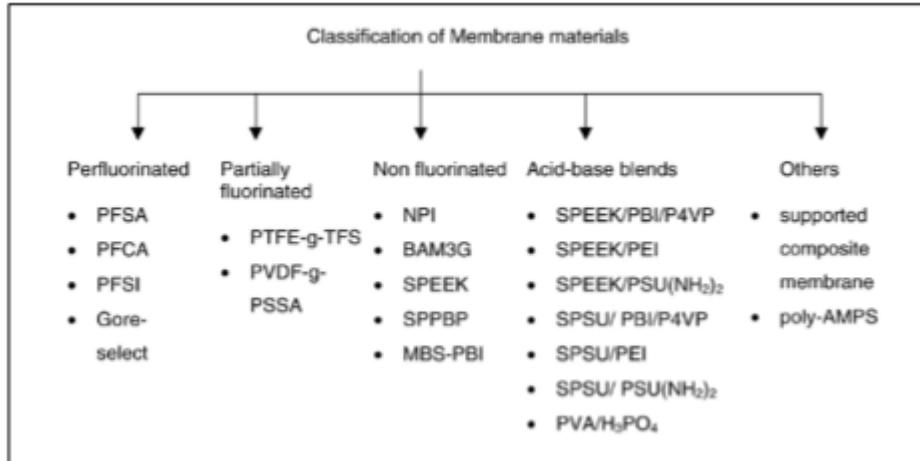


Figure I.4 : Différentes familles de membranes

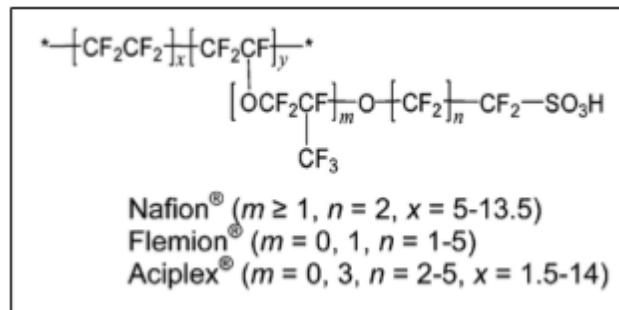


Figure I.5 : Structures chimiques des membranes

Le groupe SO₃H est lié ioniquement, de sorte que la fin de la chaîne latérale est en fait un ion SO avec un ion H. C'est pourquoi une telle structure est appelée un ionomère. En raison de leur nature ionique, les extrémités des chaînes latérales ont tendance à se regrouper dans la structure globale de la membrane. Bien que le squelette de type Teflon soit hautement hydrophobe, l'acide sulfonique à l'extrémité de la chaîne latérale est hautement hydrophile. Les régions hydrophylles sont créées autour des amas de chaînes latérales sulfonées. C'est pourquoi ce type de matériau absorbe des quantités d'eau relativement importantes (dans certains cas jusqu'à 50 % en poids). Le mouvement des ions H dans les régions bien hydratées rend ces matériaux conducteurs de protons [6].

I.3.2. Les électrodes

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). (Figure : I.6)

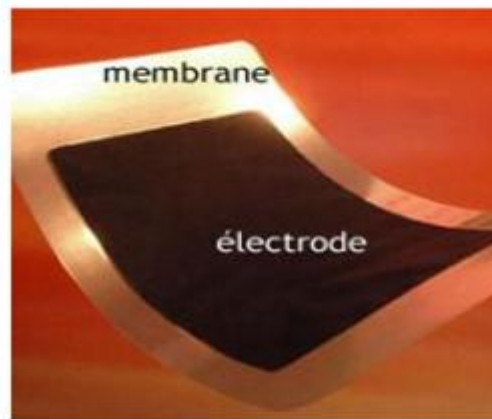


Figure I.6 : L'électrode de pile à combustible

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

La cathode : On réalise la réduction de l'oxygène, selon la réaction précédente

Le 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.

I.3.3. 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. (Figure : I.7) 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

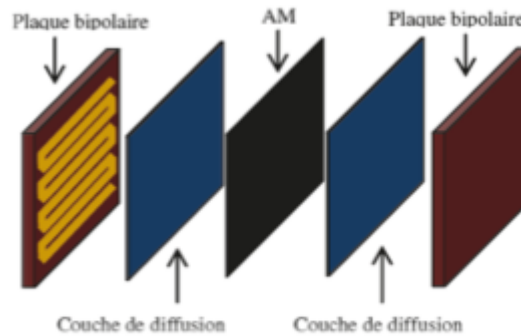


Figure I.7 : le cœur de la pile à combustible

I.3.4. Les plaques bipolaires

Ces plaques sont dites bipolaires car elles assurent simultanément l'alimentation en gaz 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 (figure: I.8).

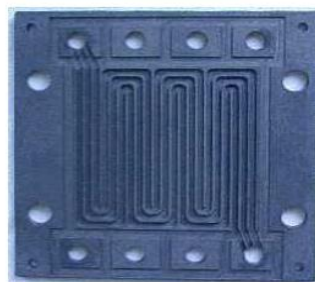


Figure I.8 : plaque dipolaire

1.3.4. Assemblage Membrane – Electrodes

Les électrodes sont à base d'un matériau carboné sur lequel sont déposés des grains de platine jouant le rôle de catalyseur. Leur épaisseur est de l'ordre de quelques dizaines de micromètres. Le processus de réalisation conduit à les déposer sur la membrane où elles s'imbriquent fortement. Une fois ce processus réalisé, l'ensemble constitue ce que l'on appelle l'Assemblage Membrane–Electrodes (en Anglais MEA, Membrane Electrode Assembly).

Les travaux actuels portent sur :

- La réduction de la quantité de platine qui est un matériau onéreux ;
- La réduction de l'épaisseur de la membrane qui en s'opposant à la circulation des ions intervient pour une part non négligeable dans la résistance interne du système;
- La recherche de matériaux de membrane pouvant fonctionner à des températures supérieures aux 40 – 90 degrés actuels. [7].

I.4. Les grands domaines d'applications de la pile à combustible PEMFC

Les marchés potentiels des piles à combustible sont multiples, et sont généralement classés en trois grandes familles [8]:

- ◆ Les applications portables.
- ◆ Les applications transport
- ◆ Les applications stationnaires

I.4.1. Les applications portables

Tous les appareils portables souffrent actuellement de leur faible autonomie (il est nécessaire de les recharger régulièrement). Avec une pile à combustible, l'autonomie ne dépendra que de la taille du réservoir de carburant (hydrogène ou méthanol), il sera ainsi possible de recharger une batterie assurant la fourniture d'électricité. Parmi les différents types de piles, deux seulement sont susceptibles d'avoir des applications portables, il s'agit des PEMFC et DMFC. Ces deux piles sont caractérisées par leur faible température de fonctionnement (entre 60 et 80°C), ce qui diminue les problèmes de gestion thermique et fonctionnent à température ambiante.

I.4.2. Les applications transport

Le transport est le domaine d'application à l'origine du développement de la pile à combustible à partir du début des années 90. On distingue deux applications des piles dans le domaine de l'automobile, la propulsion du véhicule (20 à 50 kW) et l'alimentation en électricité des appareils de bord (climatisation, appareils électroniques). La pile à combustible utilisée pour la propulsion est la PEMFC qui satisfait aux critères de rapidité, de niveau de température, etc.

A l'horizon 2030, ce sera le marché mondial qui sera visé, avec une production annuelle supérieure à 50 millions de véhicules, soit 10 % du marché global.

I.4.3. Les applications stationnaires

Les applications stationnaires sont diverses, résultant du large spectre de puissance de ce type de pile (quelques kW à plusieurs MW) ainsi que la diversité du carburant utilisable pour son fonctionnement. Dans les applications stationnaires, on distingue :

- ◆ La production individuelle ou domestique (2 à 7 kW).
- ◆ La production collective (200 kW à quelques MW) Pour cette application, le marché mondial potentiel est estimé à 45 milliards d'euros à l'horizon 2030. A noter que l'implantation de piles à combustibles destinés à cette application a déjà débutée en Europe et aux Etats-Unis. En plus de la production d'électricité, un autre intérêt de la pile à combustible est la génération de chaleur qui peut permettre d'assurer le chauffage ou la production d'eau chaude, appelé cogénération.

I.5. Les différents types de piles à combustible

Il existe six types de piles à combustible (tableau I. 1) classifiées selon leur électrolyte ou leur température de fonctionnement (figures : I.9 et I.10). Parmi celles-ci, deux sont couramment utilisées dans les applications transports et stationnaires. La PEMFC est largement utilisée dans les domaines de recherche applicatifs grâce aux avantages qu'elle propose [9].

Tableau I.1 : type de piles à combustible en fonction de leur température de fonctionnement

Type de PAC	Température	Électrolyte
Pile à acide phosphorique (PAFC)	150-200 °C	H ₃ PO ₄
Pile à membrane échangeuse de protons (PEMFC)	50-100 °C	Membrane polymère
Pile à méthanol direct (DMFC)	50-100 °C	Membrane polymère
Pile alcaline (AFC)	25-75 °C, 100-250 °C	KOH
Pile à carbonate fondu (MCFC)	600-700 °C	Sel de carbonate fondu CO ³⁻
Pile à oxyde solide (SOFC)	500-1 000 °C	Céramique (oxyde de zircon)

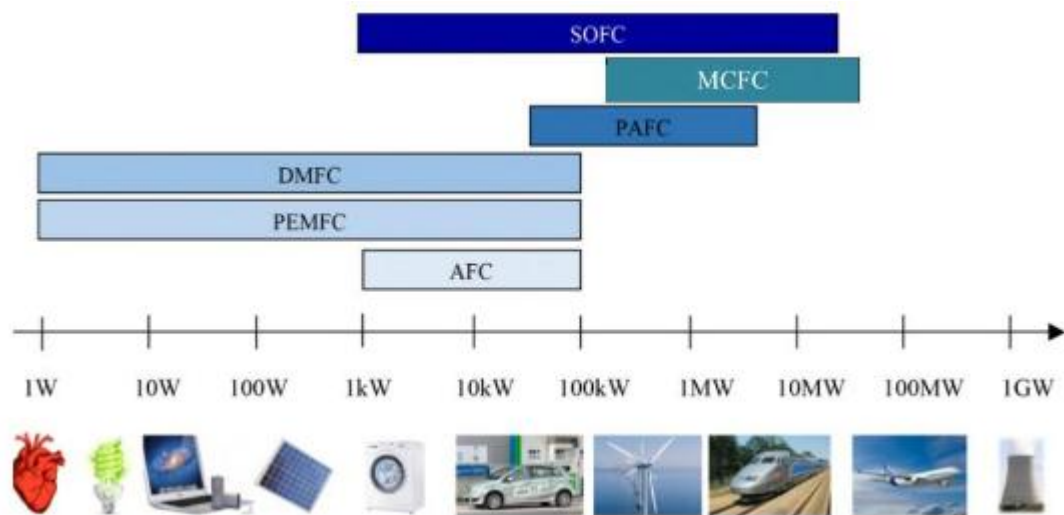


Figure I.9 : types de piles à combustible en fonction de leur puissance

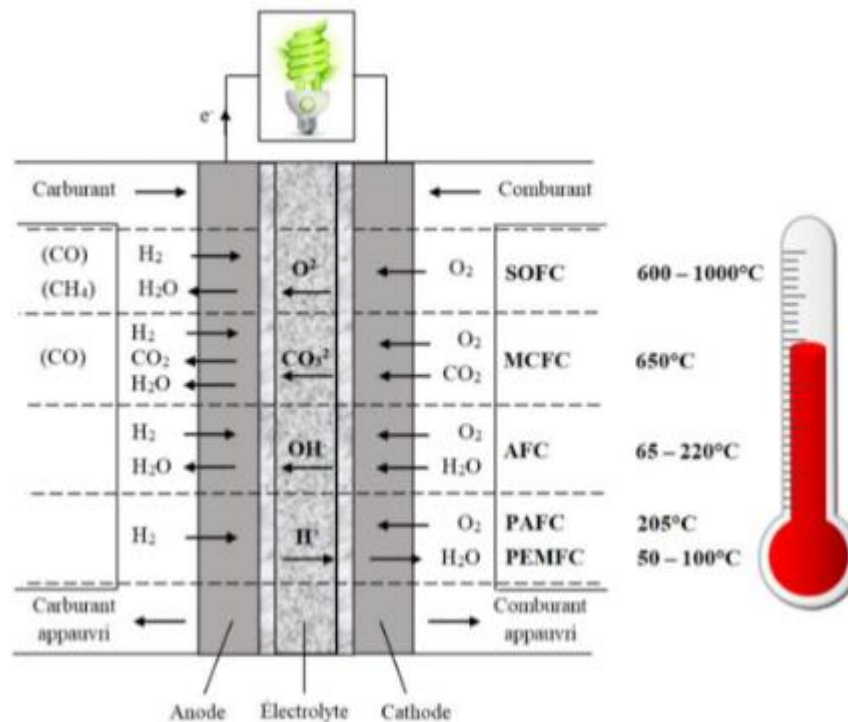


Figure I.10 : types de piles à combustible en fonction de la température de Fonctionnement et de l'électrolyte

I.6. Les avantages et inconvénients de la Pile à combustible

Bien qu'elle présente des avantages, la pile à combustible souffre encore de plusieurs inconvénients et limites. Nous les décrivons ci-après.[10].

I.6.1. Les avantages

Les avantages de PAC sont nombreux :

- Un rendement énergétique global plus important par rapport aux systèmes énergétiques habituels, comme le moteur thermique, variant entre 40% à 70 %. En fait, pour le PEM, nous pouvons avoir 50% et plus, si nous utilisons de l'hydrogène pur. De plus, pour les applications stationnaires, ce rendement peut aller jusqu'à 80% à 90%, car nous récupérons l'énergie perdue sous forme de chaleur que nous pourrions utiliser pour d'autres fins.
- Les faibles taux d'émissions des gaz polluants et à effet de serre, notamment le CO_2 , le CO , et le CH_4 .

- Nous citons, aussi, les faibles émissions acoustiques, ces piles fonctionnent silencieusement, ce qui est un avantage surtout pour les applications en transport.
- L'absence du travail et de mouvement mécanique dans la pile qui permet d'éviter la contrainte d'usure mécanique. La fatigue et la durabilité est limitée par d'autres facteurs surtout chimiques liés à l'empoisonnement des sites actifs de catalyseur.
- Une large gamme de température d'opération, permettant de diversifier l'utilisation de PAC. Par exemple, les piles à faible température s'emploient dans les domaines mobiles, tandis que les autres (hautes températures) sont destinées pour des applications domestiques ou nous pourrions utiliser la chaleur produite pour le chauffage.

I.6.2. Les inconvénients

Certes ce type de pile présente beaucoup d'avantages, mais la commercialisation de PAC à grande échelle est encore impossible vu des inconvénients qui limitent encore son industrialisation. On trouve notamment :

- Le coût très élevé de la pile qui est l'inconvénient majeure. Ce coût élevé est dû à l'utilisation des métaux nobles comme catalyseur (souvent le platine). On lui ajoute l'usinage coûteux de canaux de distribution de plaques bipolaires, ainsi que la membrane.
- La contrainte liée au combustible qui est le dihydrogène dans le cas de PEM : soit l'utilisation d'un reformeur, ou utilisation directe de H_2 avec les précautions qu'on doit prendre à cause de risque d'explosion et d'inflammabilité de ce dernier.
- Un autre problème majeur s'ajoute surtout pour les PAC de type PEM destinées aux applications en transport concerne la durée de vie de pile qui est encore limitée (entre 3000h et 5000h). Ceci est dû aux durées de vie limitées de différentes composantes de la pile, notamment, les électrodes, le catalyseur et surtout la membrane, causant ainsi une chute de potentiel et de rendement. Les recherches sont amenées à considérer d'autres matériaux dans la fabrication des composantes ou de trouver des nouveaux matériaux qui résistent aux différentes causes de dégradation (usure, oxydation, empoisonnement, assèchement de la membrane...), ou encore de perfectionner les matériaux actuels.
- Le problème de température d'opération pour le PEM qui est relativement faible (aux alentours de 80°C) par rapport à ce qu'on souhaite (entre 150°C et 200°C) pour améliorer l'activité de catalyseur. Ceci est dû au fait que la membrane construite, généralement en Nafion, est incapable de maintenir l'eau au-dessus de 100°C .

- Un point très complexe concerne la gestion de l'eau au cœur de la pile. Il s'agit de l'évacuation de l'eau produite au niveau de la cathode, l'humidification de comburant et carburant à l'entrée de la pile. L'enjeu est de maintenir la membrane constamment humide sans sur-humidification qui bloquerait la diffusion de protons et sans assèchement qui provoquerait la chute de rendement.

I.7. Performance idéales des PEMFC (Phénomène thermodynamique)

Dans la pile à combustible, l'énergie apportée est l'énergie chimique contenue dans les gaz entrant dans la pile. L'énergie fournie par la pile c'est l'énergie électrique et thermique. Ces dernières sont faciles à quantifier.

Contrairement à l'énergie fournie, l'énergie chimique n'est pas facile à quantifier. Ici, la définition de l'énergie libre de Gibbs qui s'applique:

L'énergie libre de Gibbs est reliée à l'enthalpie H par le terme de création d'entropie TS . Ce dernier traduit la deuxième loi de la thermodynamique, selon l'équation suivant :

$$G = H - T \quad (I.3)$$

le travail fait par un système électrique étant égal à la charge qui circule dans la cellule multipliée par la force motrice, le potentiel, il est alors permis d'écrire la relation suivante :

$$W_{max} = n \cdot F \quad (I.4)$$

W_{max} : le travail maximum (J)

n : la charge qui circule dans la cellule (Columb)

F : la force motrice (N)

E : énergie potentiel (J) Ceci permet donc d'exprimer l'énergie de Gibbs comme suit :

$$\Delta G = -nFE_{\text{électrode}} \quad (I.5)$$

$E_{\text{électrode}}$: est le potentiel standard pour une réaction donnée à une électrode,

n : le nombre d'électrons échangés

F : la constante de Faraday La quantité E_{pile} ainsi définie est le potentiel standard de la pile dans des conditions opératoires données. Cette quantité correspond à l'énergie disponible pour faire circuler une charge entre deux électrodes [8].

$$E_{pile} = E_{cathode} - E_{anode} \quad (I.6)$$

$E_{\text{électrode}}$: est le potentiel standard pour une réaction donnée à une cathode

E_{cathode} : est le potentiel standard pour une réaction donnée à une anode

I.8. Performance actuelles

I.8.1. Polarisation d'activation (perte d'activation)

La polarisation d'activation (η_{act}) intervient dès que le ralentissement de la cinétique de la réaction électrochimique à l'électrode (faibles densités de courant) influence le rendement de cette dernière. Aux très faibles densités de courant (0 à 100 mA/cm²), un phénomène de surtension d'activation se produit aux électrodes. En effet, la réaction électrochimique n'est possible que si l'énergie nécessaire à la réaction est apportée pour dépasser la barrière d'activation (surtension). Dans une pile PEMFC (H_2/O_2), la réduction de l'oxygène est notablement plus lente que l'oxydation de l'hydrogène, Ainsi, la cinétique de la réaction de réduction à la cathode régite directement la perte de tension (50 – 100 mV). [11].

I.8.2. Polarisation ohmique (perte Ohmique)

La polarisation ohmique correspond aux pertes ohmiques dans la pile. Ces pertes sont issues des résistances aux flux d'électrons et/ou de protons des matériaux constituant la cellule:

- Electrodes : résistances électriques et protoniques
- Interfaces : résistances électriques et protoniques
- Membrane : résistance protonique

Les résistances des électrodes et de la membrane obéissent à la loi d'Ohm. La perte ohmique totale peut s'exprimer par l'équation linéaire suivante :[11].

$$\eta_{ohm} = i \times R \quad (I.7)$$

Où “ i ” représente la densité de courant et “ R ” la résistance ohmique totale. Majoritairement, la résistance ohmique totale provient de la résistance protonique de la membrane. La polarisation ohmique intervient dans la région intermédiaire pseudo-linéaire sur la courbe de polarisation (figure I.11).

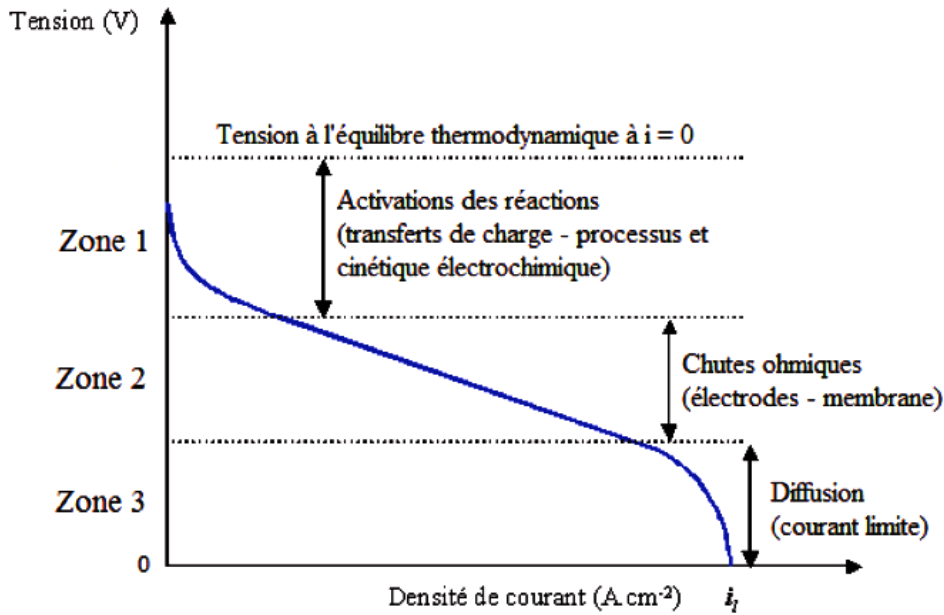


Figure I.11 : Allure schématique d'une courbe de polarisation

1.8.3. Polarisation de concentration

La polarisation de concentration intervient dès que des limitations de disponibilité des réactifs apparaissent (transfert de masse). De ce fait, une partie de l'énergie de la réaction est employée pour gouverner le transfert de masse. Cette utilisation partielle de l'énergie se traduit par une chute de la tension (perte de performance). Ainsi, aux fortes densités de courant, la limitation de transfert de masse peut être due :

- A la cathode, à un noyage de l'électrode par la grande quantité d'eau produite par la réaction; l'inondation des sites actifs limite la diffusion de l'oxygène, ou à un dessèchement de la membrane qui peut diminuer la conduction protonique.
- A l'anode, à un assèchement du conducteur ionique qui peut empêcher le transfert des protons.

1.9. L'eau dans la membrane d'une PEMFC

L'assèchement

La problématique du transport protonique dans la membrane Nafion constitue l'une des principales causes qui poussent à mieux étudier la gestion de l'eau dans la pile. En effet, le Nafion assure son rôle de conducteur protonique seulement s'il est bien hydraté. Si par

exemple la membrane n'est pas bien hydratée, sa résistance électrique va augmenter entraînant des pertes ohmiques et des augmentations locales de température. Ceci va accélérer les phénomènes d'évaporation ce qui assèche encore plus la membrane entraînant une auto-dégradation accélérée des performances et de la membrane elle-même puisque le Nafion est relativement instable sous les hautes températures [12].

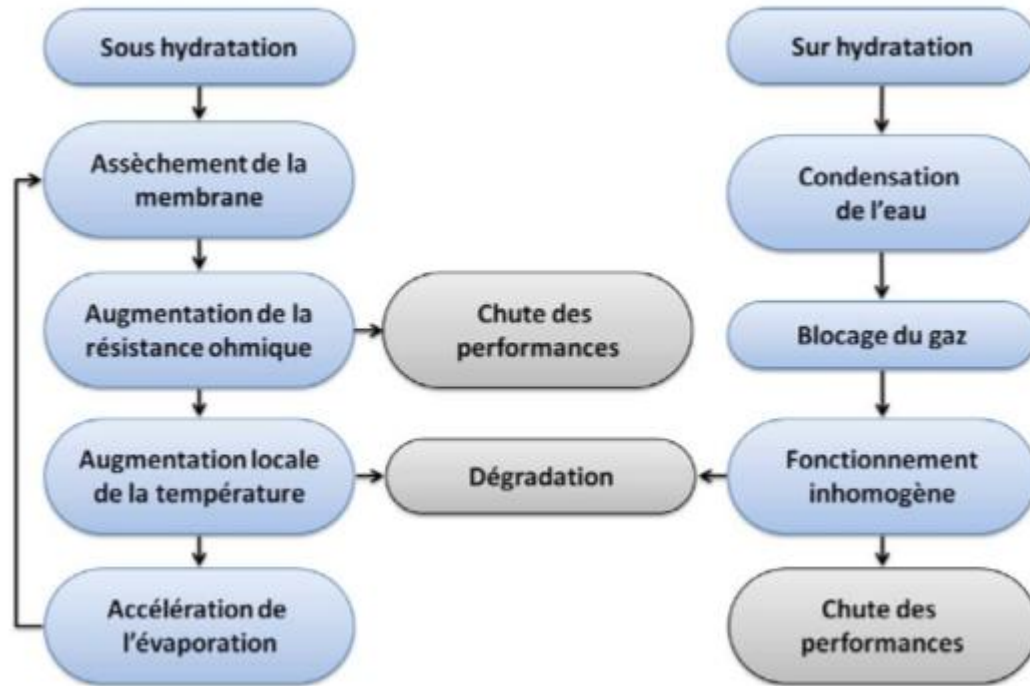


Figure I.12 : Schéma récapitulatif des scénarios d'assèchement et de noyage

Donc une membrane bien hydratée est primordiale pour assurer le bon fonctionnement de la pile (voir Figure I.12). Très souvent les gaz injectés dans une pile sont humidifiés afin d'obtenir une bonne hydratation de la membrane et du Nafion présent dans les CLs surtout à l'anode. Ce système d'humidification complexifie le système PEMFC et en augmente le coût.

Le noyage

La présence d'eau dans les électrodes d'une PEMFC n'est pas liée uniquement à la réduction de l'oxygène à la cathode. Les principales « sources » d'eau sont :

- La production d'eau par la réaction électrochimique,
- L'eau présente dans les gaz humidifiés injectés à la cathode et à l'anode,

- Le phénomène d'électro-osmose (Electro-Osmotic Drag ou EOD) qui consiste en la migration des molécules d'eau de l'anode vers la cathode en traversant la membrane, accrochées aux protons.
- La diffusion des molécules d'eau à travers la membrane de la cathode à l'anode sous l'effet d'un gradient de concentration.

Ces phénomènes de transport et de production d'eau conduisent à des pressions partielles élevées de vapeur d'eau dans les pores des électrodes et aussi dans les canaux. Ce fait combiné au fonctionnement des PEMFCs à faible température (typiquement 80°C) rend les conditions opératoires plus favorables pour la présence d'eau sous forme liquide (surtout si les matériaux sont hydrophiles). La présence de l'eau liquide est très problématique dans le domaine des PEMFCs. Elle peut conduire au noyage des pores dans les différentes couches des électrodes et aussi des canaux de distributions des gaz. Le noyage bloque l'accès des gaz et conduit à un fonctionnement inhomogène dans les cellules. Ceci accélère la dégradation des composants et cause une chute des performances (voir Figure : I.11).

CHAPITRE II

***MODELISATION
NUMERIQUE***

II.1. Introduction

Afin d'assurer un bon fonctionnement de la pile à combustible, la membrane doit présenter diverses propriétés, en particulier un transfert efficace des protons de l'anode vers la cathode. La membrane électrolyte, de type Nafion, possède une conductivité protonique beaucoup plus élevée si son contenu en eau est important. Le contenu en eau dans la membrane électrolyte est déterminé par l'équilibre entre la production de l'eau dans la cathode, par la réaction électrochimique, et son transport durant le fonctionnement de la pile.

Ainsi ce chapitre présente une modélisation numérique unidimensionnelle du phénomène de transport de masse, de chaleur et de charge dans l'épaisseur de la membrane. Cette dernière est considérée comme un milieu poreux.

II.2. Transport dans la membrane

Dans les piles à combustible de type PEMFC, la membrane Nafion doit transporter les protons de l'anode vers la cathode. Ces membranes étant hydratées, le transport de l'eau doit être pris en compte également.

De ce fait, le transport de ces deux espèces résulte de phénomènes de migration, de diffusion et de convection et le flux de l'espèce i est donné par :

$$J_{i,NET} = J_{i,OS} + J_{i,DIFF} + J_{i,CONV} \quad (II.1)$$

Où:

$J_{i,NET}$: Flux globale de l'espèce i .

$J_{i,OS}$: Flux de l'espèce i par électro-osmose.

$J_{i,DIFF}$: Flux de l'espèce i par diffusion.

$J_{i,CONV}$: Flux de l'espèce i par convection.

II.2.1. Transport de charge

Dans la membrane, les protons migrent par convection (mouvement global de la solution) à la vitesse U_m et par diffusion sous l'effet d'un gradient de potentiel électrochimique μ_{H^+} . La densité de flux molaire de protons $J_{H^+,NET}$ est donnée par la relation

de Nernst-Planck, où les flux de protons par convection et par diffusion sont exprimés comme suit :

$$J_{H^+,CONV} = C_{H^+}U_m \quad (II.2)$$

$$J_{H^+,DIFF} = -D_{H^+}\nabla\mu_{H^+} \quad (II.3)$$

Où : C_{H^+} est la concentration des protons

D_{H^+} est le coefficient de diffusion effective des protons dans l'eau.

U_m est la vitesse du mélange (eau et protons)

Le potentiel électrochimique est donné par la relation :

$$\nabla\mu = \nabla C_{H^+} + \frac{F}{RT_f} C_{H^+}\nabla\phi \quad (II.4)$$

Avec ϕ est le potentiel électrique

Si la concentration C_{H^+} est supposée uniforme dans la membrane, seul un gradient de potentiel électrique induit le déplacement par diffusion des particules chargées, et l'équation(II.3) s'écrit :

$$J_{H^+,DIFF} = -D_{H^+}\frac{F}{RT} C_{H^+}\nabla\phi \quad (II.5)$$

Finalement le flux de protons dans l'épaisseur de la membrane est exprimé comme suit :

$$J_{H^+,NET} = C_{H^+}U_m - D_{H^+}\frac{F}{RT} C_{H^+}\frac{\partial\phi}{\partial x} \quad (II.6)$$

II.2.2. Transport de l'eau

L'eau de la membrane est sous forme liquide, le transport de l'eau est gouverné par trois contributions :

- Un flux diffusif de type Fick, engendré par les gradients de concentration en eau dans la membrane. Ce flux peut être indifféremment dirigé de l'anode vers la cathode ou inversement selon les conditions d'humidification de la membrane.

- Un flux électro-osmotique traduisant le cortège de molécules d'eau emporté par chaque proton lors de sa traversée de la membrane. Ce flux, proportionnel au flux de protons i/F , est donc toujours dirigé de l'anode vers la cathode.
- Un flux convectif, il s'agit d'un déplacement d'espèces créé par le mouvement du milieu dans lequel elles sont présentes.

II.2.2.1. Transport de l'eau par diffusion

L'eau dans la membrane est adsorbée et se trouve alors sous forme liquide. En fonction de la concentration locale en eau dans la membrane, la loi de Fick permet d'estimer la contribution diffusive au flux d'eau total traversant la membrane. Ainsi, le flux diffusif molaire s'écrit :

$$J_{H_2O,DIFF} = -D_{H_2O} \frac{\partial C_{H_2O}}{\partial x} \quad (II.7)$$

Où : D_{H_2O} est le coefficient de diffusion effectif de l'eau dans la membrane

C_{H_2O} est la concentration locale en eau dans la membrane.

➤ Teneur en eau

Dans le cas des membranes, la quantité d'eau contenue dans le polymère s'exprime généralement en terme de teneur en eau, notée λ , plutôt qu'en terme de concentration. La teneur en eau est définie comme le nombre de molécules d'eau contenues dans la membrane par site actif.

La concentration en eau C_{H_2O} dans la membrane peut être reliée à la teneur en eau λ par [21]:

$$\lambda = \frac{E_w}{\rho_s} C_{H_2O} \quad (II.8)$$

Où

ρ_s : est la masse volumique de la membrane sèche

E_w : le poids équivalent de la membrane, c.à.d. la quantité de groupements ioniques dans les membranes.

➤ **Coefficient de diffusion de l'eau**

Le coefficient de diffusion de l'eau dans la membrane D_{H_2O} dépend de la température et de la teneur en eau dans la membrane.

Quelques relations proposées dans la littérature sont données ci-dessous (en m^2/s) :

- Fuller et Newmann [13] :

$$D_{H_2O} = 3,5 \cdot 10^{-6} \frac{\lambda}{14} \exp\left(-\frac{2436}{T_f}\right) \quad (\text{II.9})$$

- Gostamagna [14] :

$$D_{H_2O} = (5,1 - 0,66\lambda + 5,2 \cdot 10^{-2}\lambda^2 - 1,3 \cdot 10^{-3}\lambda^3) \cdot 10^{-10} \exp\left[2416 \left(\frac{1}{303} - \frac{1}{T_f}\right)\right] \quad (\text{II.10})$$

- Kulikovsky[18] :

$$D_{H_2O} = 4.1 \cdot 10^{-10} \left(\frac{\lambda}{14}\right)^{0.15} \left(1 + \tanh\left(\frac{\lambda - 2.5}{1.4}\right)\right)$$

- Springer et al., [15]

Pour $\lambda > 4$

$$D_{H_2O} = (2.563 - 0,33\lambda + 0.0264\lambda^2 - 0.000671\lambda^3) \cdot 10^{-10} \exp\left[2416 \left(\frac{1}{303} - \frac{1}{T_f}\right)\right] \quad (\text{II.11})$$

Pour $3 < \lambda \leq 4$

$$D_{H_2O} = (6.65 - 1.25\lambda) \cdot 10^{-10} \exp\left[2416 \left(\frac{1}{303} - \frac{1}{T_f}\right)\right] \quad (\text{II.12})$$

Pour $2 < \lambda \leq 3$

$$D_{H_2O} = (-3.25 + 2.05\lambda) \cdot 10^{-10} \exp\left[2416 \left(\frac{1}{303} - \frac{1}{T_f}\right)\right] \quad (\text{II.13})$$

- Bao et al.[17]

$$D_{H_2O} = \left[\frac{1}{(0.35\lambda)^4} + \frac{1}{(147)^4} \right]^{-1/4} \quad (\text{II.14})$$

- N.P. Siegel et al [21]

$$D_{H_2O} = 1.3 \cdot 10^{-4} \exp \left[2416 \left(\frac{1}{303} - \frac{1}{T_f} \right) \right] \quad (\text{II.15})$$

- Motupally et al. [16]

Pour $0 < \lambda \leq 3$

$$D_{H_2O} = 3.1 \cdot 10^{-7} \lambda \cdot (e^{0.28\lambda} - 1) \cdot e^{-2346/T_f} \quad (\text{II.16})$$

Pour $3 < \lambda \leq 17$

$$D_{H_2O} = 4.17 \cdot 10^{-8} \lambda \cdot (1 + 161e^{-\lambda}) \cdot e^{-2346/T_f} \quad (\text{II.17})$$

Dans notre cas, pour le calcul du coefficient de diffusion de l'eau, on a choisie d'utiliser la relation de Gostamagna (équation II.10).

II.2.2.2. Transport de l'eau par électro-osmose

Les protons qui traversent la membrane polymère de l'anode vers la cathode sont hydratés ($H^+(H_2O)^n$). Ainsi, le flux de protons dans la membrane induit un mouvement d'eau dans la même direction, c'est à dire de l'anode vers la cathode. Ce flux d'eau est appelé flux électro-osmotique. La densité de flux d'eau alors transportée par électro-osmose ($J_{H_2O,OS}$) est directement proportionnelle au nombre de molécules d'eau transportées (ξ) et au flux de protons (c'est à dire à la densité de courant i) :

$$J_{H_2O,OS} = \xi \frac{i}{F} \quad (\text{II.18})$$

Où ξ est le coefficient de transport de l'eau par électro-osmose.

F est la constante de Faraday

➤ Coefficient de transport électro-osmotique

Ce coefficient représente le nombre de molécules d'eau entraînées avec le passage d'un proton de l'anode vers la cathode. Encore une fois, plusieurs corrélations sont trouvées dans la littérature. D'un côté certains auteurs écrivent ce coefficient en fonction de la teneur en eau de la membrane et de l'autre, certains le considèrent constant.

Dutta et al. ainsi que Meier et Eigen berger présentent des modèles de variation de ξ avec la teneur en eau sous la forme de polynômes d'ordre 2.

- Dutta et al. [19]

$$\xi = -3.4 * 10^{-9} + 0.05\lambda + 0.0029\lambda^2$$

- Meier et Eigen berger[20]

$$\xi = 1 + 0.028\lambda + 0.0026\lambda^2$$

- Kulikovsky [18] l'estime $\xi = 1$ tant que la teneur en eau est inférieure à 9, et à l'inverse Fuller et Neuman [13] utilisent un coefficient constant et $\xi = 1,5$ pour des teneurs en eau supérieures à 9 environ

La relation principalement utilisée est celle de Springer et al.[15], on a utilisé cette relation, cette expression à une dépendance linéaire avec la teneur en eau.

$$\xi = \frac{2.5}{22} \lambda \tag{II.19}$$

En remplaçant l'expression du coefficient du transport électro-osmotique ainsi que l'expression de la teneur en eau dans l'équation (II.18), le flux électro-osmotique peut être exprimée comme suit :

$$J_{H_2O,OS} = \frac{2.5 E_w}{22 \rho_s} C_{H_2O} \frac{i}{F} \tag{II.20}$$

II.2.2.3. Transport de l'eau par convection

La densité de flux d'eau transportée par convection est donnée par la relation suivante :

$$J_{H_2O,CONV} = U_m C_{H_2O} \tag{II.21}$$

Enfin la densité de flux d'eau globale dans la membrane est obtenue en remplaçant les termes des équations (II.7), (II.20) et (II.21) dans l'équation (II.1) :

$$J_{H_2O,NET} = -D_{H_2O} \frac{\partial C_{H_2O}}{\partial x} + \frac{2.5 E_w}{22 \rho_m} \frac{i}{F} C_{H_2O} + U_m C_{H_2O} \tag{II.22}$$

II.3. Equations gouvernantes les phénomènes de transport

II.3.1. Equation de conservation de masse

La concentration de l'eau dans la membrane est régie par l'équation de continuité, exprimée en une dimension par la relation suivante :

$$\frac{\partial C_{H_2O}}{\partial t} = - \frac{\partial}{\partial x} J_{H_2O} \tag{II.23}$$

En remplaçant l'expression de la densité de flux dans l'équation (II.23), on obtient :

$$\frac{\partial C_{H_2O}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{H_2O} \frac{\partial C_{H_2O}}{\partial x} \right) - \left(\frac{2.5 E_w i}{22 \rho_s F} + U_m \right) \frac{\partial C_{H_2O}}{\partial x} \quad (II.24)$$

En posant : $B = \frac{2.5 E_w i}{22 \rho_s F} + U_m$

L'équation (II.24) devient alors:

$$\frac{\partial C_{H_2O}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{H_2O} \frac{\partial C_{H_2O}}{\partial x} \right) - B \frac{\partial C_{H_2O}}{\partial x} \quad (II.25)$$

II.3.2. Loi de DARCY

La vitesse de l'eau dans la membrane est évaluée à l'aide de l'équation de quantité de mouvement. En négligeant l'effet de la gravité, cette dernière se réduit à la loi de DARCY, on obtient :

$$U_m = -\frac{K}{\mu} \frac{\partial P}{\partial x} \quad (II.26)$$

En supposant que la pression varie linéairement dans l'épaisseur de la membrane, l'équation (II.26) s'écrit :

$$U_m = -\frac{K}{\mu} \left(\frac{P_{cat} - P_{an}}{e_m} \right) \quad (II.27)$$

Avec

K : la perméabilité de la membrane

μ : la viscosité dynamique du mélange

e_m : épaisseur de la membrane

II.3.3. Equation de conservation d'énergie

L'énergie est transportée par la conduction et la convection dans la membrane. Les effets des pertes ohmiques dans la membrane sont pris en considération par un terme source additionnel dans l'équation d'énergie :

$$(\rho C_p)_m \frac{\partial T}{\partial t} = \lambda_m \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} - (M C_p J)_m \frac{\partial T}{\partial x} + S \quad (II.28)$$

Où :

$$(\rho C_p)_m = \rho_s C_{p_s} + \rho_{H_2O} C_{p_{H_2O}} + \rho_{H^+} C_{p_{H^+}} \quad (\text{II.29})$$

Avec :

$$\rho_{H_2O} = M_{H_2O} C_{H_2O}$$

Et

$$\rho_{H^+} = M_{H^+} C_{H^+}$$

$$(MC_p J)_m = M_{H_2O} C_{p_{H_2O}} J_{H_2O} + M_{H^+} C_{p_{H^+}} J_{H^+} \quad (\text{II.30})$$

En développant les termes du flux d'eau et de protons, nous obtenons :

$$(MC_p J)_m = M_{H_2O} C_{p_{H_2O}} \left(-D_{H_2O} \frac{\partial C_{H_2O}}{\partial x} + B \cdot C_{H_2O} \right) + M_{H^+} C_{p_{H^+}} \left(C_{H^+} U_m - D_{H^+} \frac{F}{RT} C_{H^+} \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) \quad (\text{II.31})$$

Dans l'équation d'énergie λ_m représente le coefficient de conductivité thermique de la membrane et est supposé constant. Le terme source S est donné par la relation suivante :

$$S = \frac{i^2}{\sigma_m}$$

Où σ_m est la conductivité protonique de la membrane, elle est en fonction de la température et de la teneur en eau [22]:

$$\sigma_m = (0.5139\lambda - 0.326) \exp \left[1268 \left(\frac{1}{303} - \frac{1}{T_f} \right) \right] \quad (\text{II.32})$$

II.3.4. Loi d'Ohm

L'équation du potentiel de proton dérivé à partir de la loi d'Ohm, est exprimée comme suit :

$$\frac{\partial \phi}{\partial x} = -\frac{i}{\sigma_m} + \frac{F}{\sigma_m} C_{H^+} U_m \quad (\text{II.33})$$

Les deux termes représentent le flux de protons divisé par la conductivité de la membrane.

II.4. Méthode numérique

Les équations présentant les phénomènes de transport sont des équations à dérivées partielles, la résolution de ce type d'équations nécessite une méthode numérique. Nous avons choisi alors la méthode des différences finies.

La membrane est divisée en n points de longueur $\Delta x = e_m/n$

Où $x = 0$ correspond à l'interface anode-membrane

et $x = n.\Delta x$ correspond à l'interface membrane-cathode

II.4.1. Discrétisation de l'équation de conservation de masse

L'équation de conservation de masse (Equation II.25) peut être discrétisée en utilisant les différences centrées, les termes de cette équation s'écrivent donc :

$$\frac{\partial C_{H_2O}}{\partial t} = \frac{C_i^{t+1} - C_i^t}{\Delta t} \quad (II.34)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(D_{H_2O} \frac{\partial C_{H_2O}}{\partial x} \right) = \frac{D_{i+\frac{1}{2}} \left(\frac{C_{i+1}^{t+1} - C_i^{t+1}}{\Delta x} \right) - D_{i-\frac{1}{2}} \left(\frac{C_i^{t+1} - C_{i-1}^{t+1}}{\Delta x} \right)}{\Delta x} \quad (II.35)$$

En réarrangeant les termes, on obtient :

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(D_{H_2O} \frac{\partial C_{H_2O}}{\partial x} \right) = \frac{D_{i+\frac{1}{2}} C_{i+1}^{t+1} - \left(D_{i+\frac{1}{2}} + D_{i-\frac{1}{2}} \right) C_i^{t+1} + D_{i-\frac{1}{2}} C_{i-1}^{t+1}}{\Delta x^2} \quad (II.36)$$

$$B \frac{\partial C_{H_2O}}{\partial x} = B \frac{C_{i+1}^{t+1} - C_{i-1}^{t+1}}{2.\Delta x} \quad (II.37)$$

En Remplacent (II.34), (II.36) et (II.37) dans (II.25), on obtient :

$$\frac{C_i^{t+1} - C_i^t}{\Delta t} = \frac{D_{i+\frac{1}{2}} C_{i+1}^{t+1} - \left(D_{i+\frac{1}{2}} + D_{i-\frac{1}{2}} \right) C_i^{t+1} + D_{i-\frac{1}{2}} C_{i-1}^{t+1}}{\Delta x^2} - B \frac{C_{i+1}^{t+1} - C_{i-1}^{t+1}}{2.\Delta x} \quad (II.38)$$

Avec :

$$D_{i+\frac{1}{2}} = \frac{D_i + D_{i+1}}{2} \text{ et } D_{i-\frac{1}{2}} = \frac{D_i + D_{i-1}}{2}$$

Et en réarrangeant les termes de l'équation (II.38), on obtient :

$$\left[1 + \frac{\Delta t}{2\Delta x^2} (D_{i+1} + 2D_i + D_{i-1})\right] C_i^{t+1} = C_i^t + \left[\frac{\Delta t}{2\Delta x^2} (D_i + D_{i-1}) + B \frac{\Delta t}{2\Delta x}\right] + \left[\frac{\Delta t}{2\Delta x^2} (D_i + D_{i+1}) - B \frac{\Delta t}{2\Delta x}\right] C_{i+1}^{t+1} \quad (\text{II.39})$$

II.4.2. Discrétisation de l'équation de l'énergie

En divisant les termes de l'équation (II.28) par $(\rho C_p)_m$, on obtient :

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\lambda_m}{(\rho C_p)_m} \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} - \frac{(MC_p J)_m}{(\rho C_p)_m} \frac{\partial T}{\partial x} + \frac{S}{(\rho C_p)_m} \quad (\text{II.40})$$

En posant :

$$G = \frac{\lambda_m}{(\rho C_p)_m}$$

$$H = \frac{(MC_p J)_m}{(\rho C_p)_m}$$

L'équation précédant s'écrit donc :

$$\frac{\partial T}{\partial t} = G \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} - H \frac{\partial T}{\partial x} + \frac{S}{(\rho C_p)_m} \quad (\text{II.41})$$

En utilisant les différences centrées pour la discrétisation des termes de cette équation, on obtient :

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{T_i^{t+1} - T_i^t}{\Delta t} \quad (\text{II.42})$$

$$G \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = G \frac{T_{i+1}^{t+1} - 2T_i^{t+1} + T_{i-1}^{t+1}}{\Delta x^2} \quad (\text{II.43})$$

$$H \frac{\partial T}{\partial x} = H \frac{T_{i+1}^{t+1} - T_{i-1}^{t+1}}{2\Delta x} \quad (\text{II.44})$$

En remplaçant les équations(II.42), (II.43) et (II.44) dans (II.41) et réarrangement des termes, on obtient :

$$\left(1 + 2 \frac{\Delta t}{\Delta x^2} G\right) T_i^{t+1} = T_i^t + \left(\frac{\Delta t}{\Delta x^2} G + \frac{\Delta t}{2\Delta x} H\right) T_{i-1}^{t+1} - \left(\frac{\Delta t}{2\Delta x} H - \frac{\Delta t}{\Delta x^2} G\right) T_{i+1}^{t+1} + \Delta t \frac{S}{(\rho C_p)_m} \quad (\text{II.45})$$

II.2.3. Conditions initiales et conditions aux limites

- A l'instant $t = 0$, nous allons supposer une variation linéaire de la concentration et de la température dans l'épaisseur de la membrane, de ce fait la concentration et la température s'écrivent en fonction de la distance x :

$$C(x) = C_{an} + \frac{C_{cat} - C_{an}}{e_m} x \quad (II.46)$$

$$T(x) = T_{an} + \frac{T_{cat} - T_{an}}{e_m} x \quad (II.47)$$

- A l'interface membrane-anode ($x = 0$) :

Nous avons supposé des valeurs de concentration et de température fixes.

$$i = 1 : C_1 = C_{an} , T_1 = T_{an}$$

- A l'interface cathode-membrane ($x = e_m$): Nous avons supposé des valeurs de concentration et de température fixes.

$$i = n : C_n = C_{cat} , T_n = T_{cat}$$

Les concentrations en eau aux interfaces de la membrane sont liées à la teneur en eau :

$$C_{an} = \frac{\rho_s}{E_w} \lambda_a$$

$$C_{cat} = \frac{\rho_s}{E_w} \lambda_c$$

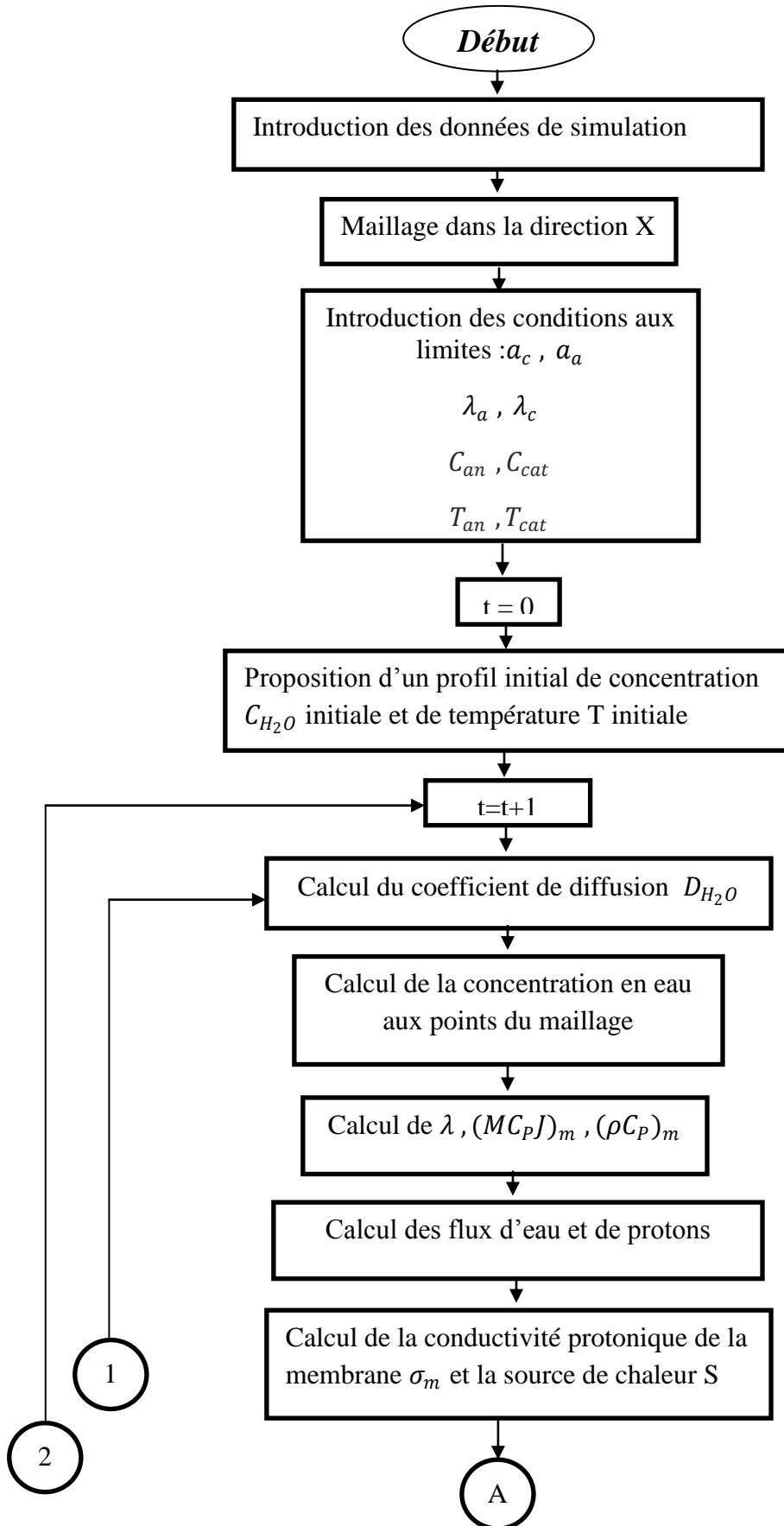
Aux interfaces de la membrane, les teneurs en eau sont liées aux activités de l'eau par les relations suivantes:

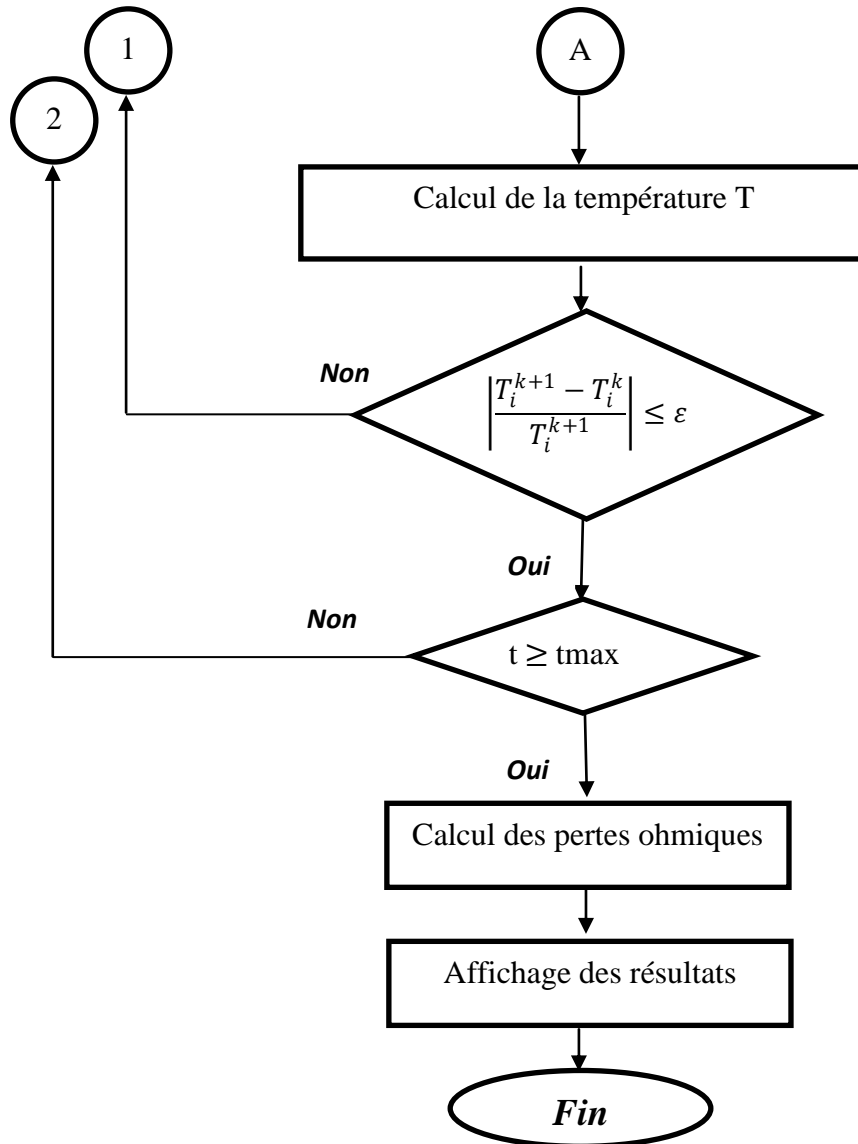
$$\lambda_a = 0.043 + 17.81a_a - 39.85 a_a^2 + 36 a_a^3$$

$$\lambda_c = 0.043 + 17.81a_c - 39.85 a_c^2 + 36 a_c^3$$

Pour la détermination du profil de concentration en eau ainsi que le champ de température dans l'épaisseur de la membrane, on a utilisé la méthode itérative de Gauss-Seidel pour la résolution de deux systèmes d'équations présentés par les équations (II.39) et (II.45). On a écrit alors un programme en langage Fortran, dont l'organigramme est présenté ci-dessous :

II.5. Organigramme de calcul





CHAPITRE III

RESULTATS ET DISCUSSIONS

Introduction :

Ce chapitre présente les résultats de simulation obtenue par la modélisation unidimensionnelle des phénomènes de transport de masse et de chaleur dans l'épaisseur d'une membrane Nafion d'une pile à combustible de type PEMFC. Les données de simulation sont présentées dans le tableau suivant :

Tableau III. 1 : Résultats de simulation obtenue par la modélisation unidimensionnelle des phénomènes de transports de masse et de chaleur dans une membrane Nafion d'une pile PEMFC

<i>Symbole</i>	<i>Valeur</i>	<i>unité</i>	<i>Référence</i>
C_{H^+}	1.2×10^{-3}	[mol/m ³]	[23]
D_{H^+}	4.5×10^{-5}	[cm ² /s]	[24]
C_{p_s}	852.63	[J/Kg.K]	[25]
M_{H^+}	1.0×10^{-3}	[Kg/mol]	[25]
$C_{p_{H^+}}$	2063	[J/Kg.K]	[25]
λ_m	100	[W/m.K]	[25]
$C_{p_{H_2O}}$	4190	[Kg/m ³]	
μ	8.91×10^{-4}	[kg/m.s]	[23]
e_m	175×10^{-6}	[m]	
ρ_s	1980	[Kg/m ³]	[26]
E_w	1.1	[Kg/mol]	[26]
T_{an}	353.9	[K]	
T_{cat}	353	[K]	
T_f	353	[K]	
K_p	1.8×10^{-18}	[m ²]	[13]

III.2. Influence de la densité de courant

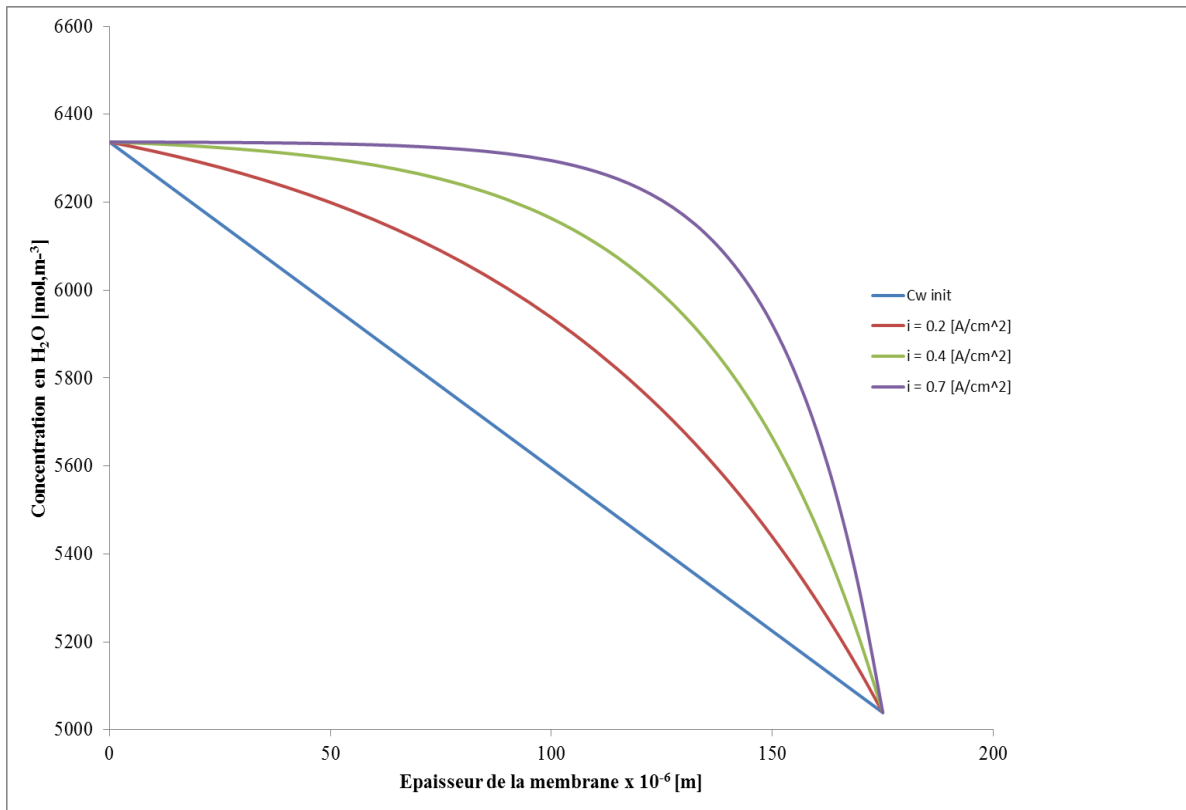


Figure III.1: Profils de concentration à différentes densités de courant

Pour $a_a = 0.5$ et $a_c = 0.3$

La figure (III.1) montre la variation de la concentration de l'eau dans l'épaisseur de la membrane à différentes densités de courant pour un gradient de pression nul entre l'anode et la cathode ($P_{an} = P_{cat} = 1\text{bar}$). Le trait bleu indique le profil de concentration de l'eau à l'état initial.

On remarque qu'en augmentant la densité de courant il y a une augmentation de la concentration en eau dans toute l'épaisseur de la membrane, cela est due à l'augmentation de la production de l'eau, qui est directement liée à la densité de courant, on remarque aussi une augmentation considérable de la concentration en eau du côté cathode. En effet aux fortes

densités de courant les molécules d'eau sont transportées de l'anode vers la cathode par le phénomène d'électro-osmose.

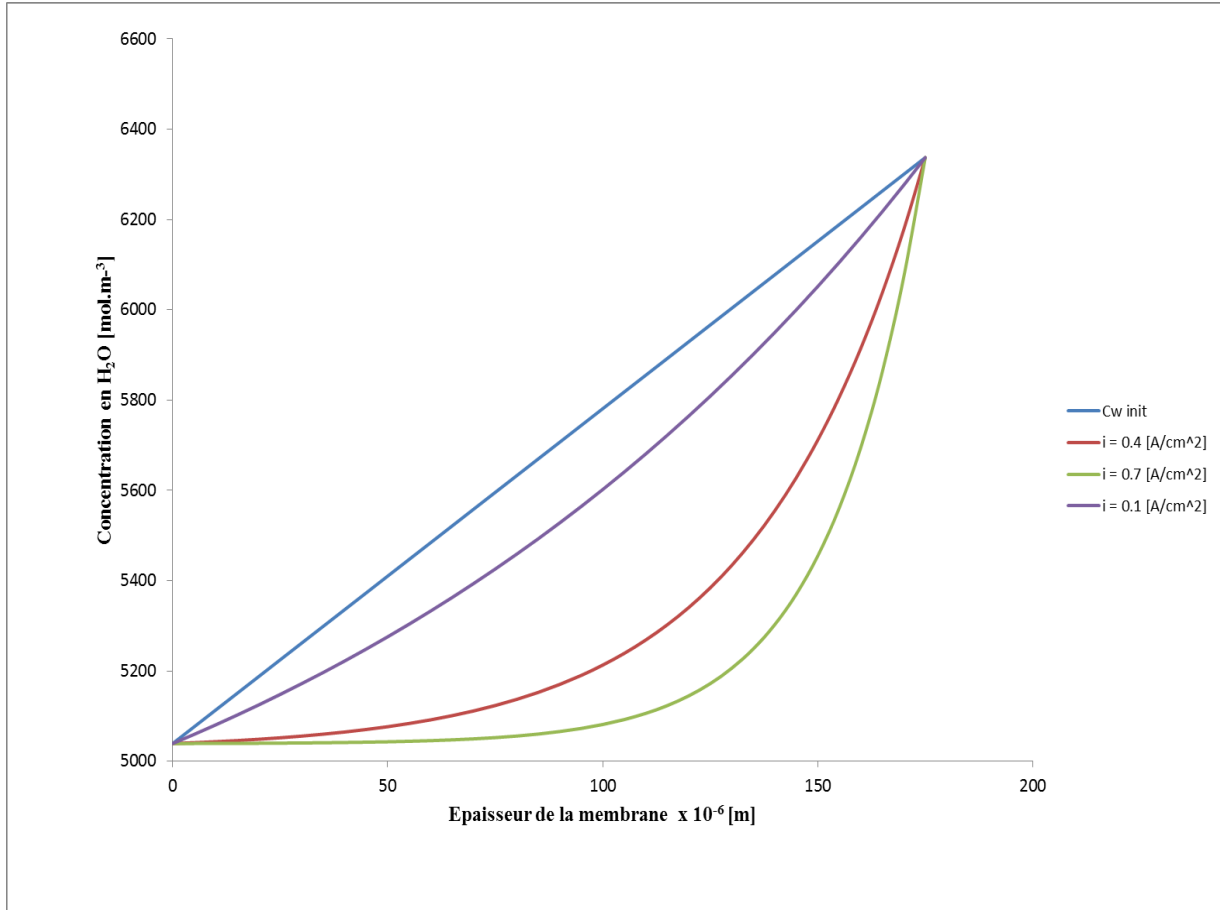


Figure III.2: Profils de concentration à différentes densités de courant

Pour $a_a = 0.3$ et $a_c = 0.5$

La figure (III.2) montre la variation de la concentration de l'eau dans l'épaisseur de la membrane à différentes densités de courant pour un gradient de pression nul entre l'anode et la cathode. On a inversé les conditions d'humidification, et le côté cathodique est plus humidifié que le côté anodique.

On remarque alors qu'en augmentant la densité de courant la concentration en eau diminue dans toute l'épaisseur de la membrane, l'eau est entraînée de l'anode, le moins humidifié, vers la cathode ce qui peut provoquer un séchage de la membrane côté anodique.

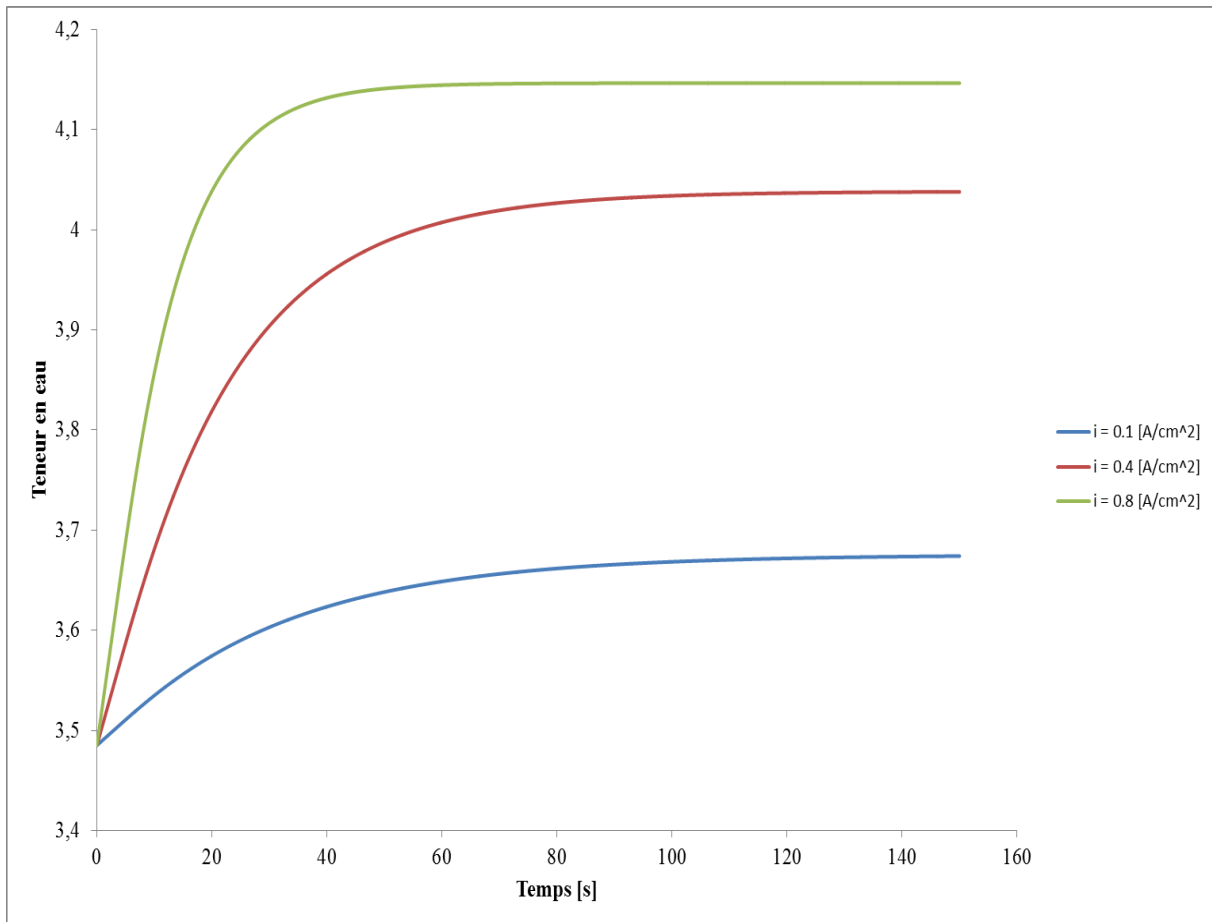


Figure III.3 : Teneur en eau de la membrane à $x = e_m/2$ en fonction du temps

Pour $a_a = 0.6$, $a_c = 0.3$

La variation de la teneur en eau dans la membrane en fonction du temps, en un point correspondant à $x = e_m/2$, est présentée sur la figure (III.3) pour différentes densités de courant ($i = 0.1, 0.4, 0.8$ A/cm²).

Cette figure montre que la teneur en eau augmente considérablement en augmentant la densité du courant, cette augmentation devient modérée pour les fortes densités de courant. On remarque aussi que le régime permanent est atteint plus rapidement pour les fortes densités de courant.

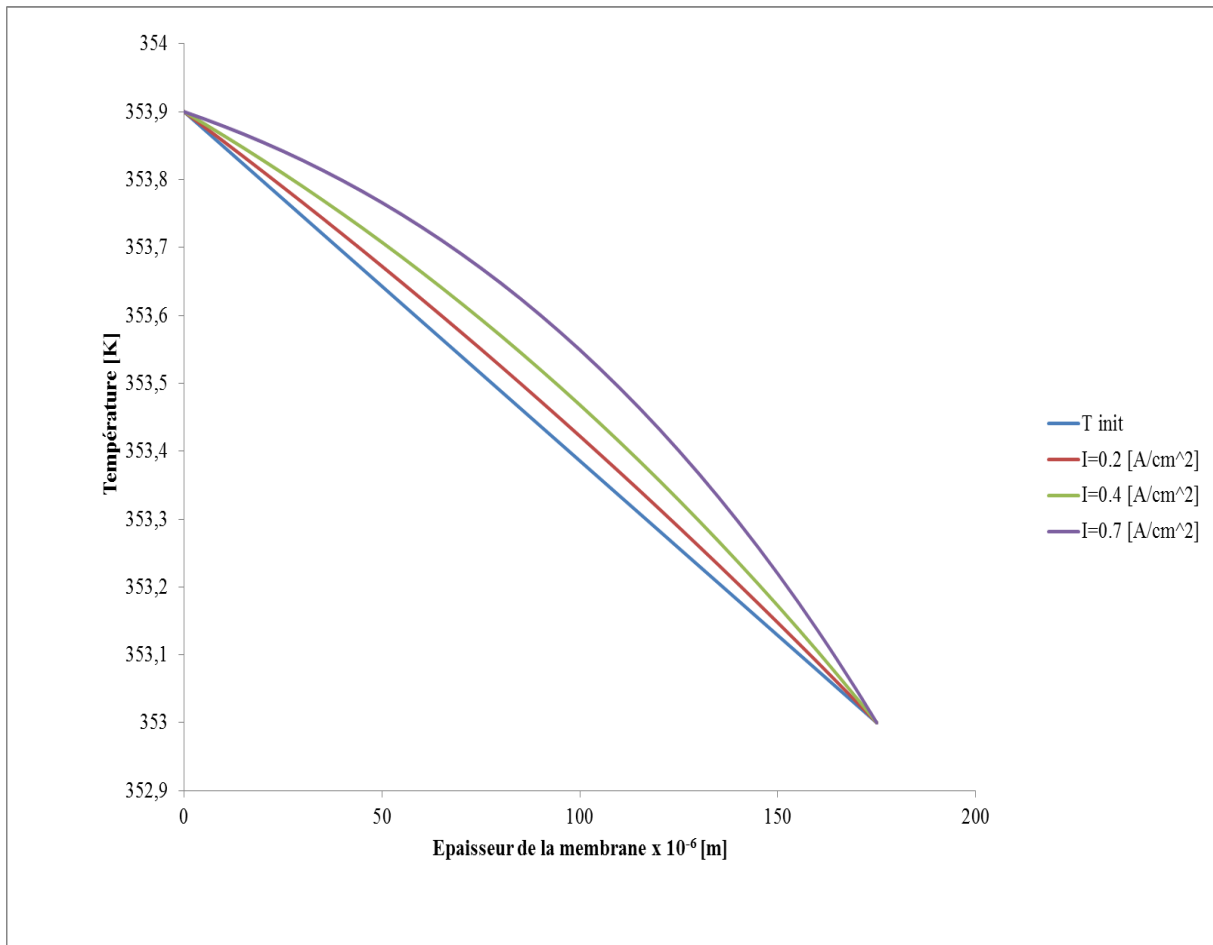


Figure III.4 : Profils de température à différentes densités du courant

pour $a_c = 0.3$, $a_a = 0.5$

La figure (III.4) montre les profils de la température de la membrane à différentes densités de courant, le gradient de pression est supposé nul ($P_{an} = P_{cat} = 1\text{bar}$).

On remarque une augmentation de la température de la membrane avec l'augmentation de la densité de courant. Cela est dû à l'effet joule qui devient important aux fortes densités de courant.

III.3. Influence des pressions aux interfaces

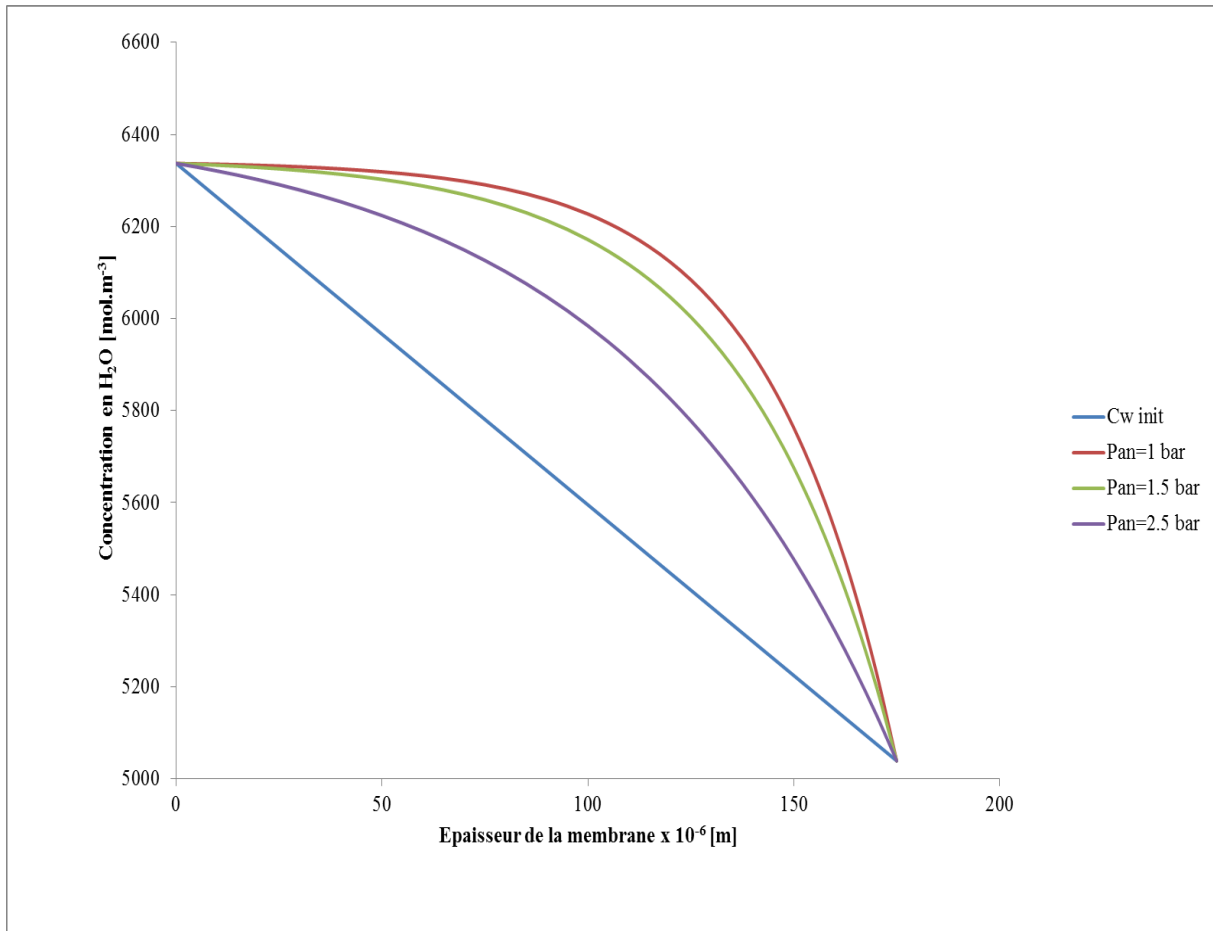


Figure III.5 : Profils de concentration à différentes pressions anodiques

pour $a_c = 0.3$, $a_a = 0.5$ et $i = 0.5 \text{ A/cm}^2$

La figure (III.5) illustre l'effet de la variation de la pression anodique sur la concentration de l'eau dans la membrane (en gardant la pression cathodique constante $P_{\text{cat}} = 1\text{bar}$).

En observant les courbes de la figure, on constate que lorsque la pression anodique augmente la concentration en eau dans l'épaisseur de la membrane diminue. Car si la pression anodique est supérieure à la pression cathodique les molécules d'eau sont dirigées de l'anode

vers la cathode (spécialement aux fortes densités de courant) et au fur et à mesure qu'on augmente la pression anodique le flux d'eau à travers la membrane diminue .

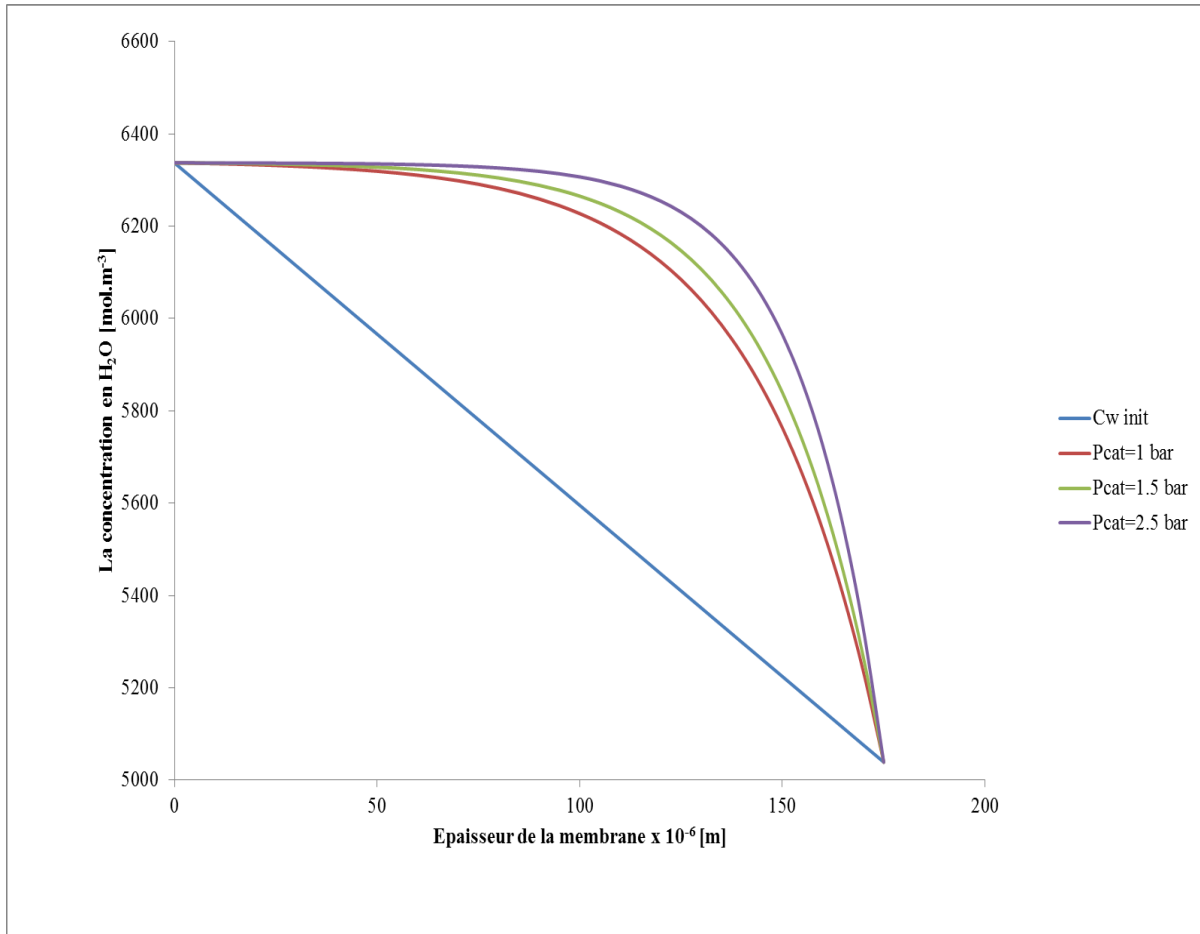


Figure III.6 : Profils de concentration à différentes pressions cathodiques

$$\text{pour } a_a = 0.5, a_c = 0.3, i = 0.5 \text{ A/cm}^2$$

La figure (III.6) montre la variation de la concentration en eau dans l'épaisseur de la membrane pour différentes pressions cathodiques (en gardant la pression anodique constante $P_{an} = 1 \text{ bar}$).

En observant les courbes de la figure, on peut constater que la concentration en eau dans la membrane augmente en augmentant la pression cathodique, car le flux d'eau dans la membrane augmente.

En comparant les courbes des figures (III.5) et (III.6), on constate que la membrane en totalité est plus humidifiée si la pression cathodique est supérieure à celle anodique. En effet, une pression cathodique élevée peut forcer les molécules d'eau de se déplacer de la cathode (lieu de la production d'eau par la réaction électrochimique) vers l'anode.

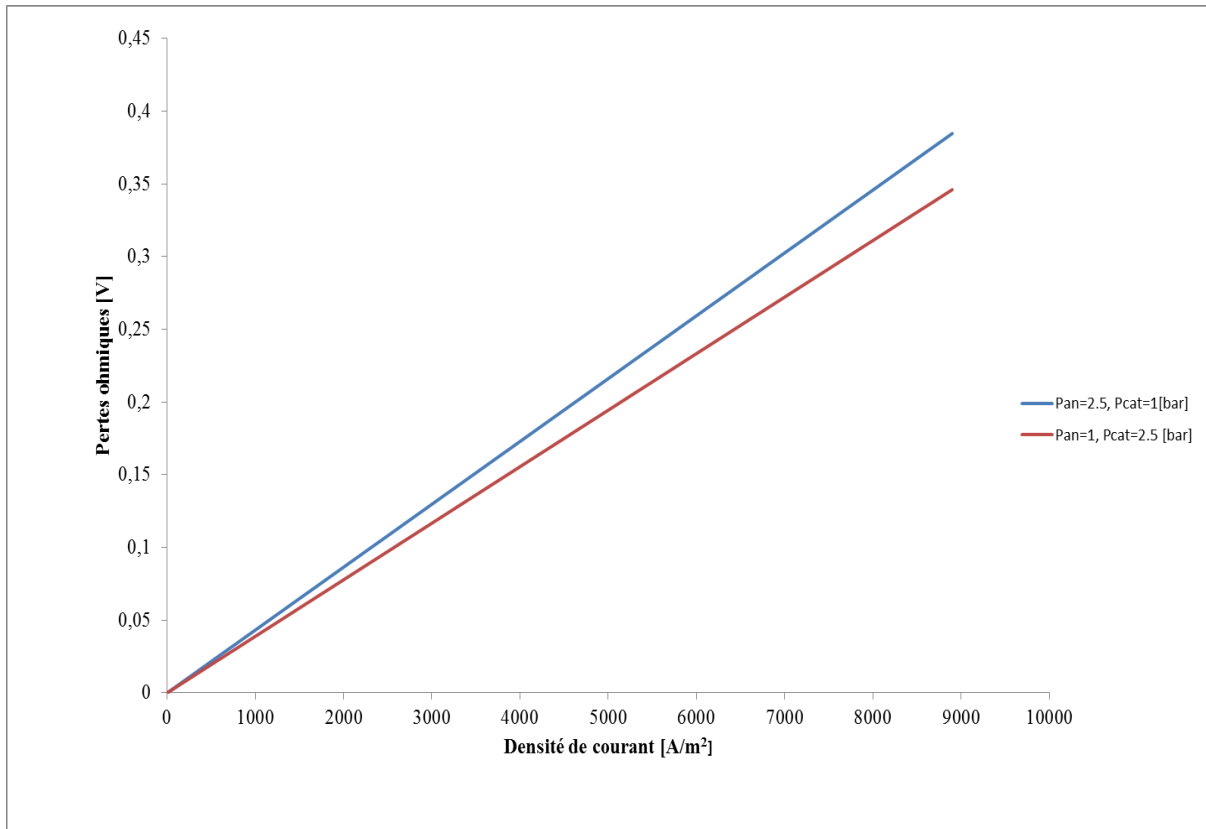


Figure III.7 : Pertes ohmiques pour différentes pressions appliquées aux cotés de la membrane pour $a_a = 0.3$, $a_c = 0.6$

La figure (III.7) représente les pertes ohmiques pour différentes pressions des gaz réactifs. Le coté cathode est plus humidifié que le coté anode ($a_c > a_a$)

On remarque d'abord que les pertes ohmiques augmentent lorsqu'on augmente la densité de courant. Elles sont liées aussi aux conditions de fonctionnement. Dans le cas où la cathode est la plus humidifiée et lorsqu'on applique une pression cathodique plus importante que celle anodique, les pertes ohmiques diminuent, cette diminution est plus visible aux fortes densités de courant.

III.4. Influence des humidités relatives

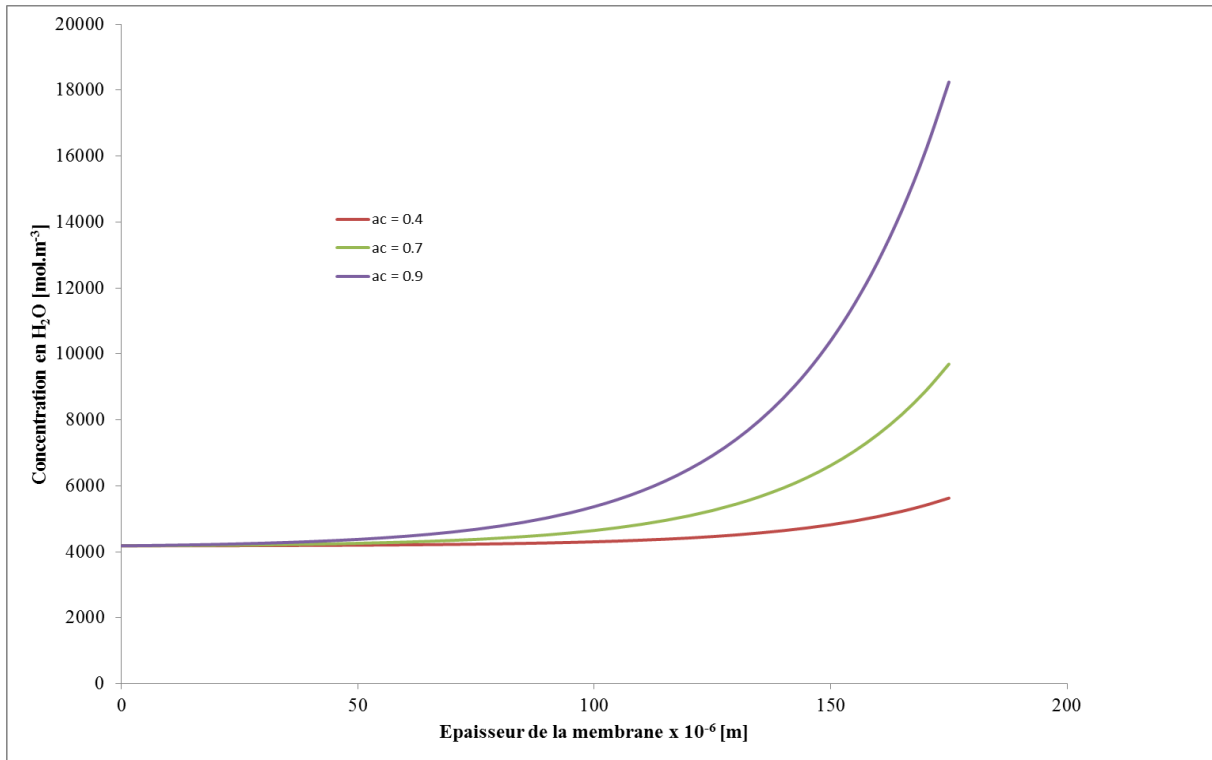


Figure III.8 : Concentration en eau pour différentes humidités relatives à l'interface anode-membrane à $i = 0.5 \text{ A/cm}^2$

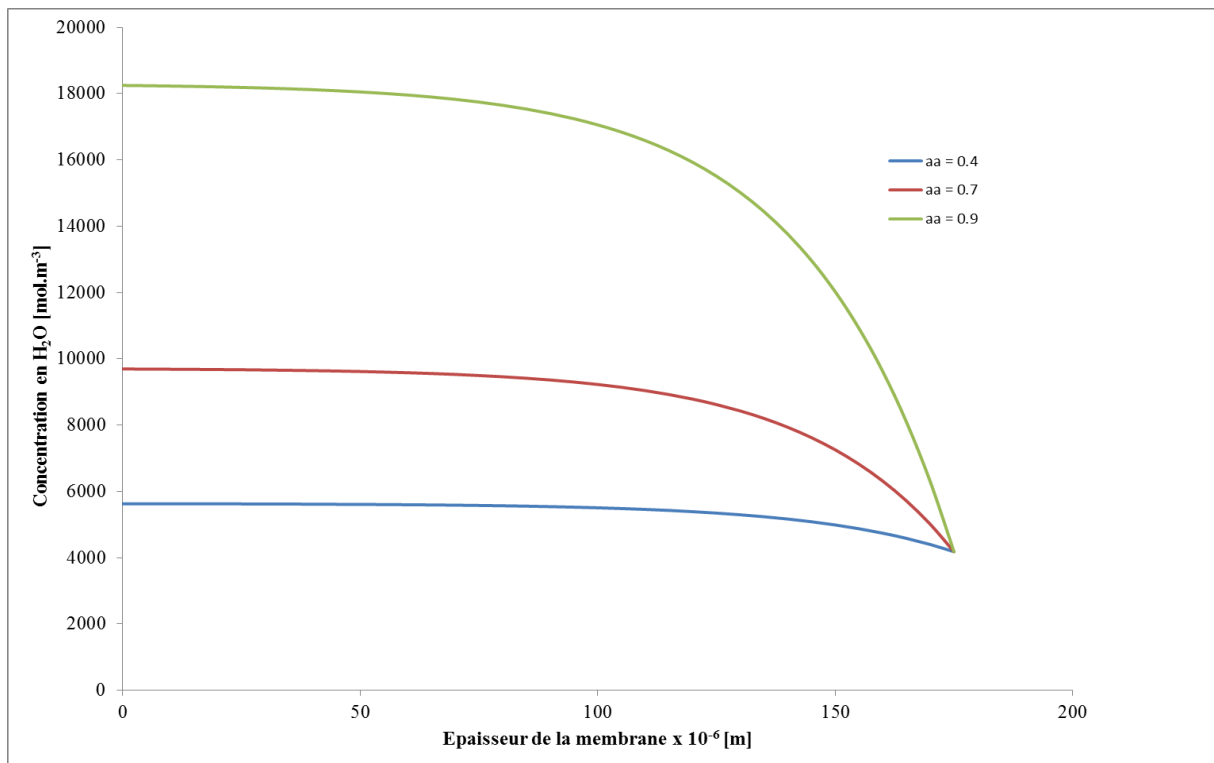


Figure III.9 : Concentration en eau pour différentes humidités relatives à l'interface cathode-membrane à $i = 0.5 \text{ A/cm}^2$

Les figures (III.8) et (III.9) montrent la variation du profil de la concentration en eau dans l'épaisseur de la membrane pour différentes humidités relatives appliquées aux interfaces de la membrane.

La première figure correspond à une interface membrane-anode plus humidifiée ($a_a = 40\%$, 70% , 90% et $a_c = 20\%$), le flux diffusif est dirigé de l'anode vers la cathode. La deuxième correspond à une interface membrane-cathode plus humidifiée ($a_c = 40\%$, 70% , 90% et $a_a = 20\%$), le flux diffusif dans ce cas est dirigé de la cathode vers l'anode. Les pressions des gaz sont égales ($P_{an} = P_{cat} = 1$ bar).

On remarque que lorsque l'humidité relative des gaz aux interfaces augmente la concentration en eau augmente également. Mais en comparant les courbes des deux figures on constate que si l'interface membrane-anode est le plus humidifiée les valeurs de la concentration sont plus élevées. Par la suite on a présenté l'influence des humidités relatives des gaz anodique sur les pertes ohmiques (Figure III.10). On constate que ces derniers diminuent en augmentant l'humidité relative.

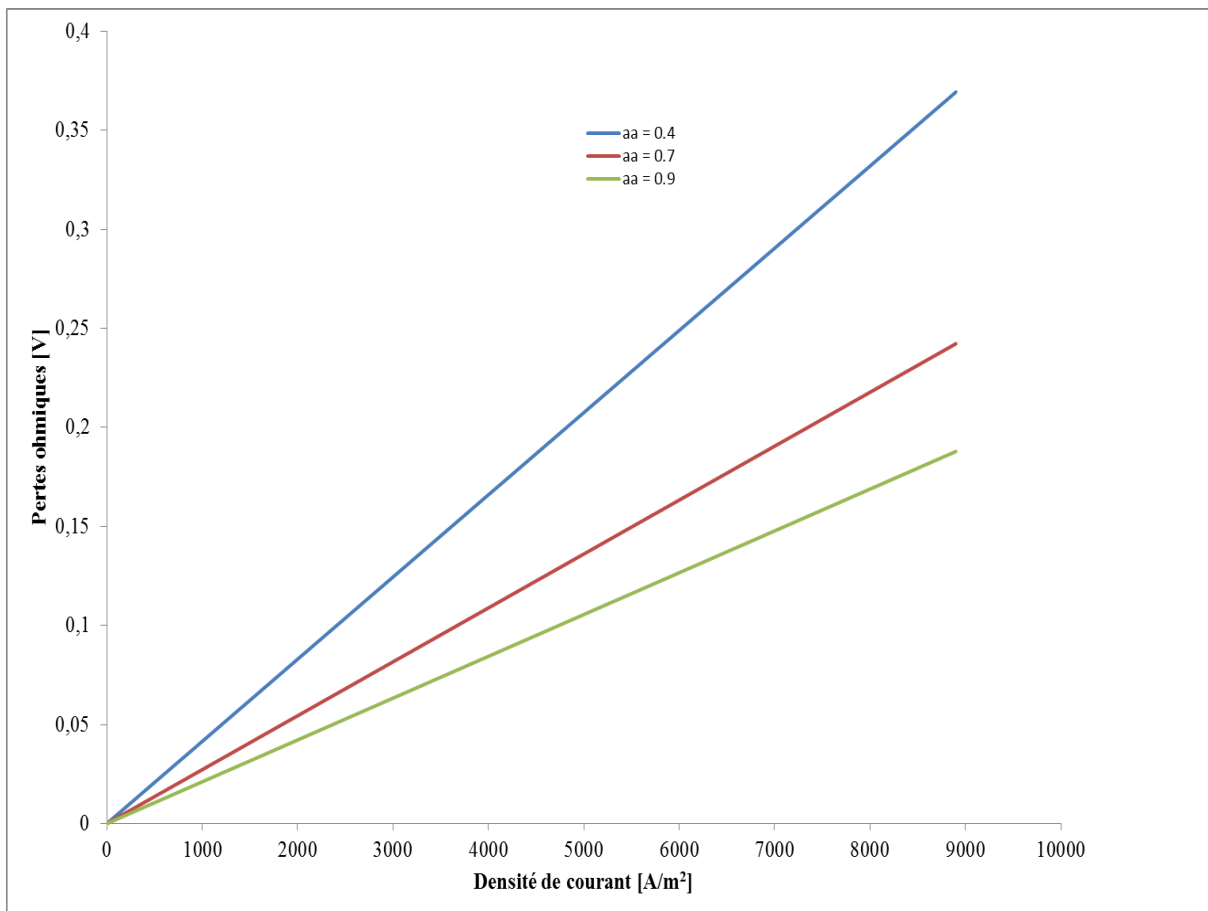


Figure III.10 : Pertes ohmiques à différentes humidités relatives à l'interface anode-membrane

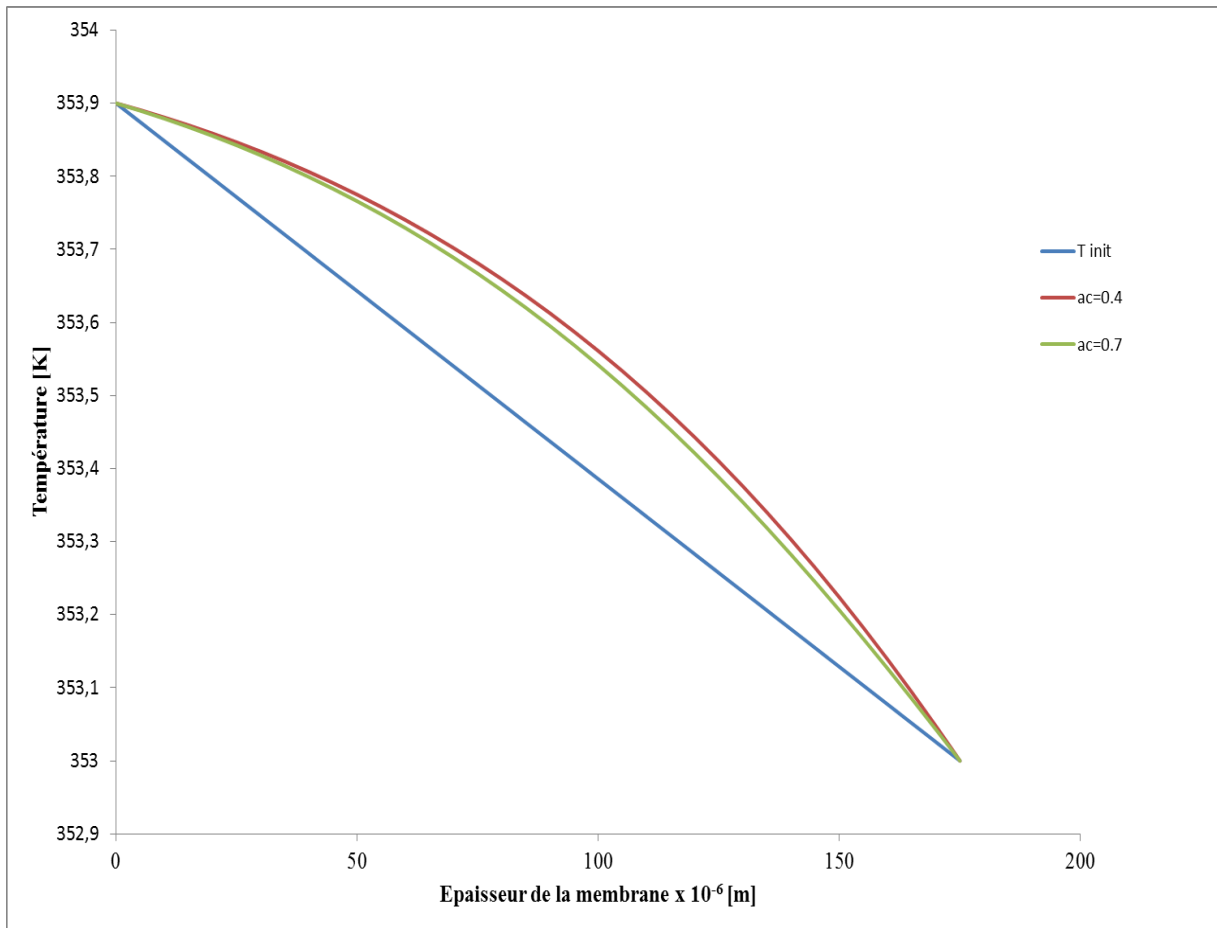


Figure III.11 : Profils de la température à différentes humidités relatives côté cathode pour $a_a = 0.2$, $i = 0.5 \text{ A/cm}^2$

Les profils de la température de la membrane à différentes humidités relatives côté cathode sont montrés sur la figure (III.11). L'humidité relative de l'interface membrane-anode est fixée à 20%.

On remarque que lorsque l'humidité relative du coté cathode augmente la température de la membrane diminue. En effet, lorsque la membrane est plus humidifiée sa résistance protonique diminue ce qui diminue la source de chaleur due à l'effet Joule.

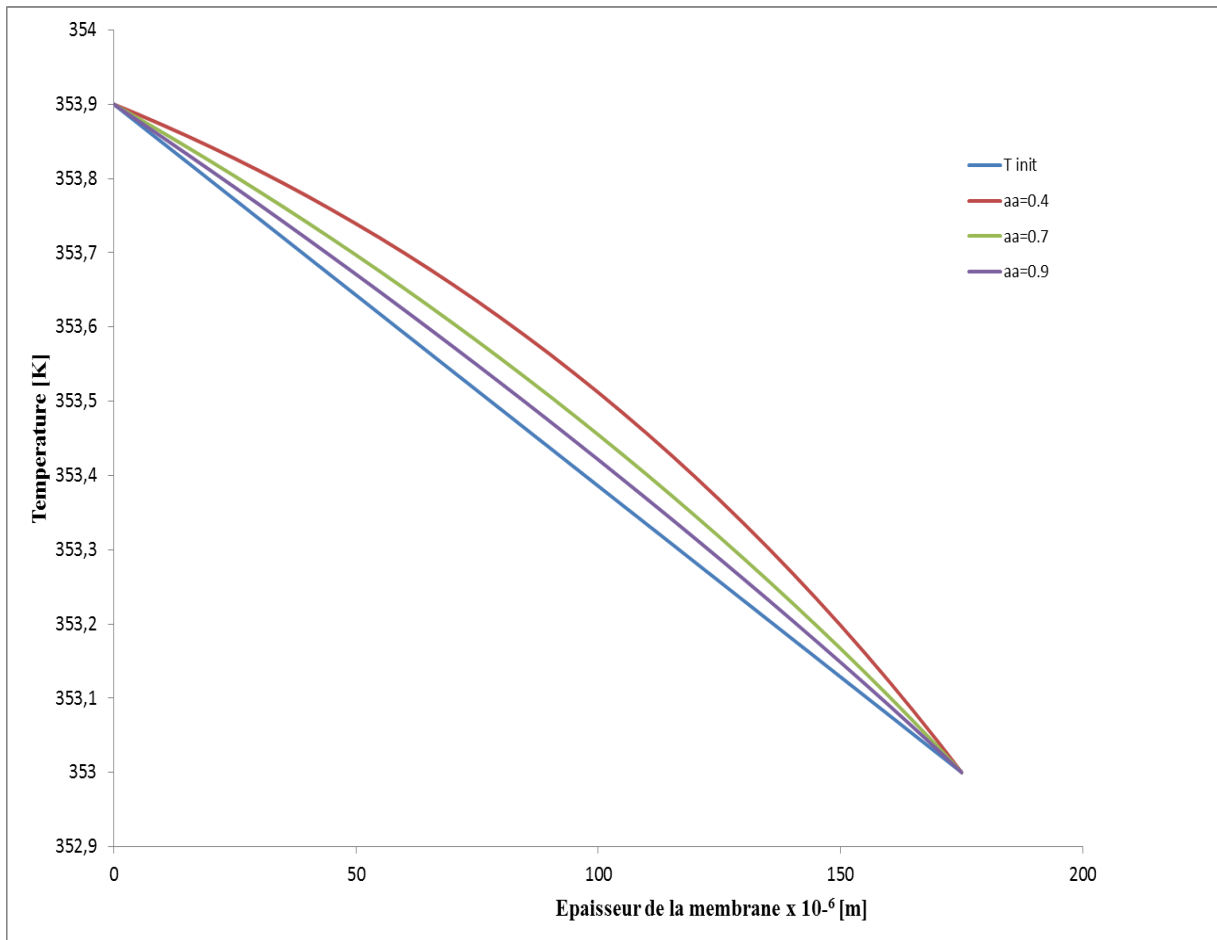


Figure III.12 : Profils de la température à différentes humidités relatives coté anode

pour $a_c = 0.2$, $i = 0.5 \text{ A/cm}^2$

La figure (III.12) représente les profils de la température de la membrane à différentes humidités relatives coté anode ($a_a = 40\%$, 70% , 90%). Le trait bleu indique le profil de température à l'état initial.

Comme la figure précédente, on remarque une diminution de la température avec l'augmentation de l'humidité relative. Mais en observant les courbes des deux figures (III.11 et III.12), on constate que les valeurs de la température sont élevées, lorsque l'interface anode-membrane est moins humidifiée.

III.5. Influence de la perméabilité de la membrane

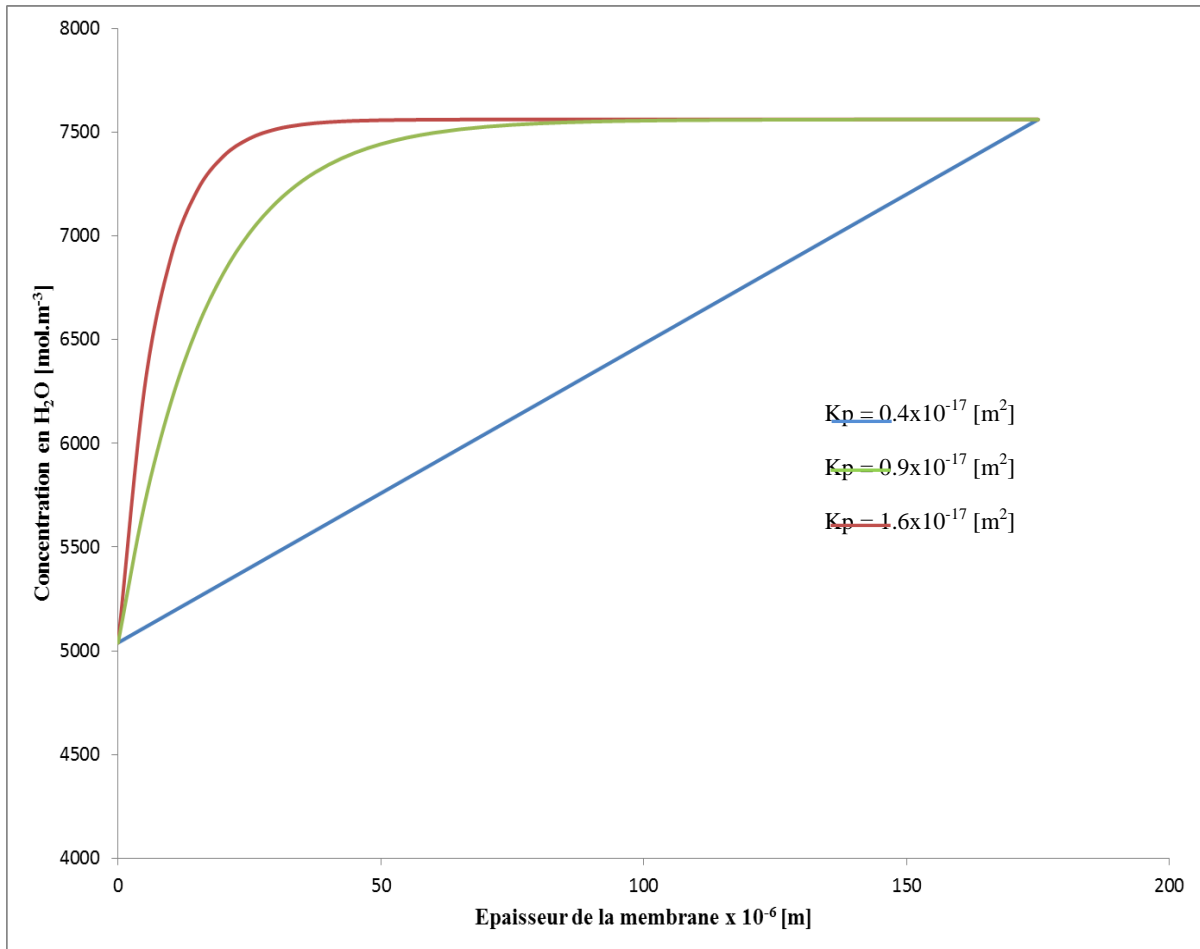


Figure III.13 : Concentration en eau pour différentes perméabilités de la membrane pour $a_a = 0.3$, $a_c = 0.6$, $i = 0.4 \text{ A/cm}^2$, $P_{cat} = 2 \text{ bar}$, $P_{an} = 1 \text{ bar}$

La figure (III.13) représente l'influence de la perméabilité de la membrane sur la concentration en eau.

La perméabilité est une propriété des milieux poreux, elle affecte le transport de l'eau par convection dans la membrane, considérée comme milieu poreux. Ainsi d'après cette figure, on constate que lorsqu'on augmente la perméabilité de la membrane la concentration en eau augmente également, ce qui permet une meilleure hydratation de la membrane. Cela peut augmenter la conductivité protonique des membranes, et permet par la suite de diminuer

les pertes ohmiques. L'influence de la perméabilité sur les pertes ohmiques est illustrée sur la figure (III.14).

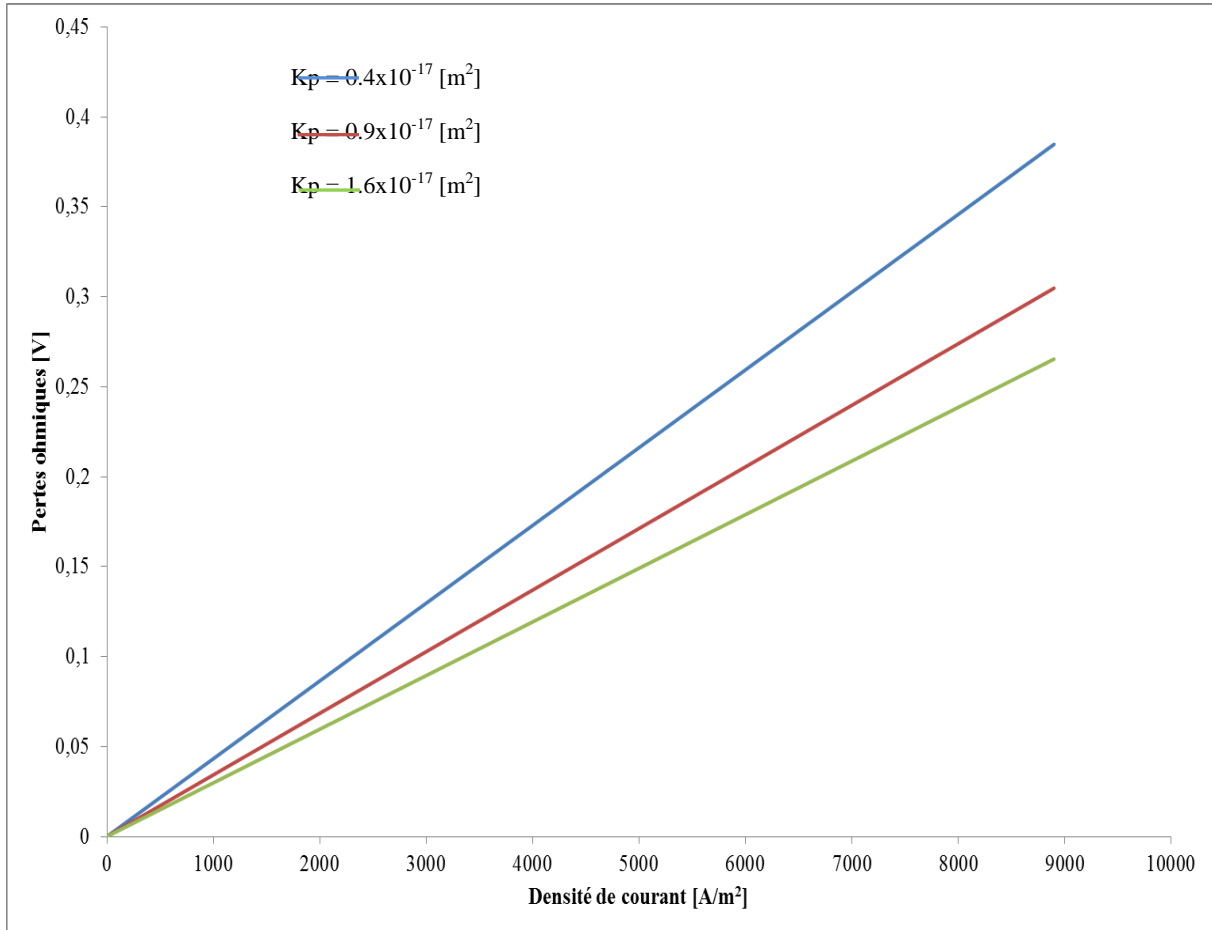


Figure III.14 : Pertes ohmiques pour différentes perméabilités de la membrane

CONCLUSION GENERALE

Conclusion générale

Dans ce travail, nous avons abordé l'étude d'un modèle numérique simplifié unidimensionnel et transitoire de transfert de masse et de chaleur dans une membrane d'une pile à combustion de type PEMFC. Nous avons utilisé la méthode des différences finies pour la discrétisation des équations de transport.

La résolution des équations de transfert de masse et de chaleur nous a permis d'obtenir des profils de température et de concentration d'eau à l'intérieur de la membrane, pour des conditions de fonctionnement déterminées.

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

- ❖ La densité de courant influe fortement la concentration en eau dans la membrane, celle-ci dépend des conditions d'humidification des gaz aux interfaces de la membrane. Si le gaz du compartiment anodique est le plus humidifié, l'augmentation de la densité de courant entraîne une augmentation de la concentration en eau et par conséquent une augmentation de la teneur en eau dans la membrane. En revanche, si les gaz du compartiment cathodique qui sont les plus humidifiés, l'augmentation de la densité de courant entraîne une diminution de la concentration en eau, à cause de l'augmentation du flux l'électro-osmotique, ce qui risque d'assécher la membrane coté anodique.
- ❖ La température augmente toujours en augmentant la densité de courant même si les gaz du côté anodique sont les plus humidifiés, cela est dû à l'effet Joule.
- ❖ La concentration en eau est aussi influencée par les pressions imposées aux interfaces de la membrane. Des pressions cathodiques supérieures à celle anodiques entraînent une augmentation de la concentration en eau et une diminution des pertes ohmiques.
- ❖ Le paramètre le plus influant sur la variation de la concentration en eau est l'humidité relative des gaz réactifs. Si l'interface membrane-anode est le plus humidifiée, la concentration en eau augmente, la température et les pertes ohmiques diminuent.
- ❖ Enfin l'augmentation de la perméabilité de la membrane améliore le transport de l'eau entraînant une meilleur hydratation de la membrane ce qui diminue les pertes ohmiques.

BIBLIOGRAPHIE

Bibliographique

- [1]. Belkace Bouzida Sihem : « Etude des phénomènes des écoulements des gaz dans les canaux dans une pile à combustible de type PEMFC »,Thèse de université de Batna faculté des sciences , 2011
- [2].Derradji Lotfi : « Simulation des phénomènes de transport dans la membrane d'une pile à combustible », Thèse de ,université saad dahlab blida , année 2007.
- [3]. Mohammed JOURDANI, « Simulation Numérique Couplée des Phénomènes Thermo-fluide, Electrochimique et Mécanique dans une Pile à Combustible type PEMFC »,thèse de doctorat ; université Mohammed V - Rabat, année 2010.
- [4]. Elodie Lechartier ; « Modèle statique d'une PEMFC en vue d'une application au pronostic », HAL Id: hal-01051151 <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01051151> Submitted on 25 Jul 2014.
- [5]. Sofyane ABBOU, « Phénomènes locaux instationnaires dans les piles à combustible à membrane (PEMFC) fonctionnant en mode bouché (dead-end) » ; thèse de Doctorat, Université de Lorraine, 2015.
- [6]. FranoBarbir, « PEM FUEL CELLS THEORY AND PRACTICE », 2nded p.cm Includes bibliographical references and index .ISBN 978-0-12-387710-9 (alk paper) 509p .p75.
- [7].Arab Lydia et Chebbi Zahra, « Etude et simulation d'une pile à combustible de type PEM » mémoire de master, Université Akli Mohand Oulhadj de Bouira, 2016.
- [8]. HassibaBekkouche ; « Etude numérique des phénomènes de transferts de chaleur et de masse dans une pile à combustible de type PEMFC. » mémoire de Magister, Université Constantine 1, 2014.
- [9].Samir Jemei « Hybridation diagnostic et pronostic de pile à combustible durabilité et fiabilité »,édition 2019, 219p. P41-P42.
- [10]. Achref Ben Salem, « Corrélation entre les propriétés physico-chimiques et électrocatalytiques de la réaction de réduction de l'oxygène sur des catalyseurs à base d'oxy-nitruure de titane pour la pile à combustible PEMFC », Mémoire de maîtrise ES-SCIENCES APPLIQUÉES, Université de Montréal, 2016.

- [11]. FrédérickNiepceron, « Conception et élaboration de membranes hybrides nanocomposites pour l'application pile à combustible PEMFC », thèse de Doctorat, Université du Maine, 2008.
- [12]. Mohamed El Hannach, « Simulation et analyse des mécanismes de transfert diphasique dans les Couches Actives des Piles à Combustible PEMFC »,Thèse de doctoratdel'université de Toulouse, 2011.
- [13] T.F. Fuller, J. Newman, Water and thermal management in solid-polymer-electrolyte fuelcells, *Journal of the Electrochemical Society*, 140 (5), 1993, pp 1218-1225.
- [14] P. Costamagna, Transport phenomena in polymeric membrane fuel cells, *Chemical Engineering Science*, 56 (2), 2001, pp 323-332.
- [15] T.E.Springer, T.A. Zawadzinki, S.Gottesfield, Polymer electrolyte fuel cell model, *Journal of the Electrochemical Society*, 138 (8),1991, pp 2334-2342.
- [16] S.Motupally, A.J.Becker, J.W. Weidner, Diffusion of water in Nafion 115 membranes, *Journal of the Electrochemical Society*, 147 (9), 2000, pp 3171.
- [17] C. Bao, M. Ouyang, B. Yi, Analysis of the water and thermal management in proton exchange membrane fuel cell systems, *International Journal of Hydrogen Energie*, 31, 2006, pp 1040-1057
- [18]A.A. Kulikovsky, Quasi-3D Modeling of Water Transport In Polymer Electrolyte Fuel Cells, *Journal of the Electrochemical Society*, 150 (11), 2003, pp A1432-A1439.
- [19] S. Dutta, S. Shimpalee and J.W. Van Zee, Numerical prediction of mass-exchange between cathode and anode channels in a PEM fuel cell, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 44 (11), 2001, pp 2029-2042.
- [20]F. Meier, G. Eigenberger, Transport parameters for the modelling of water transport in ionomer membranes for PEM fuel cells, *Electrochimica Acta*, 49 (11), 2004, pp 1731-1742.
- [21] Y. Wang and C-Y. Wang, Transient Analysis of Polymer Electrolyte Fuel Cells, *Electrochimica Acta*, Vol. 50, 2005, pp. 1307 – 1315.
- [22] S.H. Ge and B-L. Yi, A mathematical model for PEMFC in different flow modes, *Journal of Power Sources*, Vol 124, 2003, pp. 1-11

- [23] D.M. Bernardi, M.W. Verbrugge, Mathematical model of a gas diffusion electrode bonded to a polymer electrolyte, *AIChE Journal* 37 (1991), pp. 1151 – 1163.
- [24] V. Gurau, H. Liu, S. Kakac, Two-dimensional model for proton exchange membrane fuel cells, *AIChE J.* 44 (11), 1998, pp. 2410–2422.
- [25] P. Legrand, Influence des conditions de fonctionnement de la pile combustible sur les performances du dispositif et la durabilité de la membrane, Thèse de doctorat, 2006, université de Grenoble.
- [26] H. Ju and C. Wang, Experimental Validation of a PEM Fuel Cell Model by Current Distribution Data, *Journal of The Electrochemical Society* 151 (11), 2004, A1954-A1960.
- [27] H. Meng, C.Y. Wang, Large-scale simulation of polymer electrolyte fuel cells by parallel computing, *Chem. Eng. Sci.* 59, 2004, pp. 3331–3343.

Résumé

Ce travail a pour but d'étudier les phénomènes de transport de masse dans la membrane d'une pile à combustible PEMFC et l'étude de l'influence des conditions opératoires (pression, humidité relative, densité de courant...) sur les profils de concentration en eau et de température dans l'épaisseur de la membrane Nafion. Dans ce but nous avons utilisé la méthode des différences finies pour la discrétisation des équations de transport

ملخص

هدف هذا العمل هو دراسة ظواهر نقل الكتلة في غشاء بطارية دات وقود ودراسة تأثير شروط العمل (الضغط الرطوبة النسبية وكثافة التيار) على الأسطح المشبعة بالماء وعلى الحرارة عبر كامل سمك غشاء نوع نافيون. لهذا استعملنا طريقة الفروق المنتهية كطريقة تقديرية لحل معادلات النقل.

Abstract

The purpose of this work is to study the mass transport phenomena in the membrane of a PEMFC fuel cell and to study the influence of operating conditions (pressure, relative humidity, current density, etc.) on the profiles of water concentration and temperature in the thickness of the Nafion membrane. For this purpose we used the finite difference method for the discretization of the transport equations