



Université ABBES LAGHROUR Khenchela  
Faculté des Sciences et de la Technologie  
Département de Génie Industriel  
جامعة عباس لغرور خنشلة  
كلية العلوم والتكنولوجيا  
قسم الهندسة الصناعية



N° Série : .....

## Mémoire de fin d'étude

*Pour l'obtention du diplôme de Master*

**Filière : Sciences et génie de l'environnement**

**Spécialité : Génie des Procédés de l'environnement**

### **Modélisation Et Simulation d'une Pile à Combustible De Type PEMFC**

**Réalisé par :**

- ☆ BEN ABBAS HAMZA
- ☆ NOUAR ILYAS

*la commission d'examen composée de :*

- |                  |                                  |              |
|------------------|----------------------------------|--------------|
| ☆ Mr.BEICHA A    | PROF à l'Université de Khenchela | Encadreur    |
| ☆ Mr.MAKHLOUFI A | Dr à l'Université de Khenchela   | Président    |
| ☆ Mme.TOUATI A   | Dr à l'Université de Khenchela   | Examinatrice |

2017-2018

# DÉDICACE

*Aux deux êtres qui sont les plus chers pour moi, qui ont fait que je sois aujourd'hui la à présenter*

*ce travail .... Ma mère Nassira et Mon père Med cherif , merci pour tout l'amour, l'attention, le temps et l'effort que vous avez consacré pour moi, vous n'avez jamais arrêté de croire en moi.  
aucun mot ne peut exprimer la profonde gratitude que j ai à votre égard.*

*A mon très chères frères Abd el Hakim , Abd el Haq .*

*Et petit choyé Khewla .*

*A toute ma famille .*

*A tous mes amies et surtout mes intimes: Ourghi Hamza.Hamza Khirani et Abd Allah.*

*Et à tous ceux qui m'ont encouragé de près ou de loin, même un mot.*

**Nous tenons à remercier Professeur : Beicha Abdallah pour avoir acceptée de diriger notre travail**

**Je voudrais le remercier beaucoup et m'excuser pour son épuisement avec nous dans ce travail.**

*A tous mes camarades de promotion 2017-2018 Je leur apporte un grand respect.*

*Merci....*

*Hamza*

# **DÉDICACE**

*Aux deux êtres qui sont les plus chers pour moi, qui ont fait que je sois aujourd'hui  
là à présenter*

*ce travail .... Ma mère et Mon père , merci pour tout l'amour, l'attention, le  
temps et l'effort que vous avez consacré pour moi, vous n'avez jamais arrêté de  
croire en moi.*

*Je remercie mes frères et sœurs qui se sont levés avec moi et m'ont encouragé  
A toute ma famille et tous mes amies*

*Et à tous ceux qui m'ont encouragé de près ou de loin, même un mot.*

**Nous tenons à remercier Professeur : Beicha Abdallah pour avoir acceptée de  
diriger notre travail**

**Je voudrais le remercier beaucoup et m'excuser pour son épuisement  
avec nous dans ce travail.**

*A tous mes camarades de promotion 2017-2018 Je leur apporte un grand respect.*

*Merci....*

**ILYAS**

# **REMERCIEMENT**

*Nous remercions Allah le tout puissant, qui nous a donné la foi, la force et la  
patience pour aller jusqu'au bout de ce travail*

*Nous tenons à remercier Professeur : **Beicha Abdallah** pour avoir acceptée de diriger  
notre  
travail, pour son aide précieuse, ses encouragements et pour ses conseils tout le long  
de ce travail.*

*Nous remercions également les membres du jury pour avoir accepté d'évaluer et de  
juger ce modeste travail*

*Nous remercions également tous les membres du personnel de notre classe 2<sup>ème</sup>  
années master Génie des procédés.*

*Enfin, nous tenons à remercier tous les membres de notre famille et les amis pour leurs  
soutiens  
et leurs encouragements.*

# *TABLE DES MATIÈRES*

INTRODUCTION GENERALE .....	2
-----------------------------	---

## **Chapitre I : Recherche Bibliographique**

<b>I. Introduction .....</b>	<b>5</b>
I.1.Principe de fonctionnement d'une pile à combustible.....	5
I.2.Les différents types d'une pile à combustible .....	7
I.2.1.AFC (Alkaline Fuel Cell) .....	7
I.2.1.1 Principe de fonctionnement .....	7
I.2.1.2 Avantages et inconvénients .....	8
I.2.2 PEMFC (Proton Exchange Membrane Fuel Cell) .....	9
I.2.2.1 Principe de fonctionnement .....	9
I.2.2.2 Avantages et inconvénients .....	10
I.2.3 DMFC ( Direct Methanol Fuel Cell) .....	11
I.2.3.1 Principe de fonctionnement .....	11
I.2.3.2 Avantages et inconvénients .....	12
I.2.4 PAFC (Phosphoric Acide Fuel Cell) .....	12
I.2.4.1 Principe de fonctionnement .....	13
I.2.4.2 Avantages et inconvénients .....	14
I.2.5 MCFC (Molten Carbonate Fuel Cell) .....	14
I.2.5.1 Principe de fonctionnement .....	14
I.2.5.2 Avantages et inconvénients .....	15
I.2.6 SOFC (Solid Oxide Fuel Cell).....	16
I.2.6.1 Principe de fonctionnement .....	16
I.2.6.2 Avantages et inconvénients .....	17
I.3. Composants d'une cellule d'une pile à combustible de type PEMFC.....	18
I.3.1.Définition d'une cellule .....	18
I.3.2. Membrane .....	18
I.3.3. Les électrodes .....	19
I.3.4. Le catalyseur .....	20
I.3.5. Les couches de diffusion .....	20
I.3.6.Les plaques bipolaires .....	20

## Chapitre II : Modélisation

<b>II. Modélisation de la pile à combustible à membrane échangeuse de protons</b> .....	23
II.1. Fonctionnement de la pile à combustible MEP .....	23
II.1.1. Modèle électrochimique .....	24
II.1.1.1. Tension réversible de la cellule.....	24
II.1.1.2. Pertes d'activation .....	25
II.1.1.3. Pertes ohmiques.....	26
II.1.1.4. Pertes de concentration .....	27
II.2. Transport de masse .....	28
II.2.1. Flux molaire.....	28
II.2.2. Diffusion des espèces .....	29
II.2.3. Transport dans la membrane .....	30
II.3. Procédure de calcul .....	31

## Chapitre III : Résultats et discussion

<b>III. Résultats et Discussion</b> .....	35
III.1. Détermination des paramètres des pertes d'activation ( $\gamma$ et $i_0$ ).....	35
III.2. Influence de la température de fonctionnement sur les pertes ohmiques (polarisation ohmique).....	36
III.3. Influence de la pression des gaz $H_2$ et $O_2$ .....	37
III.4. Influence de l'humidité de la membrane.....	41
III.5. Influence de l'épaisseur de la membrane .....	42
Conclusion générale .....	45

Bibliographique

Annexe

## Nomenclature

### Notations latins :

Symbole	Grandeur	Unité de mesure
C	Concentration molaire	mol/m <sup>3</sup>
P <sub>O2</sub>	Pression partielle de l'oxygène	Pa
P <sub>H2</sub>	Pression partielle de l'hydrogène	Pa
P <sub>H2O</sub>	Pression de vapeur d'eau	Pa
D <sub>H2O, N2</sub>	Coefficient de diffusion de H <sub>2</sub> O dans N <sub>2</sub>	m <sup>2</sup> /s
D <sub>N2, H2O</sub>	Coefficient de diffusion de N <sub>2</sub> dans H <sub>2</sub> O	m <sup>2</sup> /s
D <sub>H2, H2O</sub>	Coefficient de diffusion de H <sub>2</sub> dans H <sub>2</sub> O	m <sup>2</sup> /s
D <sub>H2O, m</sub>	Coefficient de diffusion de H <sub>2</sub> O dans la membrane	m <sup>2</sup> /s
D <sub>O2, H2O</sub>	Coefficient de diffusion de O <sub>2</sub> dans H <sub>2</sub> O	m <sup>2</sup> /s
D <sub>O2, N2</sub>	Coefficient de diffusion de O <sub>2</sub> dans N <sub>2</sub>	m <sup>2</sup> /s
L <sub>c</sub>	Epaisseur de la cathode	M
L <sub>a</sub>	Epaisseur de l'anode	M
L <sub>m</sub>	Epaisseur de la membrane	M
E	Tension idéale	V
E <sup>0</sup>	Tension idéale standard	V
F	Nombre de Faraday	96500 C mol <sup>-1</sup>
ΔG	Variation d'énergie libre de Gibbs	KJ mol <sup>-1</sup>
I	Densités de courant	mA / cm <sup>2</sup>
N	Nombre d'électrons	-
N <sub>H2</sub>	Flux molaire d'hydrogène	mol / m <sup>2</sup> s
N <sub>H<sup>+</sup></sub>	Flux molaire de H <sup>+</sup>	mol / m <sup>2</sup> s
N <sup>a</sup> <sub>H2O</sub>	Le Flux molaire de H <sub>2</sub> O dans l'anode	mol / m <sup>2</sup> s
N <sup>c</sup> <sub>H2O</sub>	Le Flux molaire de H <sub>2</sub> O dans la cathode	mol / m <sup>2</sup> s
N <sup>m</sup> <sub>H2O</sub>	Le Flux molaire de H <sub>2</sub> O dans la membrane	mol / m <sup>2</sup> s
N <sub>O2</sub>	Le Flux molaire d'oxygène	mol / m <sup>2</sup> s
R	Constante des gaz parfait	8.314 J mol <sup>-1</sup> K <sup>-1</sup>
R	Résistance	Ω
ΔS	Variation d'entropie	KJ mol <sup>-1</sup> K <sup>-1</sup>
S	Surface active de la PEMFC	Cm <sup>2</sup>
T	Température	K
V <sub>activation</sub>	Pertes d'activation	V
V <sub>concentration</sub>	Pertes de concentration	V
V <sub>ohmique</sub>	Pertes ohmique	V
V <sub>pile</sub>	Tension réelle de la pile	V
y <sub>H2</sub>	La fraction molaire de H <sub>2</sub> dans l'anode (%)	-
y <sup>a</sup> <sub>H2O</sub>	La fraction molaire de H <sub>2</sub> O dans l'anode (%)	-
y <sup>c</sup> <sub>H2O</sub>	La fraction molaire de H <sub>2</sub> O dans la cathode (%)	-
y <sub>O2</sub>	La fraction molaire de O <sub>2</sub> dans la cathode (%)	-
y <sub>N2</sub>	La fraction molaire de N <sub>2</sub> dans la cathode (%)	-
EW	Poids équivalent	
H <sub>ra</sub>	Humidité relative de l'anode	
H <sub>Rc</sub>	Humidité relative de cathode	



$V_{\text{cellule}}$	Tension de la cellule	
----------------------	-----------------------	--

**Symbole :**

Symbole	Grandeur	Unité de mesure
$\varepsilon_1$	Coefficient paramétrique de la pile à combustible	V / K
$\varepsilon_2, \varepsilon_3, \varepsilon_4$	Coefficients paramétriques de la pile à combustible	V / K
$\varepsilon_5$	Coefficient paramétrique de la pile à combustible	V / K
$\varepsilon_6$	Coefficient paramétrique de la pile à combustible	V / K
$\varepsilon$	La porosité	
$\Phi$	Humidité relative	
$\Lambda$	Teneur en eau de la membrane	

**Abréviations :**

PEMFC	La pile à combustible à membrane échangeuse de protons.
AFC	La pile à combustible Alkaline.
SOFC	La pile à combustible à oxyde solide.
MCFC	La pile à combustible à carbonate fondu.
PAFC	La pile à combustible à acide phosphorique.
DMFC	La pile à combustible à méthanol direct.

**Liste des Tableaux :**



<b>Tableau I.1</b> : Tableau récapitulatif des différents types de piles à combustible.....	17
<b>Tableau II.1</b> : Coefficients paramétriques des pertes d'activation .....	26
<b>Tableau II.2</b> : Coefficients paramétriques des pertes ohmiques.....	27
<b>Tableau III.1</b> : Paramètres de simulation.....	35
<b>Tableau III.2</b> : Paramètres des pertes d'activation .....	36

## Liste des figures :

Figure I.1 : Réactions de base dans une pile à combustible à électrolyte acide .....	6
Figure I.2 : Réactions de base dans une pile à combustible à électrolyte basique .....	6
Figure I.3 : Schéma de principe de fonctionnement d'une pile combustible MEP.....	6
Figure I.4 : Principe de fonctionnement d'une pile à combustible AFC.....	8
Figure I.5 : Principe de fonctionnement d'une pile à combustible PEMFC.....	10
Figure I.6 : Principe de fonctionnement d'une pile à combustible DMFC.....	12
Figure I.7 : Principe de fonctionnement d'une pile à combustible PAFC .....	13
Figure I.8 : Principe de fonctionnement d'une pile à combustible MCFC avec reformage interne .....	15
Figure I.9 : Principe de fonctionnement d'une pile à combustible SOFC.....	17
Figure I.10 : Eléments de base d'une cellule de pile à combustible PEM .....	18
Figure I.11 : Structure interne du Nafion.....	19
Figure I.12 : la structure chimique de Nafion.....	19
Figure I.13 : Différentes structures géométriques de canaux des plaques bipolaires....	21
Figure II.1 : Pile à combustible MEP.....	24
Figure II.2 : Transport de masse à travers l'assemblage Membrane-Electrodes.....	28
Figure II.3 : Organigramme de calcul.....	33
Figure III.1 : Variation de la tension de la cellule en fonction de la densité de courant pour différentes températures.....	37

Figure III.2 : Variation de la tension de la cellule en fonction de la densité de courant pour différentes températures.....	38
Figure III.3 : Courbes de polarisation de la cellule pour différentes pression d'O <sub>2</sub> .....	39
Figure III.4 : Courbes de polarisation de la cellule pour différentes pression d'H <sub>2</sub> .....	40
Figure III.5 : Courbes de polarisation de la cellule pour différentes humidité .....	42
Figure III.6 : La variation de la tension dans la cellule en fonction de l'épaisseur de la membrane .....	43



## **R é s u m é**

---

Ce projet présente un modèle électrochimique pour la simulation et l'évaluation des performances de la pile à combustible à membrane échangeuse de protons. Les résultats du modèle sont utilisés pour décrire le comportement de la tension de la cellule en fonction des paramètres de fonctionnement de la pile à combustible, comme la température, les pressions partielles et l'humidité de la membrane. L'influence de la température sur les caractéristiques de la pile à combustible est plus prononcée. pressions et humidité de la membrane. Les paramètres cinétiques (coefficient de transfert d'électrons et densité de courant d'échange) s'avèrent cruciaux pour la conception de piles à combustible.

**Mots clés :** la pile à combustible – modèle – électrochimique - humidité de la membrane.

## **A b s t r a c t**

---

This project presents an electrochemical model for simulation and evaluation of the performance of proton exchange membrane (PEM) fuel cell. The results of the model are used to describe the behavior of the cell voltage in function of operational parameters of the fuel cell, like temperature, partial pressures and membrane humidity. The influence of temperature on fuel cell's characteristics is more pronounced than the influence of partial pressures and membrane humidity. The kinetic parameters (electron transfer coefficient, exchange current density) are found to be crucial for the purpose of PEM fuel cell design.

**Keys words :** the fuel cell – model- Electrochemical- membrane humidity.



***INTRODUCTION GENERAL***

## INTRODUCTION GENERALE

Dans le domaine des technologies alternatives de production et de conversion d'énergie à faible impact environnemental, les piles à combustible prennent de plus en plus d'ampleur en s'infiltrant dans tous les domaines énergétiques. La pile à combustible à membrane échangeuse de proton (PEMFC) est reconnue comme l'une des candidates les plus prometteuses au remplacement de moteur thermique et sa gamme de puissance lui permet d'étendre son domaine d'utilisation aux applications automobile, portable et stationnaire. Pour fonctionner, la pile nécessite que de l'hydrogène et de l'oxygène ou l'air.

Le vecteur hydrogène paraît être donc une des solutions viables à long terme, tant du point de vue économique qu'écologique. Economiquement, le dihydrogène,  $H_2$ , existe en grande quantité, combiné à l'oxygène ( $H_2O$ ), au soufre ( $H_2S$ ) et au carbone.

Si la production de dihydrogène est assurée par des procédés à faible coût, il pourra effectivement remplacer le rôle joué par les ressources fossiles. Écologiquement, la production de dihydrogène peut être assurée par des technologies non polluantes ou faiblement émettrices de dioxyde de carbone,  $CO_2$ , telles que l'électrolyse de l'eau à partir d'électricité provenant des énergies renouvelables. En effet, l'utilisation de dihydrogène dans les piles à combustible (surtout dans PEMFC) induit une émission zéro de dioxyde de carbone. La PEMFC constitue le convertisseur d'énergie incontournable du fait de son rendement élevé mais également de sa souplesse d'utilisation, ce qui lui permet d'être disponible dans une large gamme de puissance.

Dans ce cadre, la PEMFC fait l'objet d'efforts de recherche et de développement importants depuis de nombreuses années, afin de diminuer son coût mais aussi et en vue d'augmenter ses performances.

Les mécanismes à l'intérieur de la pile à combustible sont encore mal connus et font l'objet des intenses recherches menées sur le sujet. La détermination et la quantification des mécanismes de transport des gaz dans les différents composants.

Notamment dans les membranes, sont des étapes indispensables pour améliorer la performance des piles et aider au développement des assemblages Membranes-Electrodes plus performants. Dans ce contexte, ce travail a pour premier objectif d'étudier quelques

mécanismes du transport des gaz dans les diffuseurs et le transport de l'eau dans la membrane. L'effet de quelques paramètres tels que la température, porosité, et densité de courant sur le comportement de la pile PEMFC va être étudié.

Ce mémoire comporte trois chapitres :

Le premier chapitre présente une recherche bibliographique concernant le principe de fonctionnement des piles à combustible et description des différents types des piles et ainsi les avantages et inconvénients de chacun. Une attention particulière est portée sur le type de PEMFC.

Le deuxième chapitre présente une procédure numérique basée sur l'équation de Maxwell-Stefan pour l'estimation de quelques paramètres contrôlant la performance de la pile à combustible PEMFC.

Dans le troisième chapitre les résultats de la simulation sont présentés dans le but d'indiquer l'influence de quelques paramètres de fonctionnement sur le comportement de la pile à combustible.



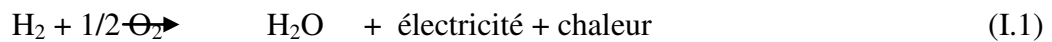
# ***CHAPITRE I***

## I. Introduction

Les piles à combustible sont des convertisseurs d'énergie, dits propres, permettant d'exploiter la génération électrochimique d'électricité à partir d'un carburant. Contrairement aux batteries, qui sont des dispositifs de stockage d'énergie, les piles à combustible ne fonctionnent que tant qu'elles sont alimentées en réactifs.

### I.1. Principe de fonctionnement d'une pile à combustible

Le principe de la pile à combustible a été démontré par l'Anglais William Grove, en 1839, le processus peut être décrit comme l'inverse de l'électrolyse de l'eau. En fait, il s'agit d'une combustion électrochimique contrôlée d'hydrogène et d'oxygène, avec production simultanée d'électricité, d'eau et de chaleur, selon une réaction chimique globale.



Une pile à combustible est un assemblage de cellules élémentaires, comprenant deux électrodes (l'anode et la cathode) chargées en catalyseur (le plus souvent du platine), séparées par un électrolyte, dont le rôle est de permettre la migration des ions d'une électrode à l'autre, sous l'effet du champ électrique créé.

- L'anode: où se passe l'oxydation, est alimentée en combustible ( $\text{H}_2$ ,  $\text{CH}_3\text{OH}$ ,...), selon la réaction d'oxydation suivante:



- La cathode: où se passe la réduction, est alimentée en comburant ( $\text{O}_2$ , air,...), selon la réaction de réduction suivante:



Dans un électrolyte acide, ce sont les ions positifs (protons) qui se déplacent de l'anode à la cathode (Fig. I.1). L'eau est produite à la cathode.



## I .2.Les différents types d'une pile à combustible

### I .2.1 AFC (Alkaline Fuel Cell) [1]

Les piles à combustible du type AFC sont actuellement les plus développées. Elles ont été inventées par Francis T. Bacon en 1932 et sont utilisées depuis la fin des années 50. Leur première application concrète date du début des années 60 avec les premières missions spatiales habitées. Leur principale caractéristique est leur électrolyte : elle est constituée d'une solution saturée d'hydroxyde de potassium (KOH), l'électrolyte est donc liquide.

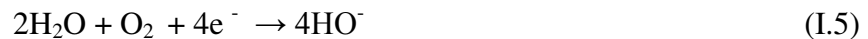
Le catalyseur de l'anode est en nickel ou en platine. Celui de la cathode est en charbon actif. La température de fonctionnement de la pile à combustible alcaline varie entre 60 et 90°C. La plupart des AFC fonctionnent à pression atmosphérique, elles ne nécessitent donc pas de compresseur. Certaines peuvent pourtant fonctionner à plus haute température et pression. C'est le cas de la pile de Bacon qui demande une pression de 40 à 50 bars pour fonctionner entre 200 et 230°C. [2]

#### I .2.1.1 Principe fonctionnement

Le dihydrogène (H<sub>2</sub>) est amené à la cathode. Il réagit alors avec de l'hydroxyde (OH<sup>-</sup>). Cette réaction crée de l'eau (H<sub>2</sub>O) et des électrons (e<sup>-</sup>).



Les électrons circulent par un circuit extérieur jusqu'à la cathode, où ils réagissent avec de l'eau (H<sub>2</sub>O) et du dioxygène (O<sub>2</sub>). Ce processus crée de l'hydroxyde (OH<sup>-</sup>) qui recharge l'électrolyte.



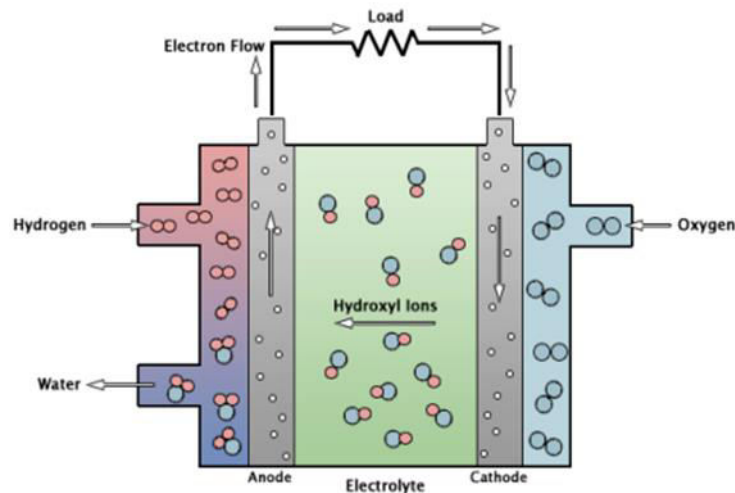


Figure I.4 Principe de fonctionnement d'une pile à combustible AFC

### I .2.1.2 Avantages et inconvénients

Le désavantage de ce genre de pile se trouve dans la pureté de l'oxygène et de l'hydrogène. Il ne faut pas qu'ils proviennent du reformage ou de l'air, car s'ils contiennent du  $\text{CO}_2$ , la réaction suivante se produit :



La conductivité de l'électrolyte s'en trouve alors réduite car ces composés s'y mélangent. Il est donc nécessaire d'utiliser de l'hydrogène et de l'oxygène purs ou du moins purifiés, qui sont chers et nécessitent de l'énergie. Par contre, l'électrolyte alcalin supporte très bien les impuretés comme  $\text{CO}$  et  $\text{NH}_3$ . En outre, il peut sortir facilement du réservoir car il est liquide et il peut être changé en cas d'intoxication.

Les AFC donnent un bon rendement avec 60% de l'énergie de la réaction transformée en électricité et 30% que l'on peut récupérer en chaleur. Les piles alcalines n'utilisent pas de métaux précieux comme le platine dans les électrodes et n'ont pas besoin de compresseur, ce qui réduit considérablement le prix et les mènent en première place du rapport Prix/Puissance.

La tension d'une pile AFC est d'environ 0,75 Volt par cellule, qui est supérieur à celle des PEMFC. Enfin, les AFC ont une durée de vie assez longue. [2]

## I .2.2 PEMFC (Proton Exchange Membrane Fuel Cell)

La pile à combustible à membrane échangeuse de proton(PEMFC), ou pile à combustible à électrolyte polymère solide(SPEFC), ou encore pile à combustible à membrane échangeuse d'ions, est la pile sur laquelle se portent actuellement le plus de recherches. Sa naissance remonte à la fin des années 60 avec l'invention de la membrane Nafion par l'entreprise Dupont. Il s'agit d'une membrane en polymère Synthétique, qui fait office d'électrolyte. Elle laisse passer les ions d'hydrogène mais pas les électrons. La membrane a besoin d'être humidifiée par de l'eau liquide pour fonctionner. Cela implique que la pile ne peut fonctionner que jusqu'à 100°C. Les catalyseurs des électrodes sont faits à partir de platine.

### I .2.2.1 Principe de fonctionnement

A l'anode le dihydrogène se dissocie en cations et en électrons, cette réaction a besoin d'eau :



Les ions d'hydrogène traversent la membrane polymère jusqu'à la cathode tandis que les électrons retraversent un circuit externe. Au niveau de la cathode, une réaction encore plus complexe a lieu et donne finalement :



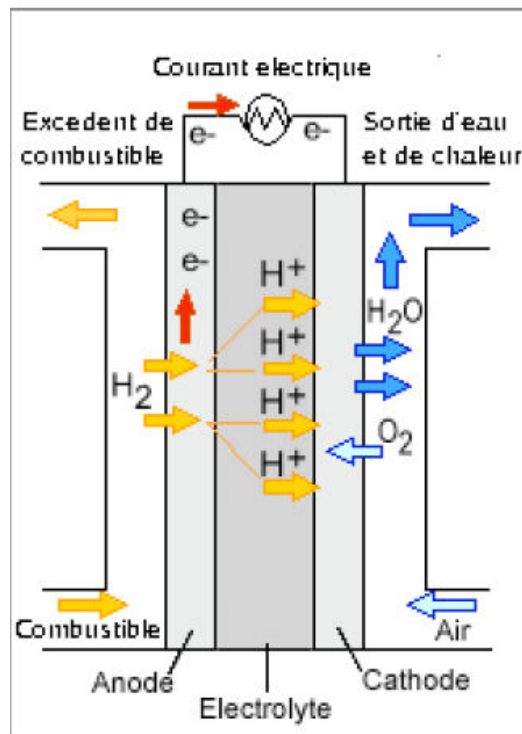


Figure I.5 Principe de fonctionnement d'une pile à combustible PEMFC

### I .2.2.2 Avantages et inconvénients

La réaction est exothermique, beaucoup de chaleur est évacuée avec l'eau et le reste sert à chauffer la pile. La chaleur de l'eau peut être récupérée. Les piles à membrane échangeuses de protons ont pour le moment un rendement d'environ 60%. Ce rendement pourrait être plus élevé en faisant fonctionner ces piles à plus haute pression, ce qui impliquerait la nécessité d'un compresseur, qui consomme beaucoup d'énergie. Le rendement peut aussi être élevé en augmentant la température de fonctionnement. C'est pour cette raison que les recherches portent actuellement sur de nouvelles membranes capables de résister à des températures de 160 à 180°C.

La PEMFC a comme avantage de ne pas avoir de température élevée, ainsi, elle se met en marche rapidement. C'est la pile qui nourrit le plus d'espoirs dans l'industrie de l'automobile et de l'électronique portable (ordinateur, téléphone, ...). De plus, elle n'est que très peu sensible au CO<sub>2</sub>, elle peut donc utiliser de l'hydrogène reformé et même l'oxygène directement contenu dans l'air.

Par contre elle est très sensible au CO, qui empoisonne les électrodes en platine : elles ne supportent que 10 ppm. La pile a besoin d'un purificateur.

Un autre inconvénient est le système complexe de circulation d'eau. La membrane doit être humide mais l'eau produite par la réaction de l'oxygène et de l'hydrogène doit pouvoir être évacuée. De plus, les prix de la membrane, des électrodes et des plaques bipolaires sont élevés, ce qui rend les PEMFC actuellement inaccessible à la commercialisation.

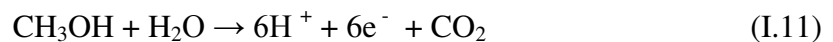
### I .2.3 DMFC (Direct Methanol Fuel Cell)

La pile à combustible DMFC est une sous-catégorie des piles à membrane échangeuse de proton. Son système est donc le même que celui d'une PEMFC. Elle a comme caractéristique d'utiliser du méthanol comme carburant.

#### I .2.3.1 Principe de fonctionnement

Le méthanol est l'un des seuls réactifs connus qui est susceptible de fournir l'hydrogène nécessaire à faire fonctionner une pile à combustible.

Pour l'utiliser, on amène un mélange d'eau et de méthanol à l'anode. Ce mélange réagit pour donner des cations d'hydrogène, des électrons et du dioxyde de carbone.

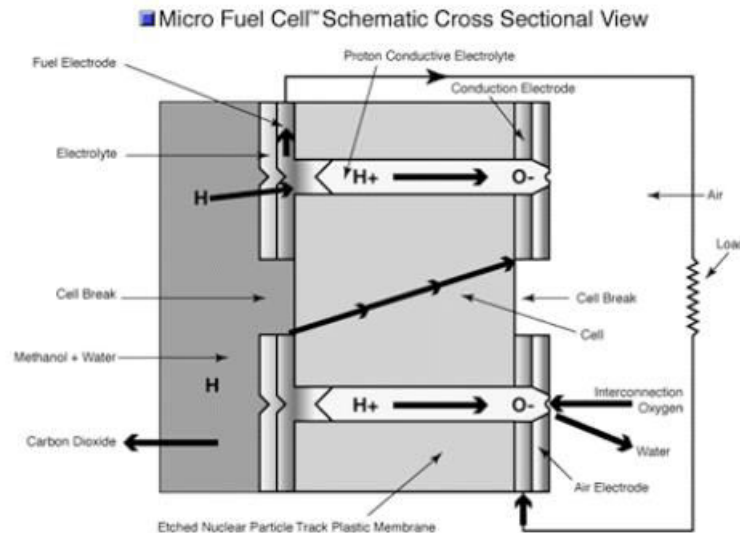


Comme dans une PEMFC classique, les ions d'hydrogène passent à travers la membrane et les électrons circulent dans un circuit extérieur vers la cathode. Le  $\text{CO}_2$  est rejeté hors de la pile.

A la cathode, une réaction semblable à celle des PEMFC nous donne de l'eau à partir de l'oxygène, des ions d'hydrogène et des électrons.



La somme des réactions de l'anode et de la cathode est exothermique. De la chaleur doit être évacuée avec l'eau car la pile fonctionne à basse température.



**Figure I.6 Principe de fonctionnement d'une pile à combustible DMFC [3]**

### I .2.3.2 Avantages et inconvénients

Le méthanol a une température d'ébullition de 65°C. Comme il doit rester liquide, la pile ne doit pas dépasser cette température. Le grand avantage de cette pile vient de son carburant qui est liquide à pression et à température ambiantes. On peut donc le stocker sans contrainte. De plus, malgré son rendement actuellement faible (20-30%), les piles DMFC ont des performances (Wh/kg) cinq fois supérieures à celles d'une batterie Li-Ion, ce qui lui ouvre la porte du domaine de l'électronique portable.

### I .2.4 PAFC (Phosphoric Acide Fuel Cell)

La pile à combustible à acide phosphorique est actuellement à un stade de développement avancé. Les recherches ont débuté dans les années 70, et des modules de PAFC ont été installés depuis le début des années 90. Les scientifiques ont pu alors les tester à long terme.

### I .2..4.1 Principe de fonctionnement

Ce type de pile a un électrolyte en acide phosphorique liquide. Contrairement à l'AFC, l'électrolyte ne circule pas, il est immobilisé dans une matrice poreuse. On peut donc le considérer comme une membrane. Les électrodes sont en carbone recouvert d'une fine couche de platine (30 microns). Des plaques d'interconnexion poreuses permettent aux gaz d'atteindre les électrodes et aux électrons d'entrer dans le circuit extérieur. Les réactions sont à peu près les mêmes que pour une PEMFC.

A l'anode, l'hydrogène se décompose en ions positifs et en électrons.



Les ions d'hydrogène passent alors dans l'électrolyte pour arriver à la cathode. Comme l'électrolyte ne laisse pas passer les électrons, ils doivent alors passer par un circuit extérieur pour atteindre eux aussi la cathode. A la cathode se passe une oxydation de l'hydrogène, ce qui engendre de l'eau.



La température de fonctionnement du système se situe entre 180 et 210°C, l'eau produite ressort donc sous forme de vapeur.

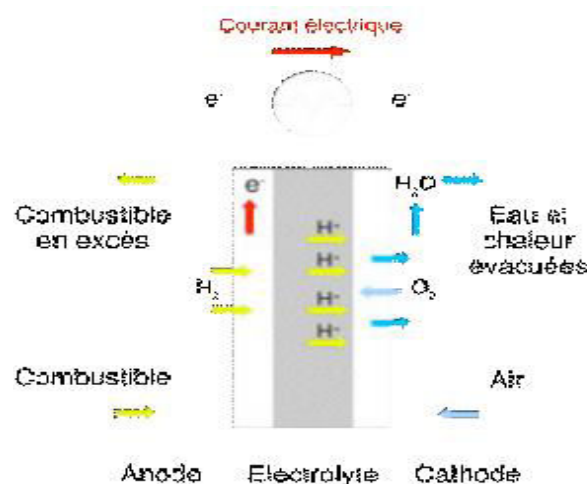


Figure I.7 Principe de fonctionnement d'une pile à combustible PAFC [4]

### I .2.4.2 Avantages et inconvénients

La pile à acide phosphorique est une pile spécialement dédiée à un usage stationnaire. En effet, la pile n'est pas faite pour s'arrêter car il ne faut pas que la température de l'électrolyte se retrouve en dessous de 42 - 35°C, température de fusion de l'acide phosphorique ; il se solidifierait.

La relativement haute température de fonctionnement rend les électrodes moins sensibles au monoxyde de carbone, la pile peut donc tolérer jusqu'à 1% (9) du volume du combustible en CO. L'électrolyte étant insensible au CO<sub>2</sub>, les PAFC peuvent utiliser de l'hydrogène reformé sans qu'il soit purifié.

La pile fonctionne à pression ambiante et la température se maintient toute seule, elle n'a donc pas besoin de compresseur ou de chauffage externe. De plus, la PAFC obtient des rendements très bons : 55% en rendement électrique et près de 30% en rendement calorifique, ce qui représente plus de 80% de rendement total. Cependant, ces rendements diminuent avec le temps d'utilisation.

Le principal inconvénient est que l'électrolyte s'évapore et les électrodes sont corrodées par le milieu acide de la pile. [2]

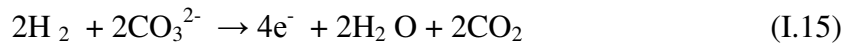
### I .2.5 MCFC (Molten Carbonate Fuel Cell)

Les piles à combustible à carbonate fondu font partie de la deuxième génération. Elles sont en effet des piles à combustible qui fonctionnent à haute température (600 à 660°C). Pour cette raison, leur application se réduit au régime stationnaire. L'électrolyte est composé d'un mélange de carbonate de lithium (Li<sub>2</sub> CO<sub>3</sub>) et de carbonate de potassium (K<sub>2</sub> CO<sub>3</sub>) à concentration respective de 62 et 38%. A température de fonctionnement, l'électrode est liquide.

#### I .2.5.1 Principe de fonctionnement

Les électrolytes ne contiennent cette fois-ci pas de platine. Elles sont principalement constituées de nickel.

Les ions qui traversent l'électrolyte sont des molécules de CO<sub>3</sub><sup>2-</sup>. A l'anode, il y a oxydation de l'hydrogène par du CO<sub>3</sub><sup>2-</sup>.

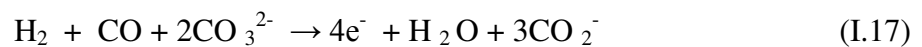


Les électrons passent dans le circuit externe et à la cathode, de l'oxygène et du dioxyde de carbone entrent en réaction. Le  $\text{CO}_2$  vient de la réaction de l'anode.

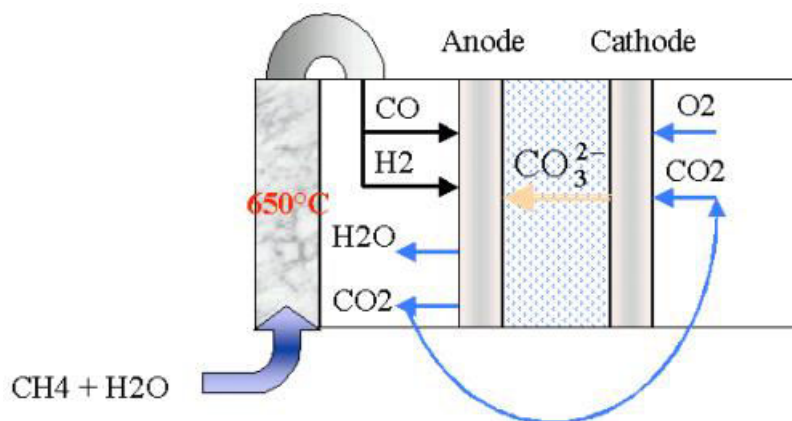


L'électrolyte est alors rechargé.

On peut aussi utiliser de l'hydrogène reformé avec les piles MCFC. Dans ce cas-ci, la réaction à l'anode sera :



Pour la même raison que pour les DMFC, on peut obtenir des résultats similaires en utilisant directement du méthane, du méthanol, de l'éthanol et du charbon gazéifié.



**Figure I.8 Principe de fonctionnement d'une pile à combustible MCFC avec reformage interne**

### I .2.5.2 Avantages et inconvénients

Grâce à la haute température de fonctionnement de la pile, il est possible d'avoir un reformage interne. Il utilise la chaleur de la pile, cela augmente donc le rendement total de la pile, qui peut atteindre jusqu'à 60% de rendement électrique et 85% de rendement total. Néanmoins, La haute température de cette pile augmente la corrosion des électrodes par l'électrolyte. De plus, il faut faire attention de ne pas noyer les électrodes dans l'électrolyte.

Les piles à combustible du type MCFC n'utilisent pas de métaux coûteux, elles sont donc relativement peu onéreuse.

### I.2.6 SOFC (Solid Oxide Fuel Cell)

Les piles à combustible à oxyde solide font partie des piles à haute température. Elles fonctionnent de 700 à 1000°C. Comme pour les MCFC, elles ont donc un usage stationnaire.

Il existe deux structures possibles pour les SOFC. La première est tout à fait standard, elle fonctionne par couches : une plaque bipolaire, une anode, un électrolyte, une cathode et une autre plaque bipolaire. L'autre a une structure en cylindre. De l'oxygène passe dans un tuyau, les bords du tuyau sont la cathode. Une couche supérieure sert d'électrolyte. Celle-ci est aussi recouverte d'une autre couche : l'anode. Autour des tuyaux se trouve de l'hydrogène.

Leur électrolyte est en céramique. Il s'agit le plus souvent de zircone stabilisée à l'yttrium. Il permet une grande conductivité des ions d'oxygène tout en étant solide. Les électrodes sont aussi céramiques.

#### I.2.6.1 Principe de fonctionnement

Une réaction d'oxydation de l'hydrogène par les ions d'oxygène se déroule à l'anode :



Les électrons circulent jusqu'à la cathode en passant par le circuit extérieur tandis que simultanément, quatre électrons entrent en réaction avec une molécule de dioxygène à la cathode :



L'électrolyte est de nouveau chargé d'ions d'oxygène.

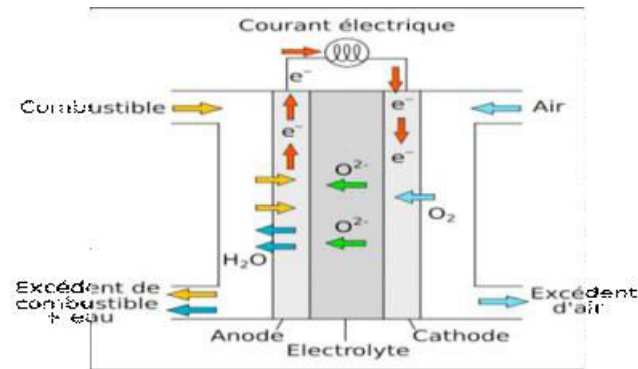


Figure I.9 Principe de fonctionnement d'une pile à combustible SOFC

### I .2.6.2 Avantages et inconvénients

Dans ce type de pile, il n'y a plus que deux phases, le solide et le gazeux. On supprime ainsi tous les problèmes liés à l'empoisonnement des électrodes par l'électrolyte ou par les gaz. De plus, la haute température de fonctionnement permet un bon rendement allant jusqu'à 70% . [2]

	PEMFC	AFC	PAFC	MCFC	SOFC	DMFC
Electrolyte	polymère conducteur de protons	solution alcaline	acide phosphorique	carbonate fondu	céramique	polymère conducteur de protons
Catalyseur	platine	platine	platine	nickel et l'oxyde de nickel	cermet nickel-zircone	platine
Charge mobile	H <sup>+</sup>	OH <sup>-</sup>	H <sup>+</sup>	CO <sub>3</sub> <sup>2-</sup>	O <sup>2-</sup>	H <sup>+</sup>
Température de fonctionnement en (°C)	40 - 90	65 - 220	205	650	600 - 1000	50 - 130
Rendement électrique pile en (%)	35 - 40	60 - 70	50	65	45 - 65	20 - 30
Champs d'applications	automobile, cogénération	applications spatiales	cogénération	cogénération	cogénération	applications mobiles

Tableau1: tableau récapitulatif des différents types de piles à combustible [1]

### I.3. Composants d'une cellule d'une pile à combustible de type PEMFC

#### I.3.1. Définition d'une cellule :

la cellule de base d'une pile à combustible est constituée de deux électrodes (anode et cathode) séparées par un électrolyte [1]

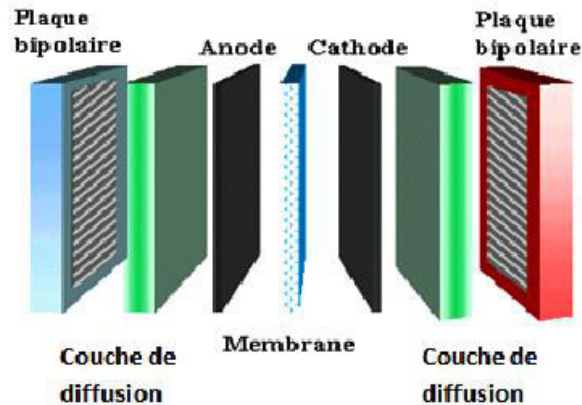


Figure I.10 Eléments de base d'une cellule de pile à combustible PEM.

#### I.3.2. Membrane

Pour les piles PEMFC, l'électrolyte est une membrane polymère ionique de type acide. En général, Il s'agit généralement d'une membrane per fluorée sur laquelle sont greffés des groupements acides sulfonates  $\text{SO}_3^-$  ou  $\text{COOH}$ . La figure I.11 représente la structure de ce type de membrane avec des chaînes principales hydrophobes et des chaînes pendantes hydrophiles, la figure I.12 représente la structure chimique du Nafion.

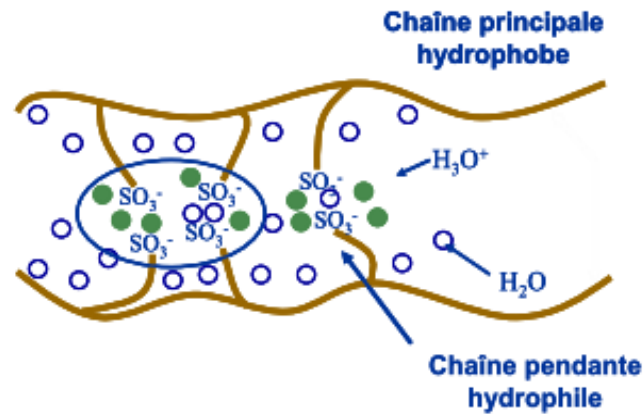


Figure I.11 Structure interne du Nafion

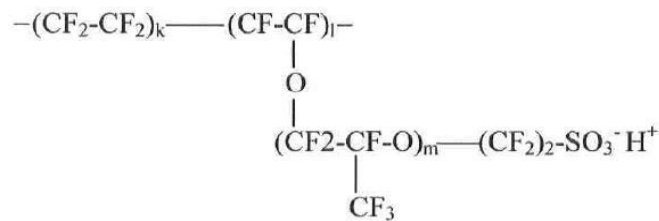


Figure I.12 la structure chimique du Nafion.

Les membranes fonctionnent à une température entre 60 et 90°C et à des pressions entre 1 et 5 bars mais elles ne supportent qu'un différentiel de pression de 0,3 à 0,5 bar. Dans ces conditions, elles se montrent très stables et relativement résistantes, ce qui permettrait d'atteindre des durées de vie de 3000 à 4000 h pour les transports. La résistance mécanique est fonction également de la surface et de la manière de maintenir la plaque. [5]

### I .3.3.Les électrodes

Les électrodes sont le siège des phénomènes d'oxydation et de réduction. Les phénomènes qui y interviennent sont donc de nature :

- ❖ électrique,
- ❖ chimique,
- ❖ thermique,
- ❖ de transfert de masse

Elles comprennent deux zones, une zone active, lieu de la réaction, qui assure la conduction électronique et ionique ; elle contient un catalyseur (Pt) et du téflon (hydrophobe) et une zone diffusionnelle qui assure le transport des gaz jusqu'à la zone active, l'évacuation de l'eau et la conduction électronique. Leur épaisseur varie de 5 à 50  $\mu\text{m}$ .

### **I .3.4. Le catalyseur**

Le platine convient parfaitement pour une alimentation en gaz très purs (hydrogène et oxygène). Côté hydrogène, on fonctionne avec une qualité dite 99,999% c'est dire qu'il n'y a que 10ppm de gaz autre que l'hydrogène [5]. Côté anode on utilise de l'air ambiant. La qualité ne peut être garantie et il y a toujours présence de monoxyde de carbone (CO) qui est un véritable poison pour le platine. Les molécules de CO s'adsorbent à la surface du platine et bloquent l'accès à l'hydrogène. Pour y remédier on utilise un mélange platine-ruthénium à proportions à peu près égales. Une autre solution serait de fonctionner à température plus élevée mais les membranes ne le permettent pas.

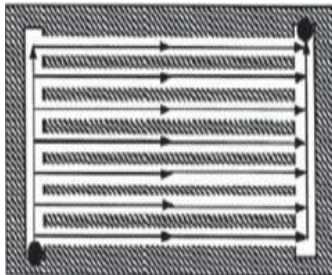
### **I .3.5. Les couches de diffusion**

Entourant les électrodes, les couches de diffusion ou GDL (gaz diffusion layer) ont des rôles multiples de permettre la diffusion des gaz jusqu'aux électrodes, d'assurer le transfert des électrons vers les électrodes, de faciliter l'évacuation de l'eau et de la chaleur tout en assurant un maintien mécanique. Elles sont à la fois conductrices et poreuses. Elles sont généralement constituées par un feutre en fibres de carbone. On y dépose une fine couche de poudre de carbone.

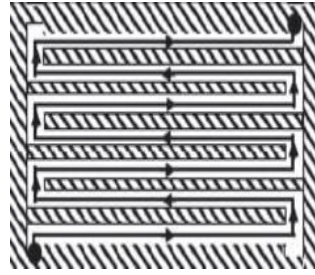
### **I .3.6. Les plaques bipolaires**

Les plaques bipolaires assurent la tenue mécanique, la séparation des réactifs de deux cellules successives et la liaison électrique entre les cellules d'un part et le circuit extérieur d'autre part. Elles ont une épaisseur pouvant varier selon le fabricant de 1 à 10mm et sont souvent faites avec du graphite haute densité ou en métal. Les techniques d'élaboration industrielles sont le moulage ou l'emboutissage et plus rarement, sauf pour des prototypes, l'usinage ou la gravure chimique. Une difficulté majeure, outre le coût d'élaboration de ces plaques, est la corrosion.

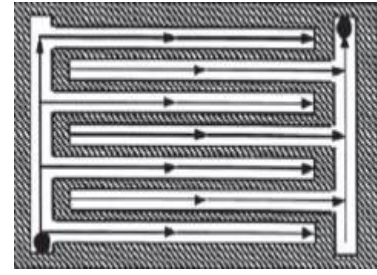
Les faces constituent des micro-canaux de dimensions de l'ordre de 0,8 à 1mm pour les gaz et pour la récupération de l'eau. La forme exacte de ces canaux est généralement tenue secrète car il s'agit d'un savoir faire propre à chaque fabricant. Les dispositions classiques sont en serpentins, en canaux parallèles ou en combinaison des deux.



Canaux en parallèles



Canaux en serpentins



Canaux interpénétrés

**Figure I.13 Différentes structures géométriques de canaux des plaques bipolaires.**

A ces plaques s'ajoutent deux plaques terminales à chaque extrémité de la pile, appelés plaques de serrage. Pour assurer la fonction thermique d'évacuation de la chaleur, on peut utiliser des systèmes passifs de radiateur (refroidissement à air) ou actifs avec circulation de liquide calorporteur avec des canaux spécifiques dans les plaques. [5].



# ***CHAPITRE II***

## II. Modélisation de la pile à combustible à membrane échangeuse de protons (MEP)

A cause de la complexité des mécanismes de transport de l'eau dans la pile à combustible à membrane échangeuse de protons, les simplifications suivantes sont retenues :

- Modélisation unidimensionnelle
- Les pertes de charge dans les diffuseurs sont négligeables
- L'épaisseur des couches catalytiques est négligeable devant celle des diffuseurs
- L'eau est sous forme liquide dans la membrane et sous forme vapeur dans les diffuseurs
- La membrane est assimilée à une solution électrolytique homogène

### II. 1. Fonctionnement de la pile à combustible MEP

Un diagramme de la pile à combustible MEP est montré dans la Fig. II.1. L'hydrogène diffuse en traversant l'électrode jusqu'il arrive la couche catalytique de l'anode, ensuite il réagit pour former des protons et électrons :



Les protons circulent en passant par la membrane vers la couche catalytique de la cathode. Cependant, les électrons circulent dans un circuit électrique externe vers la cathode. A côté de la cathode, les protons, électrons et oxygène réagissent comme suit :



La réaction chimique globale de la pile à combustible MEP est :



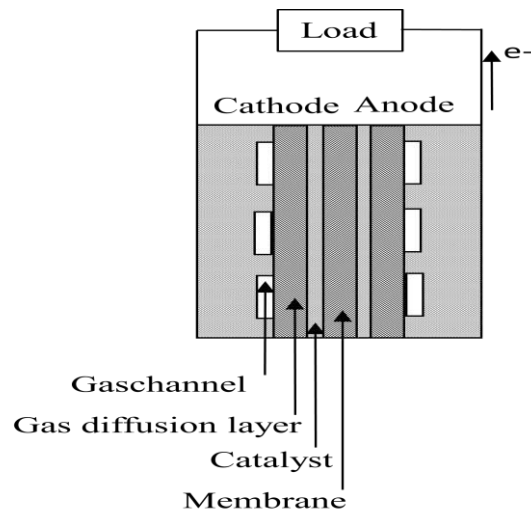


Fig. II.1 Pile à combustible MEP

### II.1.1. Modèle électrochimique

La tension de sortie d'une cellule peut être définie comme suit :

$$V_{cellule} = E - V_{activation} - V_{ohmique} - V_{concentration} \quad (II.4)$$

Dans l'équation ci-dessus,  $E$  est le potentiel thermodynamique de la cellule et il représente sa tension réversible,  $V_{activation}$  est la chute de tension due à l'activation de l'anode et de la cathode,  $V_{ohmique}$  est la chute de tension ohmique résultant des résistances de la conduction des protons par l'électrolyte et des électrons, et  $V_{concentration}$  représente la chute de tension résultant de la réduction de la concentration des gaz de réactifs. La densité de puissance de sortie de la pile à combustible est indiquée par

$$P_{cellule} = V_{cellule} i \quad (II.5)$$

Chaque terme de l'équation II.4 est discuté et modélisé séparément.

#### II.1.1.1. Tension réversible de la cellule

La tension de sortie de la pile à combustible est déterminée par la tension réversible des cellules, ce qui résulte de la différence potentielle produite par la réaction chimique et plusieurs pertes de tension qui ont lieu à l'intérieur de la cellule.

La tension réversible de la pile à combustible est une fonction de la température et des pressions partielles des réactifs et du produit, comme est montré dans l'équation suivante :

$$E = \frac{\Delta G}{2F} + \frac{\Delta S}{2F}(T - T_{ref}) + \frac{RT}{2F} \left[ \ln(P_{H_2}) + \frac{1}{2} \ln(P_{O_2}) \right] \quad (\text{II.6})$$

Où  $\Delta G$  est le changement de l'énergie libre de Gibbs ;  $F$  est la constante de Faraday ;  $\Delta S$  est le changement de l'entropie ;  $R$  est la constante universelle des gaz ;  $P_{H_2}$  et  $P_{O_2}$  sont les pressions partielles d'hydrogène et d'oxygène, respectivement.  $T$  dénote la température d'opération de la cellule et  $T_{ref}$  est la température de référence. En utilisant les valeurs standards de pression et de température pour  $\Delta G$ ,  $\Delta S$ , et  $T_{ref}$  l'équation II.6 peut être simplifiée à

$$E = 1.229 - 0.85 \times 10^{-3}(T - 298.15) + 4.31 \times 10^{-5} T \left[ \ln(P_{H_2}) + \frac{1}{2} \ln(P_{O_2}) \right] \quad (\text{II.7})$$

### II.1.1.2. Pertes d'activation

Les pertes d'activation peuvent être calculées par deux méthodes différentes, qui sont les suivantes :

a. Méthode 1 :

Les pertes d'activation sont liées à la barrière d'énergie qui doit être surmonté pour qu'une réaction chimique entre les réactifs ait lieu. L'expression pour les pertes d'activation est donnée par

$$\eta_{act} = \varepsilon_1 + \varepsilon_2 T + \varepsilon_3 T \ln(C_{O_2}^*) + \varepsilon_4 T \ln(i) \quad (\text{II.8})$$

Là où  $T$  est la température de pile (K),  $i$  est le courant d'opération (A),  $C_{O_2}^*$  est la concentration de l'oxygène à l'interface de catalyseur ( $\text{mol}/\text{cm}^3$ ), et les coefficients  $\varepsilon$  représentent des coefficients paramétriques basés sur les données expérimentales.

Tableau.II. 1 : Coefficients paramétriques des pertes d'activation [6]

Coefficient	Valeur
$\varepsilon_1$	-0,944
$\varepsilon_2$	$3,54 \times 10^{-3}$
$\varepsilon_3$	$7,80 \times 10^{-3}$
$\varepsilon_4$	$-1,96 \times 10^{-4}$

b. Méthode 2 :

Les pertes d'activation sont calculées théoriquement par la formule suivante :

$$V_{activation} = \frac{RT}{2\gamma F} \ln\left(\frac{i}{i_0}\right) \quad (\text{II.9})$$

$\gamma$  est un coefficient de transfert d'électrons. Ce coefficient décrit la proportion de l'énergie électrique appliquée. Sa valeur diffère d'un matériau à l'autre.  $i_0$  est la densité de courant d'échange.

### II.1.1.3. Pertes ohmiques

Les pertes ohmiques (ou la polarisation ohmique) se produisent à cause des pertes par effet de Joule dans la cellule. Si l'électrolyte et les électrodes obéissent à la loi d'ohm, nous pouvons exprimer les pertes ohmiques par l'équation suivante :

$$\eta_{ohmic} = -iR^{int} = -i(\varepsilon_5 + \varepsilon_6 T + \varepsilon_7 i) \quad (\text{II.10})$$

Les coefficients paramétrique  $\varepsilon_5$  à  $\varepsilon_7$  dans la résistance interne  $R^{int}$ , sont purement empiriques et basés sur les données expérimentales. [6]

**Tableau.II.2 : Coefficients paramétriques des pertes ohmiques [6]**

Coefficients	Valeurs
$\varepsilon_5$	$3,30 \times 10^{-3}$
$\varepsilon_6$	$-7,55 \times 10^{-4}$
$\varepsilon_7$	$1,10 \times 10^{-4}$

#### II.1.4. Pertes de concentration

La polarisation de concentration résulte quand les réactions à l'électrode sont influencées par les effets de transfert de masse. Dans cette région, les réactifs deviennent consommés plus rapidement tandis que le produit s'accumule. Ces effets empêchent davantage la réaction et la tension de la cellule chute à zéro. L'expression pour les pertes de la concentration de la pile à combustible est donnée par : [7]

$$V_{concentration} = -\frac{RT}{2F} \ln \left( 1 - \frac{i}{i_L} \right) \quad (\text{II.11})$$

$i_L$  représente la densité de courant limite. Ce paramètre décrit la densité de courant maximale qui peut circuler dans l'électrode.

## II.2. Transport de masse

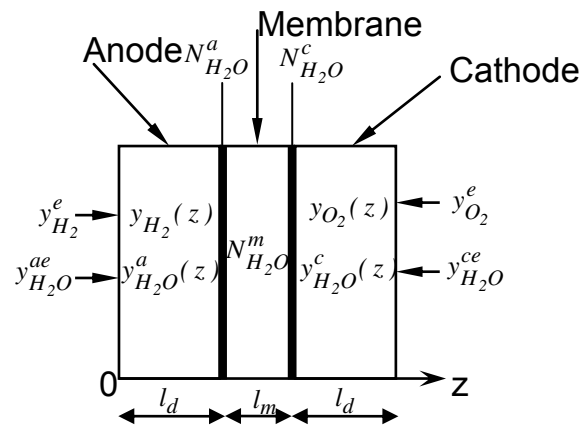


Fig. II.2 Transport de masse à travers l'assemblage Membrane-Electrodes

### 1. Flux molaire

#### 1.1. A l'anode

Flux molaire d'hydrogène

$$N_{H_2} = \frac{i}{2F} \quad (\text{II.12})$$

#### 1.2. A la membrane

flux molaire de  $H^+$

$$N_{H^+} = \frac{i}{F} \quad (\text{II.13})$$

#### 1.3. A la cathode

Flux molaire d'oxygène

$$N_{O_2} = -\frac{i}{4F} \quad (\text{II.14})$$

1.4. Al'interface anode-membrane

$$N_{H_2O}^a = N_{H_2O}^m \quad (\text{II.15})$$

1.5. Al'interface cathode-membrane

$$N_{H_2O}^c = N_{H_2O}^m + N_{H_2O}^{prod} \quad \text{et} \quad N_{H_2O}^{prod} = \frac{i}{2F} \quad (\text{II.16})$$

## II.2.2. Diffusion des espèces

2.1. A l'anode

$$y_{H_2} + y_{H_2O}^a = 1 \quad (\text{II.17})$$

2.2. A la cathode

$$y_{O_2} + y_{N_2} + y_{H_2O}^c = 1 \quad (\text{II.18})$$

2.3. Equation de Maxwell-Stefan

L'equation de Maxwell Stefan unidimensionnelle peut être écrite comme suit:

a. A l'anode

$$\frac{dy_{H_2}}{dz} = \frac{1}{cD_{effH_2,H_2O}} [y_{H_2}(N_{H_2O}^a + N_{H_2}) - N_{H_2}] \quad (\text{II.19})$$

Où

$$c = \frac{P}{RT} \quad (\text{II.20})$$

L'equation (II.18) peut être résolue en employant les conditions aux limites suivantes :

$$y_{H_2O}^{ae} = HR_a \frac{p_{sat}}{p} \quad (II.21)$$

$$y_{H_2}^e = 1 - y_{H_2O}^{ae} \quad (II.22)$$

b. A la cathode:

$$\frac{dy_{O_2}}{dz} = \frac{1}{c} \left[ \frac{N_{O_2} + N_{H_2O}^c}{D_{eff_{O_2, H_2O}}} y_{O_2} + \left( \frac{1}{D_{eff_{O_2, H_2O}}} - \frac{1}{D_{O_2, N_2}} \right) N_{O_2} y_{N_2} - \frac{N_{O_2}}{D_{eff_{O_2, H_2O}}} \right] \quad (II.23)$$

$$\frac{dy_{N_2}}{dz} = \frac{1}{c} \left( \frac{N_{O_2}}{D_{eff_{O_2, N_2}}} + \frac{N_{H_2O}^c}{D_{eff_{H_2O, N_2}}} \right) \quad (II.24)$$

avec  $D_{eff(i,j)} = \varepsilon^{1.5} * D_{eff(i,j)}$ . [8]

L'équation (II.22) peut être résolue en employant les conditions aux limites suivantes :

$$y_{H_2O}^{ce} = HR_c \frac{p_{sat}}{p} \quad (II.25)$$

$$y_{O_2}^{ce} = 0,21 \left( 1 - HR_c \frac{p_{sat}}{p} \right) \quad (II.26)$$

$$y_{N_2}^{ce} = 0,79 \left( 1 - HR_c \frac{p_{sat}}{p} \right) \quad (II.27)$$

### II.2.3. Transport dans la membrane

Parmi les différentes équations de teneur en eau proposées dans la littérature, deux corrélations mathématiques sont établies respectivement à 30°C et 80°C .[9]

$$\lambda(30^\circ C) = 0.043 + 17.81\Phi_{H_2O} - 39.85\Phi_{H_2O}^2 + 36.0\Phi_{H_2O}^3 \quad (II.28)$$

$$\lambda(80^\circ C) = 0.3 + 10.8\Phi_{H_2O} - 16.0\Phi_{H_2O}^2 + 14.1\Phi_{H_2O}^3 \quad (II.29)$$

Les activités  $\Phi_{H_2O}$  (humidités relatives) sont définies comme suit :

$$\Phi = y_{H_2O}^{a,c} \frac{p}{p_{sat}} \quad (II.30)$$

La pression de vapeur saturée est donnée par:

$$\frac{p_{sat}}{p} = \exp \left( 13.67 - \frac{5096.23}{T} \right) \quad (II.31)$$

Le transport de l'eau dans la membrane est donné par:[7]

$$N_{H_2O}^m = \frac{0.114\lambda i}{F} - D_{H_2O,m} \frac{dc_{H_2O}}{dz} \quad (\text{II.32})$$

Où

$$c_{H_2O} = \frac{\rho \, d_{ry} \, \lambda}{EW} \quad (\text{II.33})$$

Soient  $\lambda_a$  et  $\lambda_b$  les teneurs en eau aux interfaces membrane-diffuseurs. La variation de la teneur en eau de la membrane  $\lambda(z)$  est donnée par :[7]

$$\frac{\lambda(z) - \lambda_a}{\lambda_c - \lambda_a} = \frac{1 - \exp(k_m z)}{1 - \exp(k_m l_m)} \quad (\text{II.34})$$

Où

$$k_m = \frac{0.114 \times EW \times i}{\rho_{sec} D_{H_2O,m} F} \quad (\text{II.35})$$

En regroupant les équations (II.28)-(II.31), le flux d'eau dans la membrane peut être exprimé comme suit:

$$N_{H_2O}^m = \frac{0.114i}{F} \left[ \lambda_a + \frac{\lambda_c - \lambda_a}{1 - \exp(k_m l_m)} \right] \quad (\text{II.36})$$

### II.3.Procédure de calcul

Pour déterminer le flux d'eau dans la membrane, nous avons suivi la procédure itérative suivante :

1. Donner une valeur initiale arbitraire à  $N_{H_2O}^m$
2. En la remplaçant dans les équations (II.14) et (II.15), on obtient  $N_{H_2O}^a$  et  $N_{H_2O}^c$
3. On remplace les valeurs de  $N_{H_2O}^a$  et  $N_{H_2O}^c$  dans les équations (II.18), (II.22) et (II.23), on obtient alors  $y_{H_2}(z)$ ,  $y_{O_2}(z)$  et  $y_{N_2}(z)$
4. On remplace les équations ainsi obtenues de  $y_{H_2}(z)$ ,  $y_{O_2}(z)$  et  $y_{N_2}(z)$  dans les équations (II.16) et (II.17), on obtient  $y_{H_2O}^a$  et  $y_{H_2O}^c$
5. A partir de l'équation (II.29) on peut tirer  $\Phi^a$  et  $\Phi^c$  aux interfaces membrane-anode et membrane-cathode.
6. A partir des équations (II.27) et (II.28) on peut obtenir  $\lambda^a(30^\circ C)$ ,  $\lambda^a(80^\circ C)$ ,  $\lambda^c(30^\circ C)$  et  $\lambda^c(80^\circ C)$
7. A partir de l'équation (II.33), on peut tirer  $\lambda(z)$
8. Et à partir de l'équation (II.35), on peut déduire une nouvelle valeur de  $N_{H_2O}^m$
9. Enfin si le critère de convergence  $\left| \frac{N_{H_2O}^m(nouvelle) - N_{H_2O}^m(ancienne)}{N_{H_2O}^m(nouvelle)} \right| \leq \epsilon$  est vérifié donc c'est bon sinon utiliser la nouvelle valeur ainsi obtenue de  $N_{H_2O}^m$  et répéter les étapes de 2 à 9 jusqu'à ce que le critère de convergence soit vérifié.

Pour traduire la procédure ci-dessus en un programme, nous avons choisi le langage Matlab dont l'organigramme est présenté comme suit.

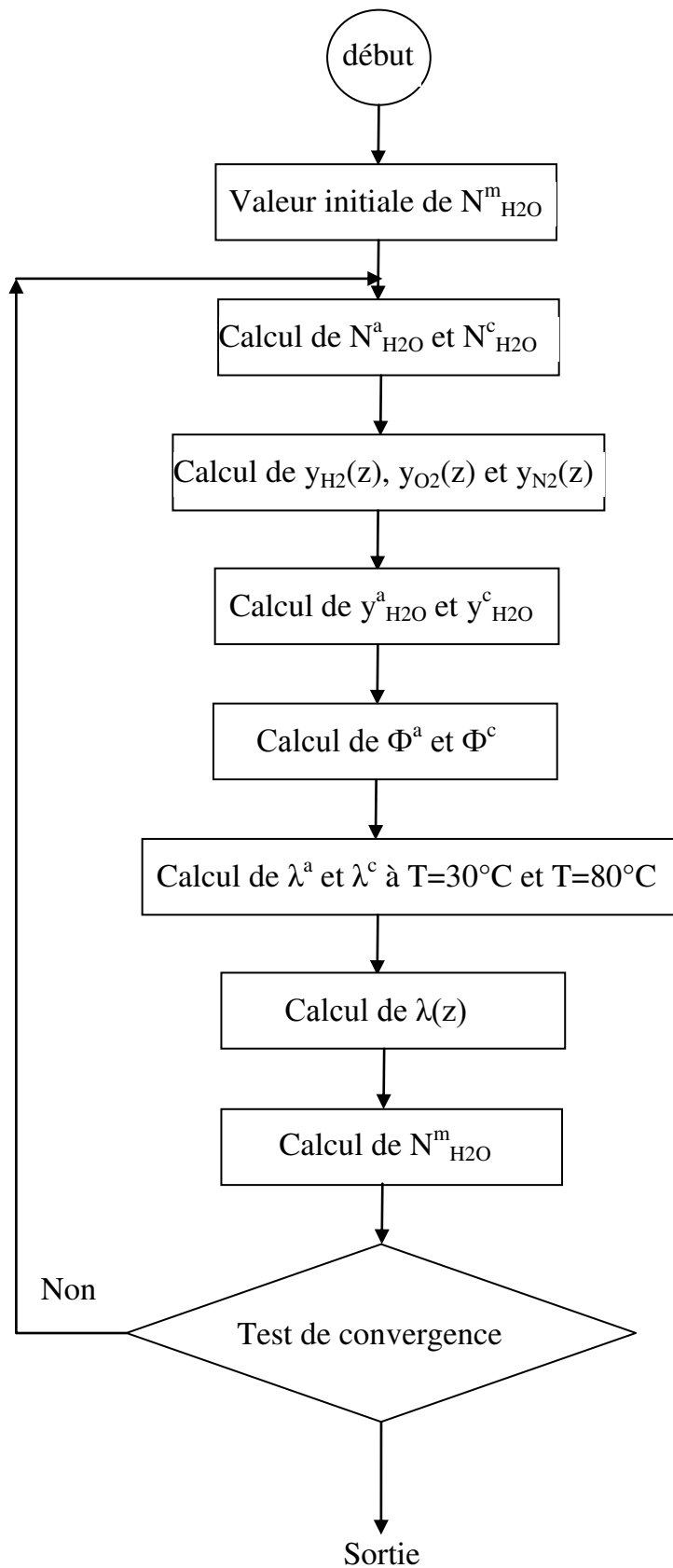


Fig. II.3 Organigramme de calcul



# ***CHAPITRE III***

### III-Résultats et Discussion

Les piles à combustible de type PEMFC, comme nous avons pu le voir au chapitre II, ont des performances qui dépendent fortement des conditions de fonctionnement. Dans ce chapitre nous allons étudier l'influence de quelques paramètres de fonctionnement sur les performances électriques de la pile.

Le langage Matlab a été utilisé pour résoudre les équations obtenues dans le chapitre II. Le choix de ce langage est basé sur sa flexibilité et sa simplicité. Tous les programmes utilisés dans la simulation sont dans l'annexe.

Les paramètres utilisés dans la simulation sont résumés dans le tableau suivant :

**Tableau III.1 : Paramètres de simulation**

Paramètre	Valeur
T	353 K
P <sub>O2</sub>	2 atm
P <sub>H2</sub>	1 atm
Hra	0.4
HRc	0.8
$\epsilon$	0.8
D <sub>N2,H2O</sub>	$4.62586 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$
D <sub>H2,H2O</sub>	$2.25004 \cdot 10^{-4} \text{ m}^2/\text{s}$
D <sub>H2O,m</sub>	$3 \cdot 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$
D <sub>O2,H2O</sub>	$4.41623 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$
EW	1100 g /mol
Lc	$350 \cdot 10^{-6} \text{ m}$
La	$350 \cdot 10^{-6} \text{ m}$
Lm	$117 \cdot 10^{-6} \text{ m}$

#### III.1 Détermination des paramètres des pertes d'activation ( $\gamma$ et $i_0$ )

Les données expérimentales de Chebbi et al. ont été ajustées au notre modèle . Les paramètres de perte d'activation  $\gamma$ , et  $i_0$ , sont déterminés et listé dans le **Tableau III.2**. Les deux paramètres dépendent de la charge de Pt.

**Tableau III.2 : Paramètres des pertes d'activation**

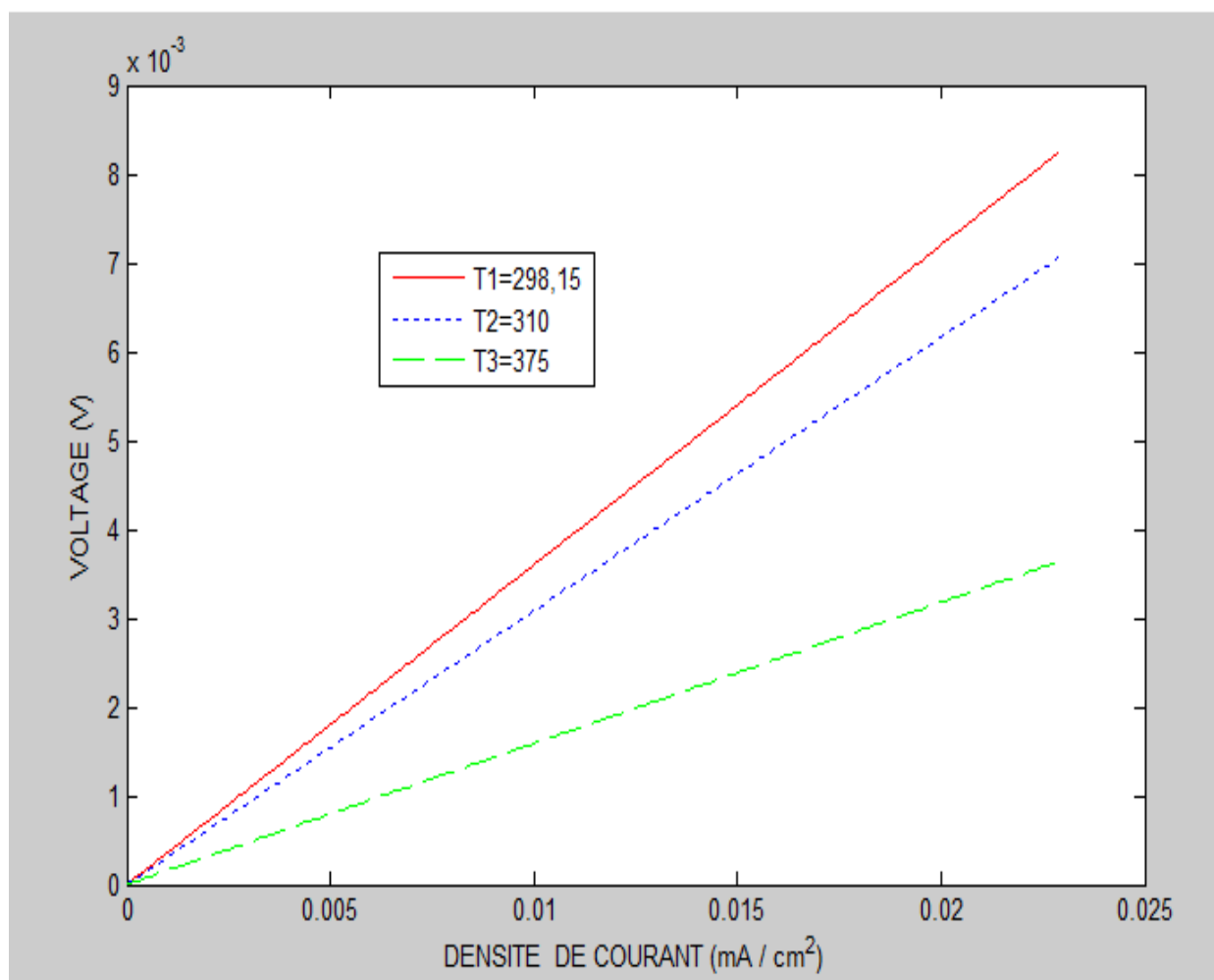
Paramètre	Valeur
$\gamma$	0.25
$i_0, \text{A/cm}^2$	$3 \times 10^{-8}$

Typiquement, la valeur de  $\gamma$  varie dans une gamme très étroite d'environ 0.1 à 0.5. La valeur obtenue est bien située dans l'intervalle.

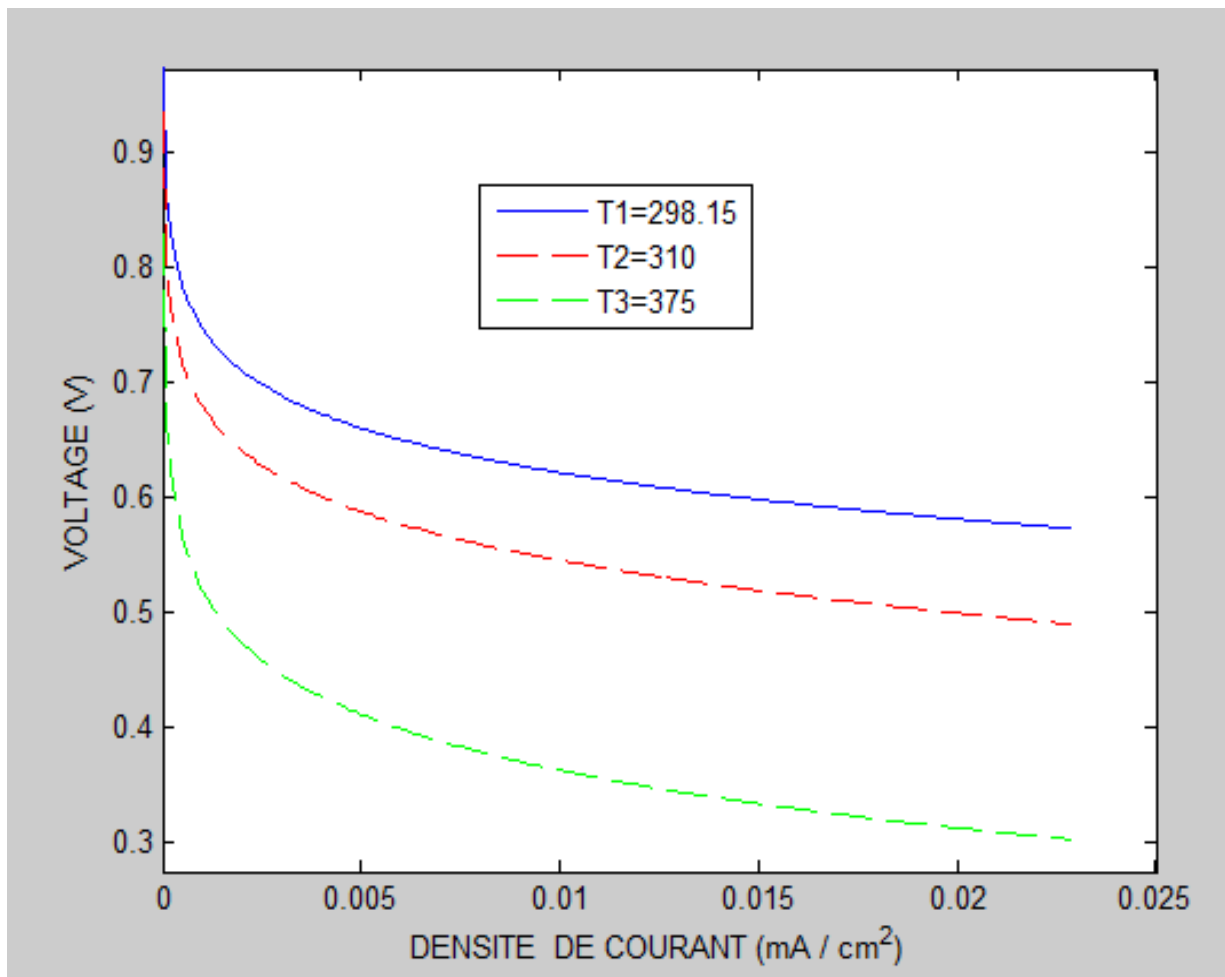
### III.2 Influence de la température de fonctionnement sur les pertes ohmiques (polarisation ohmique)

La température de fonctionnement est un paramètre très important, influençant les performances de la pile. Une variation légère de la température provoque des effets sur la teneur en eau et la conductivité protonique. La **Fig.III.1** représente les variations des pertes ohmiques pour différentes températures ( $T=298.15 \text{ K}$  ;  $310\text{K}$  et  $375\text{K}$ ). Nous observons que les pertes augmentent au fur et à mesure avec la densité de courant. La densité de courant et la chute de tension ohmique varient selon la charge électrique et leurs points représentatifs sont bien indiqués par la **Fig.III.1**

Les pertes ohmiques diminuent avec l'augmentation de la température et que les performances de la pile sont plus améliorées si la pile fonctionne à une température élevée. En effet, l'augmentation de la température de fonctionnement provoque une augmentation de la conductivité protonique de la membrane et par conséquent une diminution de sa résistance ohmique, d'autre part des fortes températures accélèrent la cinétique des réactions électrochimiques aux électrodes (c.à.d. l'augmentation de la diffusion des gaz dans les électrodes) . Cependant, la pile à combustible à membrane échangeuse de protons a une température de fonctionnement limitée à moins de  $100^\circ\text{C}$  pour éviter tout dessèchement de la membrane et conserver ainsi l'eau sous forme liquide dans la membrane.



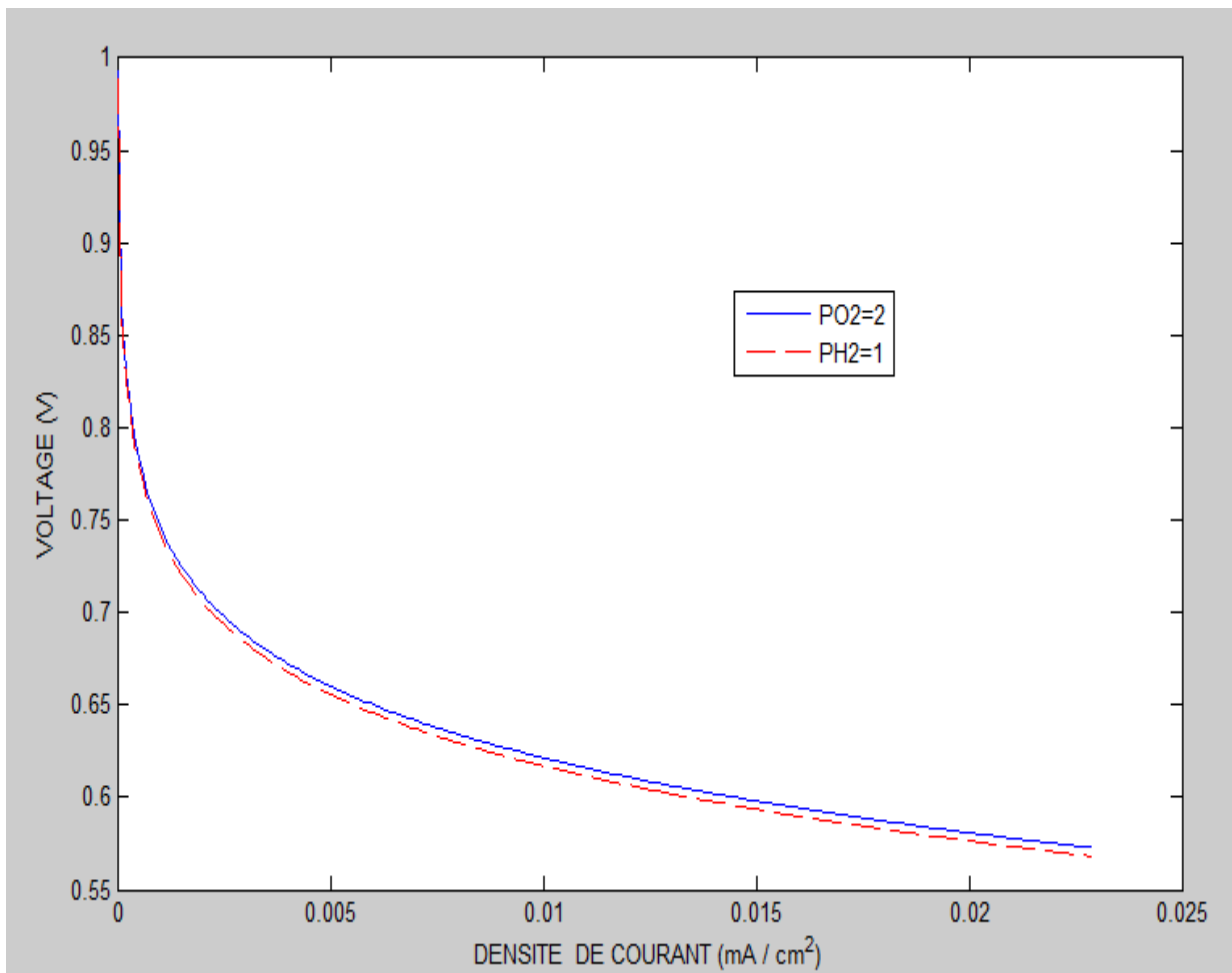
**Fig.III.1** Variation des pertes ohmiques en fonction de la densité de courant pour différentes températures



**Fig.III.2** Variation de la tension de la cellule en fonction de la densité de courant pour différentes températures

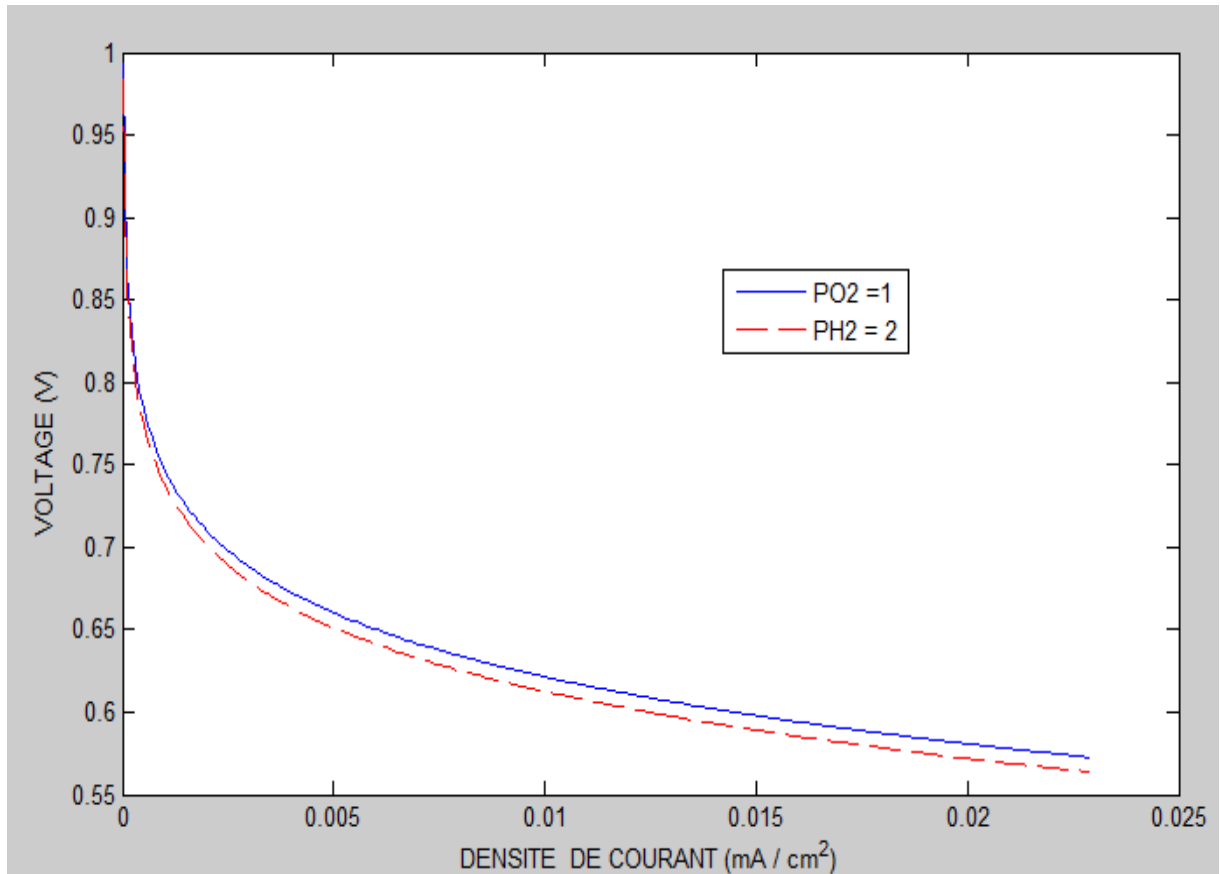
### III.3 Influence de la pression des gaz H<sub>2</sub> et O<sub>2</sub>

La **Fig. III.3** représente l'influence de la variation de la pression de l'oxygène sur les performances électriques de la pile à 25C. Nous avons modifié les valeurs de la pression d'oxygène ;  $P_{O_2} = 1$  bar et  $P_{O_2} = 2$  bar, en gardant la pression d'hydrogène. D'après la figure, nous remarquons que l'augmentation de la pression d'oxygène permettra d'améliorer les performances de la cellule. L'augmentation de la pression augmente la tension et diminue généralement les pertes d'activation, c'est-à-dire il y a une amélioration dans la diffusion des gaz sur les surfaces des électrodes.



**Fig. III.3** Courbes de polarisation de la cellule pour différentes pressions d'O<sub>2</sub>

La **Fig. III.4** représente l'influence de la variation de la pression de l'hydrogène sur les performances électriques de la pile à 25C. De même, l'augmentation de la pression d'hydrogène permettra d'améliorer les performances de la cellule.



**Fig. III.4** Courbes de polarisation de la cellule pour différentes pression d'H<sub>2</sub>

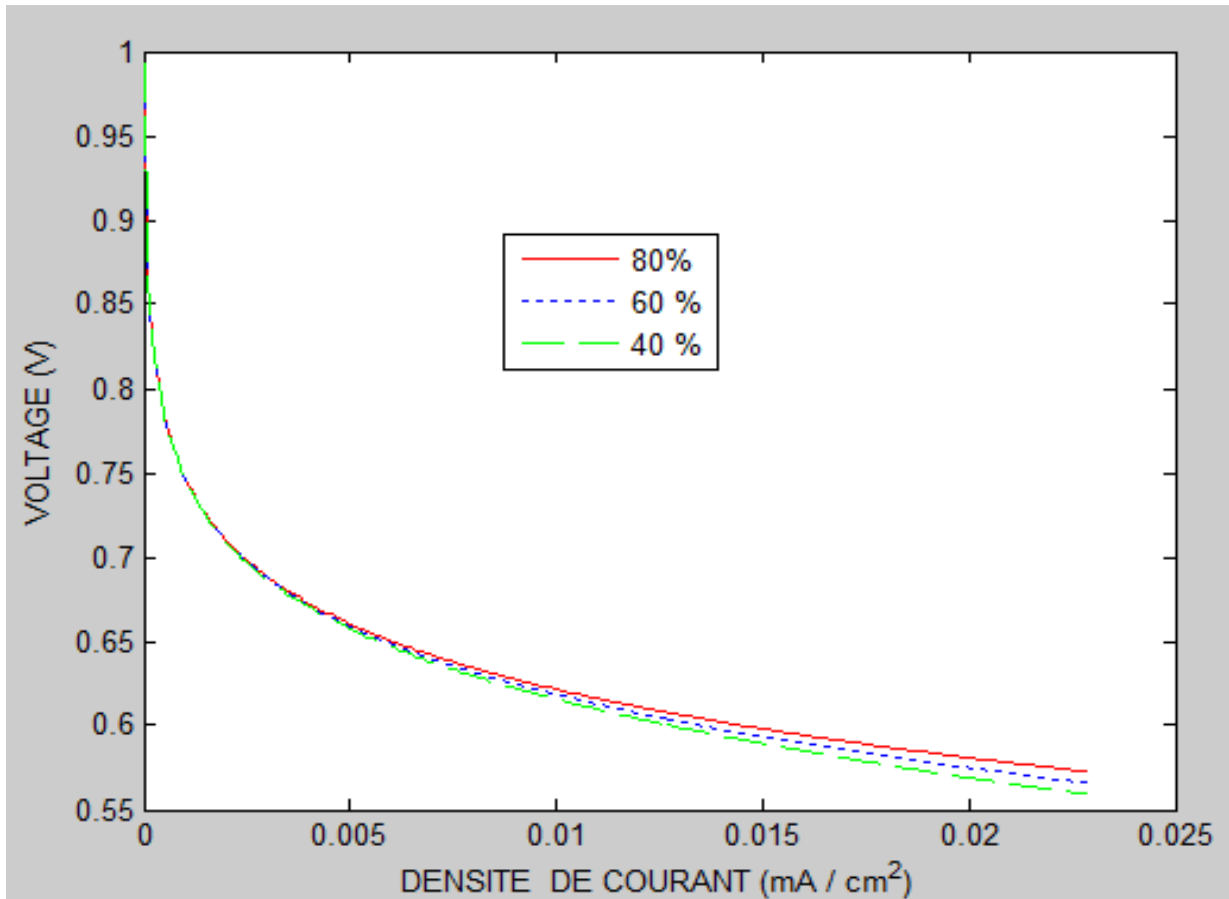
### III.4 Influence de l'humidité de la membrane

Dans cette simulation, nous avons déterminé l'influence de l'humidité de la membrane sur les performances électriques de la cellule. La **Fig. III.5** représente les courbes de polarisation réalisées avec cette simulation. La membrane étant hydratée sur une plage d'humidité relative [40% - 80%] à une température de fonctionnement de 25C. Les performances électriques de la cellule varient en fonction de l'humidité des gaz, comme le montre dans la figure ci-dessous.

Les performances les plus faibles ont été obtenues pour des faibles humidités car d'une part une bonne hydratation de la membrane facilite la diffusion des protons et diminue donc sa résistance, d'autre part la présence d'une plus grande quantité d'eau liquide influence la diffusion des gaz.

L'humidification de la membrane est un paramètre essentiel pour réduire la résistance au transport de protons (augmentation de la conductivité protonique de la membrane) et ainsi obtenir de bonnes performances électriques. Il est alors intéressant d'observer les profils de teneur en eau dans l'épaisseur de la membrane en fonction des conditions de fonctionnement, malheureusement par manque de temps on n'a pas pu le faire.

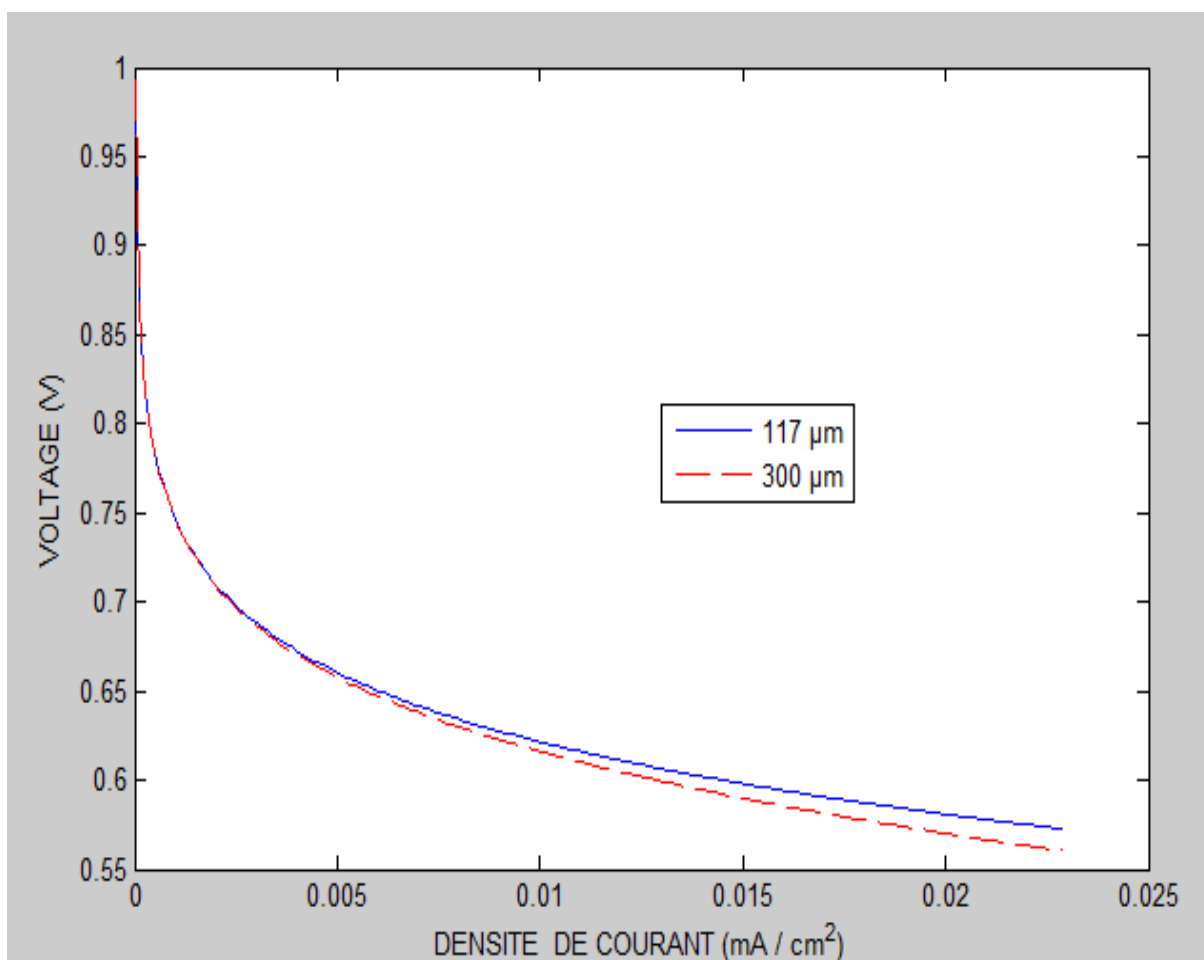
On peut conclure alors que l'effet de l'augmentation de l'hydratation de la membrane améliore les performances de la cellule dû à des pertes ohmiques réduites.



**Fig. III.5** Courbes de polarisation de la cellule pour différentes humidités

### III.5 Influence de l'épaisseur de la membrane

L'influence de l'épaisseur de la membrane sur les performances électriques de la pile est montrée sur la **Fig. III.6**. Deux valeurs de l'épaisseur de la membrane ont été utilisées dans la simulation, 117 et 300  $\mu\text{m}$ . Nous remarquons que lorsque l'épaisseur de la membrane augmente, la tension de la pile (composé d'une cellule) diminue. Car l'augmentation de l'épaisseur de la membrane augmente aussi sa résistance protonique. En effet, les membranes très fines, sont moins résistantes au passage des protons, ce qui améliore les performances des cellules.



**Fig. III.6** La variation de la tension dans la cellule en fonction de l'épaisseur de la membrane



***CONCLUSION GENERAL***

## Conclusion générale

Dans ce travail, nous avons effectué la modélisation et plusieurs simulations afin de mieux comprendre le comportement et ainsi les mécanismes qui règnent à l'intérieur des piles à combustible PEMFC. Nous avons présenté un modèle semi empirique permettant d'étudier l'influence de quelques paramètres sur le comportement de la pile. Les résultats de simulation ont montré que les performances de la pile sont améliorées si la pile fonctionne à une température élevée. Aussi les performances électriques s'améliorent en diminuant les différentes pertes. En effet, les pertes ohmiques peuvent être réduites en augmentant l'hydratation de la membrane.

L'épaisseur de la membrane joue un rôle très important, les résultats de simulation ont bien montré que les performances de la pile sont nettement améliorées si on utilise des membranes à faible épaisseur. De l'autre côté, les membranes très fines, sont moins résistantes au passage des protons, pour cela il faut utiliser des épaisseurs optimales.

L'augmentation des pressions des gaz  $H_2$  et  $O_2$  résulte à une amélioration importante des performances de la pile. Cette augmentation augmente la tension et diminue généralement les pertes d'activation, c'est-à-dire il y a une amélioration dans la diffusion des gaz sur les surfaces des électrodes.

Les deux paramètres de perte d'activation,  $\gamma$  et  $i_0$  sont importants dans la conception et design des piles à combustible.

## REFERENCES

- [1] : Idris SADLI, modélisation par impédance d'une pile à combustible PEM pour utilisation en électronique de puissance, en Thèse de doctorat de l'inpl, Institut National Polytechnique de Lorraine,10-12-2006.
- [2] : Jean Paul M'BATNA, Contribution à la modélisation tridimensionnelle du comportement thermo fluidique d'une cellule de pile à combustible à membrane échangeuse de protons **pour obtenir le grade de** DOCTEUR de l'Université de Technologie de Belfort-Montbéliard et de l'Université de Franche-Comté ,le 26 juin 2009.
- [3] :<http://www.beaconsulting.com>, [http :Aparcu](http://Aparcu) général sur les technologies de piles à combustible,28, 2006.
- [4] : AFHYPAC - T . Alleau, la pile PAFC, Mémento de l'Hydrogène, 2-04-2012.
- [5] : Jean Paul M'BATNA , Contribution à la modélisation tridimensionnelle du comportement thermo fluidique d'une cellule de pile à combustible à membrane échangeuse de protons,Thèse de doctorat de Université de Technologie de Belfort-Montbéliard , 9-12-2009.
- [6] : J.C.Amphlett,R.F.Mann,B.A.Peppley,P.R.Roberge ,A.Rodrigues,A model predicting transient responses of proton exchange membrane fuel cells, journal of power sources 61,184,1996.
- [7] : Abdellah Beicha, Radia Zaamouche, Electrochemical model for proton exchange membrane fuel cell system, Journal of power Technologies 93(1),29-32,2013.
- [8] :Z.Belkhiri, H.Zerwal ,N.saidani et H,Ben Moussa,A two-dimensional analyses of mass transport in proton exchange membrane fuel cells : Influence of porosity and permeability,International Journal of chemical and Environmental Engineering,Vol:2 No:6,2011.
- [9] :T.E.spriner,T.A.Zawadzinki,S.Gottesfeld,Polymer electrolyte fuel cell model,Journal of the Electrochemical Society,138(8),2334-2342,1991.



**ANNEXE**

## I. Influence de la température de fonctionnement sur les pertes ohmiques (polarisation ohmique)

➤ En utilisant le langage Matlab, nous obtenons :

```
T=298.15
PH2=1
PO2=2
E=1.229-0.85*10^(-3)*(T-298.15)+4.31*10^(-5)*T*(log(PH2)+(log(PO2)/2))

i=[0.00001, 1*10^-4, 4*10^-4, 6.5*10^-3,16*10^-3, 21*10^-3,23*10^-3]
i_pt_018=[ 0.5*10^-3,2.5*10^-3, 5*10^-3, 7.5*10^-3,10*10^-3]

v_pt_038=[1.03      0.84      0.75      0.69      0.63
0.57  0.54]
%v_pt_040=[ 0.8      0.75      0.68      0.56      0.52]
%v_pt_018=[ 0.8      0.58      0.42  0.3  0.23]

v=v_pt_038
%i=i_pt_018

N=length(v)
sigma=5
ld=350*10^(-6)*100
rel=2*ld/sigma
lm=117*10^(-6)*100
phi=0.8
lamda=0.043+17.8*phi-39.8*phi^2+36.0*phi^3
rion=lm*(181.6*(1+0.03.*i+0.062*((T/303)^2)*i.^2.5))/((lamda-0.634-
3.*i)*exp(4.18*(T-303)/T))
R=8.31
F=96486.7
Vohmic =i.*(rion + rel)
A=-(R*T)/(2*F)
Y=(v-E+Vohmic)/A
coeff=polyfit(log(i),Y,1)
alpha=1/coeff(1)
i0=exp(-coeff(2)*alpha)
%write(alpha," ",i0)

i_data=i
```



```

i_simu=0.00001:0.0001:23*10^-3
phi=0.8
lamda=0.043+17.8*phi-39.8*phi^2+36.0*phi^3
rion=lm*(181.6*(1+0.03.*i_simu+0.062*((T/303)^2)*i_simu.^2.5))/((lamda-
0.634-3.*i_simu)*exp(4.18*(T-303)/T))
Vohmic1 =i_simu.*(rion + rel)
%plot(i_data,v,"+b",i_simu,Vcell,"b")
plot(i_simu,Vohmic1,'-r')
hold on

T=310
phi=0.8
lamda=0.043+17.8*phi-39.8*phi^2+36.0*phi^3
rion=lm*(181.6*(1+0.03.*i_simu+0.062*((T/303)^2)*i_simu.^2.5))/((lamda-
0.634-3.*i_simu)*exp(4.18*(T-303)/T))
Vohmic2 =i_simu.*(rion + rel)
plot(i_simu,Vohmic2,':b')

T=375
phi=0.8
lamda=0.043+17.8*phi-39.8*phi^2+36.0*phi^3
rion=lm*(181.6*(1+0.03.*i_simu+0.062*((T/303)^2)*i_simu.^2.5))/((lamda-
0.634-3.*i_simu)*exp(4.18*(T-303)/T))
Vohmic3 =i_simu.*(rion + rel)
plot(i_simu,Vohmic3,'--g')
hold off

```

➤ En utilisant le langage Matlab, nous obtenons :

T1=298.15

PH2=1

PO2=2



```
E1=1.229-0.85*10^(-3)*(T1-298.15)+4.31*10^(-5)*T1*(log(PH2)+(log(PO2)/2))
```

```
i=[0.00001, 1*10^-4, 4*10^-4, 6.5*10^-3,16*10^-3, 21*10^-3,23*10^-3]
```

```
i_pt_018=[ 0.5*10^-3,2.5*10^-3, 5*10^-3, 7.5*10^-3,10*10^-3]
```

```
v_pt_038=[1.03 0.84 0.75 0.69 0.63
0.57 0.54]
```

```
%v_pt_040=[ 0.8 0.75 0.68 0.56
0.52]
```

```
%v_pt_018=[ 0.8 0.58 0.42 0.3 0.23]
```

```
v=v_pt_038
```

```
%i=i_pt_018
```

```
N=length(v)
```

```
sigma=5
```

```
ld=350*10^(-6)*100
```

```
rel=2*ld/sigma
```

```
lm=117*10^(-6)*100
```

```
phi=0.8
```

```
lamda=0.043+17.8*phi-39.8*phi^2+36.0*phi^3
```

```
rion1 =lm*(181.6*(1+0.03.*i+0.062*((T1/303)^2)*i.^2.5))/((lamda-0.634-3.*i)*exp(4.18*(T1-303)/T1))
```

```
R=8.31
```

```
F=96486.7
```

```
Vohmic =i.*(rion1 + rel)
```

```
A=- (R*T1)/(2*F)
```

```
Y=(v-E1+Vohmic)/A
```

```
coeff=polyfit(log(i),Y,1)
```

```
alpha=1/coeff(1)
```

```
i0=exp(-coeff(2)*alpha)
```

```
lm=117*10^(-6)*100
```

```
i_data=i
```

```
i_simu=0.00001:0.0001:23*10^-3
```

```

phi=0.8
lamda=0.043+17.8*phi-39.8*phi^2+36.0*phi^3
rion1=lm*(181.6*(1+0.03.*i_simu+0.062*((T1/303)^2)*i_simu.^2.5))/((1
amda-0.634-3.*i_simu)*exp(4.18*(T1-303)/T1))
Vohmic =i_simu.*(rion1 + rel)
Vact1=(R*T1)/(2*alpha*F)*log(i_simu/i0)
Vcell= E1 -Vohmic-Vact1
plot(i_simu,Vcell,'-b')
hold on

T2=310
lm=300*10^(-6)*100
phi=0.8
lamda=0.043+17.8*phi-39.8*phi^2+36.0*phi^3
rion2 =lm*(181.6*(1+0.03.*i_simu+0.062*((T2/303)^2)*i_simu.^2.5))/((lamda-
0.634-3.*i_simu)*exp(4.18*(T2-303)/T2))
Vohmic =i_simu.*(rion2 + rel)
E2=1.229-0.85*10^(-3)*(T2-253)+4.31*10^(-5)*T2*(log(PH2)+(log(PO2)/2))
Vact2=(R*T2)/(2*alpha*F)*log(i_simu/i0)
Vcell=E2-Vohmic-Vact2
plot(i_simu,Vcell,'--r')

T3=375
lm=300*10^(-6)*100
phi=0.8
lamda=0.043+17.8*phi-39.8*phi^2+36.0*phi^3
rion3 =lm*(181.6*(1+0.03.*i_simu+0.062*((T3/303)^2)*i_simu.^2.5))/((lamda-
0.634-3.*i_simu)*exp(4.18*(T3-303)/T3))
Vohmic =i_simu.*(rion3 + rel)
E3=1.229-0.85*10^(-3)*(T3-253)+4.31*10^(-5)*T3*(log(PH2)+(log(PO2)/2))
Vact3=(R*T3)/(2*alpha*F)*log(i_simu/i0)
Vcell=E3-Vohmic-Vact3
plot(i_simu,Vcell,'--g')
hold off

```



## II. Influence de la pression des gaz H<sub>2</sub> et O<sub>2</sub> :

➤ En utilisant le langage Matlab, nous obtenons :

```
T=298.15
PH2=1
PO2=2
E=1.229-0.85*10^(-3)*(T-298.15)+4.31*10^(-5)*T*(log(PH2)+(log(PO2)/2))

i=[0.00001, 1*10^-4, 4*10^-4, 6.5*10^-3,16*10^-3, 21*10^-3,23*10^-3]
i_pt_018=[ 0.5*10^-3,2.5*10^-3, 5*10^-3, 7.5*10^-3,10*10^-3]

v_pt_038=[1.03    0.84    0.75    0.69    0.63
0.57  0.54]
%v_pt_040=[ 0.8    0.75    0.68    0.56    0.52]
%v_pt_018=[ 0.8    0.58    0.42  0.3  0.23]

v=v_pt_038
%i=i_pt_018

N=length(v)
sigma=5
ld=350*10^(-6)*100
rel=2*ld/sigma
lm=117*10^(-6)*100
phi=0.8
lamda=0.043+17.8*phi-39.8*phi^2+36.0*phi^3
rion=lm*(181.6*(1+0.03.*i+0.062*((T/303)^2)*i.^2.5))/((lamda-0.634-
3.*i)*exp(4.18*(T-303)/T))
R=8.31
F=96486.7
Vohmic =i.*(rion + rel)
A=-(R*T)/(2*F)
Y=(v-E+Vohmic)/A
coeff=polyfit(log(i),Y,1)
alpha=1/coeff(1)
i0=exp(-coeff(2)*alpha)

PH2=1
PO2=2
E=1.229-0.85*10^(-3)*(T-298.15)+4.31*10^(-5)*T*(log(PH2)+(log(PO2)/2))
lm=117*10^(-6)*100
```

```

i_data=i
i_simu=0.00001:0.0001:23*10^-3
phi=0.8
lamda=0.043+17.8*phi-39.8*phi^2+36.0*phi^3
rion=lm*(181.6*(1+0.03.*i_simu+0.062*((T/303)^2)*i_simu.^2.5))/((lamda-
0.634-3.*i_simu)*exp(4.18*(T-303)/T))
Vohmic =i_simu.*(rion + rel)
Vact=(R*T)/(2*alpha*F)*log(i_simu/i0)
Vcell=E-Vohmic-Vact
plot(i_simu,Vcell,'-b')
hold on

T=298.15
PH2=1
PO2=1
E=1.229-0.85*10^(-3)*(T-298.15)+4.31*10^(-5)*T*(log(PH2)+(log(PO2)/2))
lm=117*10^(-6)*100
phi=0.8
lamda=0.043+17.8*phi-39.8*phi^2+36.0*phi^3
rion=lm*(181.6*(1+0.03.*i_simu+0.062*((T/303)^2)*i_simu.^2.5))/((lamda-
0.634-3.*i_simu)*exp(4.18*(T-303)/T))
Vohmic =i_simu.*(rion + rel)
E=1.229-0.85*10^(-3)*(T-298.15)+4.31*10^(-5)*T*(log(PH2)+(log(PO2)/2))
Vact=(R*T)/(2*alpha*F)*log(i_simu/i0)
Vcell=E-Vohmic-Vact
plot(i_simu,Vcell,'--r')

```

➤ En utilisant le langage Matlab, nous obtenons :

```

T=298.15
PH2=2
PO2=1
E=1.229-0.85*10^(-3)*(T-298.15)+4.31*10^(-5)*T*(log(PH2)+(log(PO2)/2))

i=[0.00001, 1*10^-4, 4*10^-4, 6.5*10^-3,16*10^-3, 21*10^-3,23*10^-3]
i_pt_018=[ 0.5*10^-3,2.5*10^-3, 5*10^-3, 7.5*10^-3,10*10^-3]

v_pt_038=[1.03    0.84    0.75    0.69    0.63
0.57  0.54]
%v_pt_040=[ 0.8    0.75    0.68    0.56    0.52]
%v_pt_018=[ 0.8    0.58    0.42  0.3  0.23]

```

```

v=v_pt_038
%i=i_pt_018

N=length(v)
sigma=5
ld=350*10^(-6)*100
rel=2*ld/sigma
lm=117*10^(-6)*100
phi=0.8
lamda=0.043+17.8*phi-39.8*phi^2+36.0*phi^3
rion=lm*(181.6*(1+0.03.*i+0.062*((T/303)^2)*i.^2.5))/((lamda-0.634-
3.*i)*exp(4.18*(T-303)/T))
R=8.31
F=96486.7
Vohmic =i.*(rion + rel)
A=-(R*T)/(2*F)
Y=(v-E+Vohmic)/A
coeff=polyfit(log(i),Y,1)
alpha=1/coeff(1)
i0=exp(-coeff(2)*alpha)

PH2=2
PO2=1
E=1.229-0.85*10^(-3)*(T-298.15)+4.31*10^(-5)*T*(log(PH2)+(log(PO2)/2))
lm=117*10^(-6)*100
i_data=i
i_simu=0.00001:0.0001:23*10^-3
phi=0.8
lamda=0.043+17.8*phi-39.8*phi^2+36.0*phi^3
rion=lm*(181.6*(1+0.03.*i_simu+0.062*((T/303)^2)*i_simu.^2.5))/((lamda-
0.634-3.*i_simu)*exp(4.18*(T-303)/T))
Vohmic =i_simu.*(rion + rel)
Vact=(R*T)/(2*alpha*F)*log(i_simu/i0)
Vcell=E-Vohmic-Vact
plot(i_simu,Vcell,'-b')
hold on

T=298.15
PH2=1
PO2=1

```

```

E=1.229-0.85*10^(-3)*(T-298.15)+4.31*10^(-5)*T*(log(PH2)+(log(PO2)/2))
lm=117*10^(-6)*100
phi=0.8
lamda=0.043+17.8*phi-39.8*phi^2+36.0*phi^3
rion=lm*(181.6*(1+0.03.*i_simu+0.062*((T/303)^2)*i_simu.^2.5))/((lamda-
0.634-3.*i_simu)*exp(4.18*(T-303)/T))
Vohmic =i_simu.*(rion + rel)
E=1.229-0.85*10^(-3)*(T-298.15)+4.31*10^(-5)*T*(log(PH2)+(log(PO2)/2))
Vact=(R*T)/(2*alpha*F)*log(i_simu/i0)
Vcell=E-Vohmic-Vact
plot(i_simu,Vcell,'--r')

```

### III. Influence de l'humidité de la membrane

➤ En utilisant le langage Matlab, nous obtenons :

```

T=298.15
PH2=1
PO2=2
E=1.229-0.85*10^(-3)*(T-298.15)+4.31*10^(-5)*T*(log(PH2)+(log(PO2)/2))

i=[0.00001, 1*10^-4, 4*10^-4, 6.5*10^-3,16*10^-3, 21*10^-3,23*10^-3]
i_pt_018=[ 0.5*10^-3,2.5*10^-3, 5*10^-3, 7.5*10^-3,10*10^-3]

v_pt_038=[1.03    0.84    0.75    0.69    0.63
0.57  0.54]
%v_pt_040=[ 0.8    0.75    0.68    0.56    0.52]
%v_pt_018=[ 0.8    0.58    0.42  0.3  0.23]

v=v_pt_038
%i=i_pt_018

N=length(v)
sigma=5
ld=350*10^(-6)*100
rel=2*ld/sigma
lm=117*10^(-6)*100
phi=0.8
lamda=0.043+17.8*phi-39.8*phi^2+36.0*phi^3
rion=lm*(181.6*(1+0.03.*i+0.062*((T/303)^2)*i.^2.5))/((lamda-0.634-
3.*i)*exp(4.18*(T-303)/T))

```

```

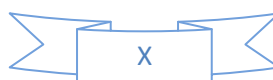
R=8.31
F=96486.7
Vohmic =i.*(rion + rel)
A=-(R*T)/(2*F)
Y=(v-E+Vohmic)/A
coeff=polyfit(log(i),Y,1)
alpha=1/coeff(1)
i0=exp(-coeff(2)*alpha)
%write(alpha," ",i0)

i_data=i
i_simu=0.00001:0.0001:23*10^-3
phi=0.8
lamda=0.043+17.8*phi-39.8*phi^2+36.0*phi^3
rion=lm*(181.6*(1+0.03.*i_simu+0.062*((T/303)^2)*i_simu.^2.5))/((lamda-
0.634-3.*i_simu)*exp(4.18*(T-303)/T))
Vohmic =i_simu.*(rion + rel)
Vact=(R*T)/(2*alpha*F)*log(i_simu/i0)
Vcell=E-Vohmic-Vact
%plot(i_data,v,"+b",i_simu,Vcell,"b")
plot(i_simu,Vcell,'-r')
hold on

T=298.15
phi=0.6
lamda=0.043+17.8*phi-39.8*phi^2+36.0*phi^3
rion=lm*(181.6*(1+0.03.*i_simu+0.062*((T/303)^2)*i_simu.^2.5))/((lamda-
0.634-3.*i_simu)*exp(4.18*(T-303)/T))
Vohmic =i_simu.*(rion + rel)
E=1.229-0.85*10^(-3)*(T-298.15)+4.31*10^(-5)*T*(log(PH2)+(log(PO2)/2))
Vact=(R*T)/(2*alpha*F)*log(i_simu/i0)
Vcell=E-Vohmic-Vact
plot(i_simu,Vcell,':b')

T=298.15
phi=0.4
lamda=0.043+17.8*phi-39.8*phi^2+36.0*phi^3
rion=lm*(181.6*(1+0.03.*i_simu+0.062*((T/303)^2)*i_simu.^2.5))/((lamda-
0.634-3.*i_simu)*exp(4.18*(T-303)/T))
Vohmic =i_simu.*(rion + rel)
E=1.229-0.85*10^(-3)*(T-298.15)+4.31*10^(-5)*T*(log(PH2)+(log(PO2)/2))
Vact=(R*T)/(2*alpha*F)*log(i_simu/i0)

```



```
Vcell=E-Vohmic-Vact
plot(i_simu,Vcell,'--g')
```

#### IV. Influence de l'épaisseur de la membrane

➤ En utilisant le langage Matlab, nous obtenons :

```
lm=117*10T=298.15
PH2=1
PO2=2
E=1.229-0.85*10^(-3)*(T-298.15)+4.31*10^(-5)*T*(log(PH2)+(log(PO2)/2))

i=[0.00001, 1*10^-4, 4*10^-4, 6.5*10^-3,16*10^-3, 21*10^-3,23*10^-3]
i_pt_018=[ 0.5*10^-3,2.5*10^-3, 5*10^-3, 7.5*10^-3,10*10^-3]

v_pt_038=[1.03 0.84 0.75 0.69 0.63
0.57 0.54]
%v_pt_040=[ 0.8 0.75 0.68 0.56 0.52]
%v_pt_018=[ 0.8 0.58 0.42 0.3 0.23]

v=v_pt_038
%i=i_pt_018

N=length(v)
sigma=5
ld=350*10^(-6)*100
rel=2*ld/sigma
^(-6)*100
phi=0.8
lamda=0.043+17.8*phi-39.8*phi^2+36.0*phi^3
rion=lm*(181.6*(1+0.03.*i+0.062*((T/303)^2)*i.^2.5))/((lamda-0.634-
3.*i)*exp(4.18*(T-303)/T))
R=8.31
F=96486.7
Vohmic =i.*(rion + rel)
A=-(R*T)/(2*F)
Y=(v-E+Vohmic)/A
coeff=polyfit(log(i),Y,1)
alpha=1/coeff(1)
i0=exp(-coeff(2)*alpha)
```

```

lm=117*10^(-6)*100
i_data=i
i_simu=0.00001:0.0001:23*10^-3
phi=0.8
lamda=0.043+17.8*phi-39.8*phi^2+36.0*phi^3
rion=lm*(181.6*(1+0.03.*i_simu+0.062*((T/303)^2)*i_simu.^2.5))/((lamda-
0.634-3.*i_simu)*exp(4.18*(T-303)/T))
Vohmic =i_simu.*(rion + rel)
Vact=(R*T)/(2*alpha*F)*log(i_simu/i0)
Vcell=E-Vohmic-Vact
plot(i_simu,Vcell,'-b')
hold on
T=298.15
lm=300*10^(-6)*100
phi=0.8
lamda=0.043+17.8*phi-39.8*phi^2+36.0*phi^3
rion=lm*(181.6*(1+0.03.*i_simu+0.062*((T/303)^2)*i_simu.^2.5))/((lamda-
0.634-3.*i_simu)*exp(4.18*(T-303)/T))
Vohmic =i_simu.*(rion + rel)
E=1.229-0.85*10^(-3)*(T-298.15)+4.31*10^(-5)*T*(log(PH2)+(log(PO2)/2))
Vact=(R*T)/(2*alpha*F)*log(i_simu/i0)
Vcell=E-Vohmic-Vact
plot(i_simu,Vcell,'--r')

```