



# Modélisation et émulation 3D orienté temps réel de la diffusion de réactifs dans une pile à combustible à membrane échangeuse de protons

Pierre Massonnat, Fei Gao, Damien Paire, David Bouquain, Abdellatif Miraoui

## ► To cite this version:

Pierre Massonnat, Fei Gao, Damien Paire, David Bouquain, Abdellatif Miraoui. Modélisation et émulation 3D orienté temps réel de la diffusion de réactifs dans une pile à combustible à membrane échangeuse de protons. Symposium de Génie Électrique 2014, Jul 2014, Cachan, France. <hal-01065240>

**HAL Id: hal-01065240**

**<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01065240>**

Submitted on 18 Sep 2014

**HAL** is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



# Modélisation et émulation 3D orienté temps réel de la diffusion de réactifs dans une pile à combustible à membrane échangeuse de protons

Pierre Massonnat, Fei Gao, Damien Paire, David Bouquain, Abdelatif Miraoui

UTBM – Université de technologique de Belfort-Montbéliard  
IRTES-SET – Institut de Recherche sur les Transports, l’Energie et la Société

**RESUME** – Le but de ce travail est de donner la répartition des concentrations de gaz dans une pile à combustible à membrane échangeuse de proton en temps réel pour faire du diagnostic en ligne. C’est un modèle dynamique, ce qui permet de prévoir le comportement de la pile suite à une variation brutale de courant au niveau de la diffusion des réactifs. Comme ce modèle doit donner des résultats sur plusieurs dimensions et que les phénomènes se modélisent bien avec des équations aux dérivées partielles, la méthode utilisée pour le calcul sera une méthode de discrétisation. Enfin, le modèle doit être conçu de manière à nécessiter peu de calculs afin de rendre son utilisation en temps réel possible.

**MOTS-CLES** – Temps réel, Méthodes d’éléments finis, Pile à combustible

## 1 Introduction

La pile à combustible est un convertisseur d’énergie ancien qui a été successivement à la mode puis oublié à plusieurs reprises. En effet, son caractère complexe et multi-physique associé à son coût et aux difficultés liées au stockage de l’hydrogène en fait une technologie qui a du mal à s’industrialiser. Cependant, ce système possède de gros avantages qui le rend régulièrement attractif. Parmi ces avantages, on peut citer son rendement bien supérieur aux machines thermiques de petite taille (moteur embarqué pour les voitures) et le fait que cette technologie rejette de l’eau au lieu du dioxyde de carbone. On espère qu’en continuant à développer cette technologie, elle deviendra un jour suffisamment intéressante pour remplacer les technologies actuelles que l’on sait menacées par des problèmes de ressources.

Pour améliorer ce convertisseur, de nombreux modèles ont été proposés. Un modèle électrochimique est développé dans [Mann et al., 2000] mais ne prend pas en compte la fluidique des réactifs. Un modèle 1D multi-physique a été développé dans [Gao et al., 2011] mais l’absence de plus d’une dimension ne permet pas vraiment de voir le comportement des réactifs dans la pile. D’autres modèles ont été faits en 2D et 3D : [Rao et al., 2007], [Hu et al., 2004], [Meng, 2006] et [Al-Baghdadi, 2008] mais ils ne sont pas en temps réel et ne s’applique souvent qu’à une petite partie de la pile.

C’est pourquoi on propose ce nouveau modèle qui sera exprimé en 3 parties : la première partie expose les équations physiques choisies pour la modélisation et la deuxième partie donnera la procédure numérique pour faire le calcul en temps réel. Enfin, la troisième partie donnera les premiers résultats obtenus avec le programme et expliquera la démarche expérimentale de validation.

## 2 Modélisation physique du système

### 2.1 Le modèle électrochimique

Le modèle électrochimique n’est pas calculé dans l’espace, on reste avec une modélisation 0D car c’est le comportement des réactifs qui nous intéresse ici.

Pour calculer le potentiel, on procède ainsi :

$$U_{cell} = U_{nernst} - U_{act} - R_{mem} \times i \quad (1)$$

Avec  $U_{nernst}$  le potentiel thermodynamique en V,  $U_{act}$  les pertes par activation,  $R_{mem}$  la résistance de la membrane de la pile et  $i$  le courant pris par la charge en A.

Le potentiel thermodynamique est calculé grâce à l'équation de Nernst [Gao et al., 2011] :

$$U_{nernst} = 1.23 - 0.85 \times 10^{-3}(T - 298.15) + 4.3085 \times 10^{-5}T \left( \ln(P_{H_2}) + \frac{1}{2} \ln(P_{O_2}) \right) \quad (2)$$

Où  $P_{H_2}$  et  $P_{O_2}$  sont les pressions respectives moyennes de l'hydrogène et de l'oxygène au niveau des sites de réaction électrochimique.

Les pertes par activation sont calculées avec la loi de Butler-Volmer :

$$i = i_0 \left( \exp\left(\frac{\alpha n F}{RT} U_{act}\right) - \exp\left(\frac{-(1-\alpha)n F}{RT} U_{act}\right) \right) \quad (3)$$

Où  $\alpha$  est un paramètre empirique,  $n$  le nombre d'électrons échangés dans la réaction et  $i_0$  le courant de référence déterminé aussi empiriquement.

La résistivité de la membrane de la pile est calculée avec la loi empirique proposée par Springer et présentée dans les articles suivant [Bao et al., 2005], [Barbir et al., 2005] and [Rowe and Li, 2001] :

$$r_{mem} = \begin{cases} \frac{1}{0.1879} \exp\left(1268 \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{303}\right)\right) & \text{si } \lambda \leq 1 \\ \frac{1}{0.5139\lambda - 0.326} \exp\left(1268 \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{303}\right)\right) & \text{si } \lambda > 1 \end{cases} \quad (4)$$

Où  $\lambda$  est le contenu en eau de la membrane, lui-même calculé avec une autre loi empirique :

$$\lambda = \begin{cases} 0.043 + 17.81a_{mem} - 39.85a_{mem}^2 + 36.0a_{mem}^3 & \text{si } a_{mem} < 1 \\ 14 + 1.4(a_{mem} - 1) & \text{si } a_{mem} \geq 1 \text{ et } a_{mem} < 3 \\ 16.8 & \text{si } a_{mem} \geq 3 \end{cases} \quad (5)$$

Où  $a_{mem}$  est l'activité de l'eau de la membrane. Finalement, la résistance de la membrane est calculé simplement avec :

$$R_{mem} = \frac{r_{mem} \delta_{mem}}{A} \quad (6)$$

Avec  $A$  sa surface et  $\delta_{mem}$  son épaisseur.

## 2.2 Le modèle fluide

Concernant le modèle fluide, on va distinguer son calcul différemment dans deux couches qu'il traverse : les canaux qui transportent le gaz et la couche de diffusion (l'électrode).

### 2.2.1 Pour les canaux

Pour les canaux, on va s'appuyer sur deux lois : la loi de Darcy-Weisbach qui estime les pertes de pression due aux frottements dans les canaux :

$$\Delta P = f_D \frac{L}{D_h} \rho \frac{u^2}{2} \quad (7)$$

Avec  $f_D$  qui est estimé par la loi de Hagen-Poiseuille :

$$f_D = \frac{64}{Re} \quad (8)$$

Où  $Re$  est le nombre de Reynolds.

La loi est linéarisée avec l'hypothèse de flux laminaire utilisée dans le modèle [Gao et al., 2011] :

$$\Delta P = \left( \frac{32\mu L}{DD_h} \right) u \quad (9)$$

Où  $\Delta P$  est la perte de pression,  $\mu$  est la viscosité dynamique du réactif considéré,  $D$  le diamètre du canal,  $D_h$  son diamètre hydraulique et  $L$  sa longueur.

Pour que le système soit isostatique, on ajoute une simple loi de conservation d'espèces chimiques :

$$\frac{\partial N_i}{\partial x} + \frac{\partial N_i}{\partial y} + N_i^{GDL} = 0 \quad (10)$$

Où  $N_i$  représente le flux molaire de l'espèce  $i$  par unité de surface et  $N_i^{GDL}$  le flux passant par la couche de diffusion.

### 2.2.2 Pour la couche de diffusion

Pour la couche de diffusion, on va considérer deux autres phénomènes : la diffusion des réactifs parmi les autres gaz qui stagnent dans la couche de diffusion (de l'eau et de l'azote si on utilise de l'air comme réactif) et la chute de pression due à la réaction électrochimique.

Pour calculer la diffusion, on va utiliser la lois de Fick :

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = -D_i \left( S_x \frac{\partial N_i}{\partial x} + S_y \frac{\partial N_i}{\partial y} + S_z \frac{\partial N_i}{\partial z} \right) \quad (11)$$

Où  $C_i$  est la concentration de l'espèce  $i$ ,  $D_i$  le coefficient de diffusion et  $S$  la surface.

Le coefficient  $D_i$  est propre aux gaz en présence mais on devra lui appliquer la correction de Bruggemann :

$$D_i = D_i \times (\epsilon)^\tau \quad (12)$$

Où  $\tau$  est une grandeur empirique appelé la tortuosité et  $\epsilon$  la porosité de la couche de diffusion.

## 3 La procédure de calcul

### 3.1 Le programme

Le programme d'émulation est entièrement programmé en langage C de façon à être rapide et à pouvoir être implanté dans un éventuel microcontrôleur pour faire du calcul embarqué. Il y a deux types de procédés de calcul significatif qu'il convient de donner.

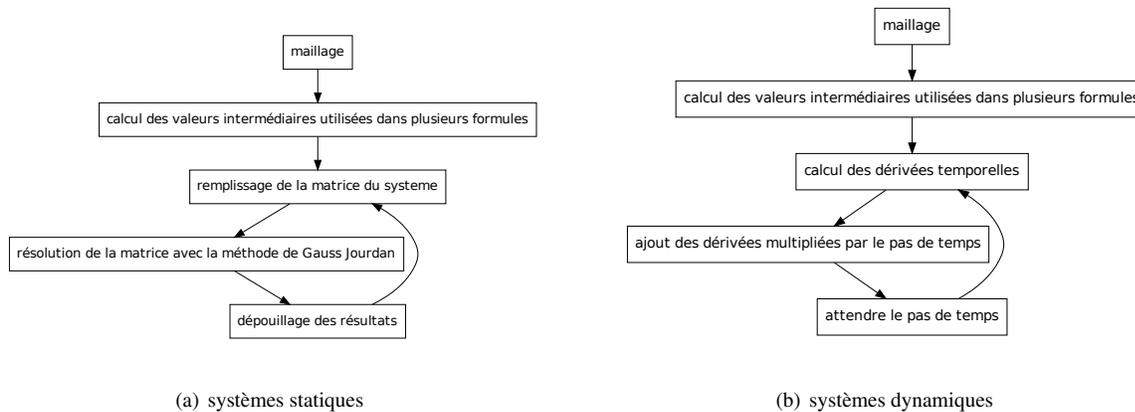


FIGURE 1 – Procédures de calcul pour les systèmes statiques et dynamiques

Dans la figure 1(a) on a la procédure de calcul lorsque du calcul statique est effectué et dans la figure 1(b) lorsque c'est du calcul dynamique.

### 3.2 L'architecture générale

On prévoit de calculer la partie canaux et la partie couche de diffusion dans deux tâches séparées. La figure 2(a) donne la procédure de calcul statique pour les canaux. La figure 2(b) donne le calcul dynamique où calcule en statique les pertes de pression dues à la réaction électrochimique et en dynamique la diffusion.

## 4 Préliminaire du projet

Le calcul statique dans les canaux a déjà été programmé, en voici quelques résultats dans la figure 4.

Pour valider le modèle, on dispose d'un banc d'essais avec une pile à combustible PEM : La pile Nexa de l'entreprise Ballard. La validation expérimentale du modèle et d'autres résultats de simulation seront inclu dans l'article final.

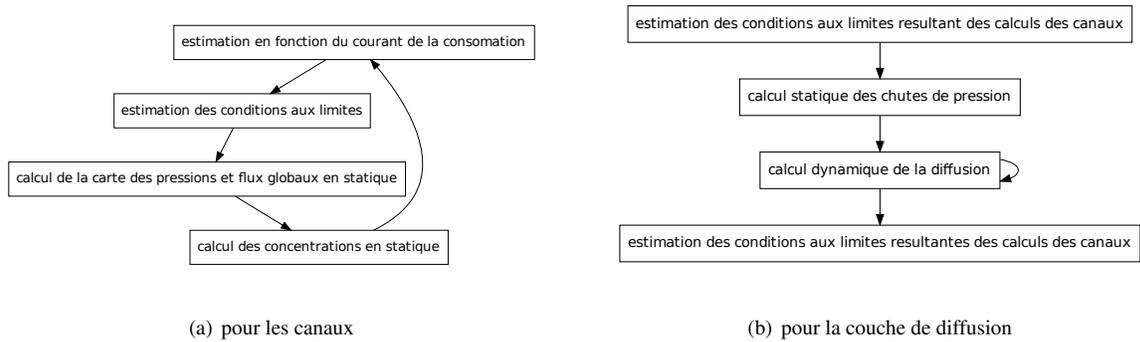


FIGURE 2 – Procédure de calcul pour les canaux et pour la couche de diffusion

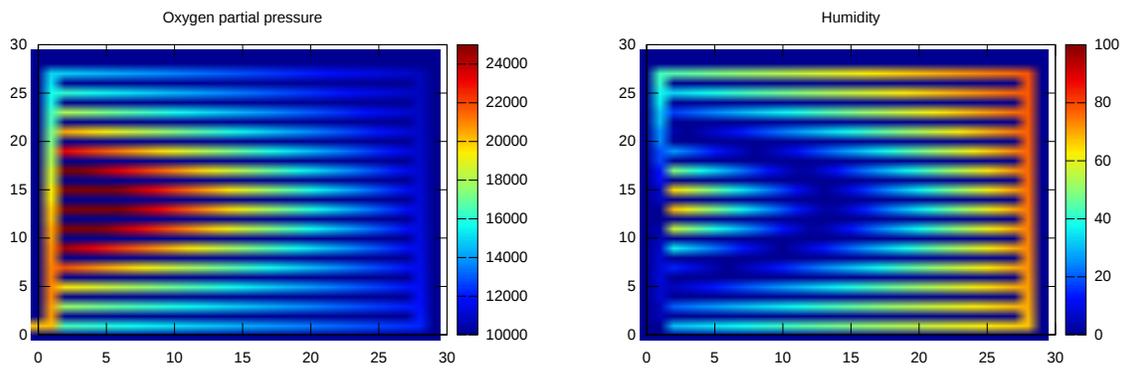


FIGURE 3 – Résultats dans les canaux (la carte des pressions partielles de l'oxygène en Pa et de l'humidité en pourcentage)

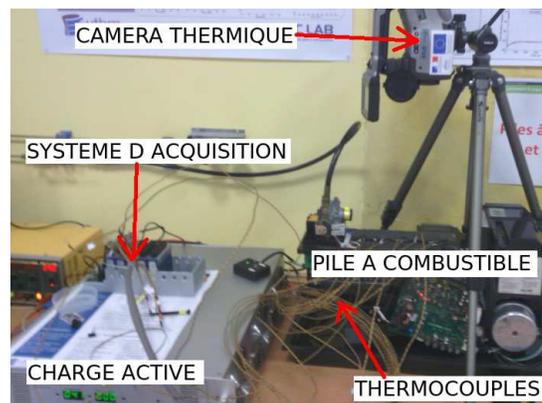


FIGURE 4 – Photo du banc de la pile Ballard Nexa

## 5 Conclusion

Afin de créer un modèle de pile à combustible en temps réel à plusieurs dimensions, des choix sont faits pour avoir un système qui reste suffisamment rapide. Seule la partie fluide de la physique est modélisée et seul le phénomène de diffusion est gardé en dynamique à cause de son caractère lent face aux autres phénomènes. La programmation de la partie où on calcule le phénomène de diffusion est en phase finale de la modélisation, une étude de vitesse de calcul et de consommation de mémoire sera faite à la fin de la programmation du modèle qui à l'heure actuelle, sans sa dernière partie tourne à une itération pour environ 100ms. La validation expérimental du modèle entier sera présente dans l'article final. Ce modèle pourra par la suite être incorporé dans un contrôleur lambda qui devra être capable de faire du diagnostique en ligne.

## Références

- [Al-Baghdadi, 2008] Al-Baghdadi, M. A. R. S. (2008). Three-dimensional computational fluid dynamics model of a tubular-shaped pem fuel cell. *Renewable Energy*, 33 :1334–1345.
- [Bao et al., 2005] Bao, C., Ouyang, M., and Yi, B. (2005). Modeling and control of air stream and hydrogen flow with recirculation in a pem fuel cell system-i. control-oriented modeling. *International Journal of Hydrogen Energy*, 141 :96–101.
- [Barbir et al., 2005] Barbir, F., Gorgun, H., and Wang, X. (2005). Relationship between pressure drop and cell resistance as a diagnostic tool for pem fuel cells. *Journal of Power Sources*, 141 :96–101.
- [Gao et al., 2011] Gao, F., Blunier, B., and Miraoui, A. (2011). *Modelisation de piles à combustible à membrane échangeuse de protons*. Kermes Science.
- [Hu et al., 2004] Hu, M., Gu, A., Wang, M., Zhu, X., and Yu, L. (2004). Three dimensional, two phase flow mathematical model for pem fuel cell : Part i. model development. *Energy Conversion and Management*, 45 :1861–1882.
- [Mann et al., 2000] Mann, R. F., Amphlett, J. C., Hooper, M. A. I., Jensen, H. M., Peppley, B. A., and Roberge, P. R. (2000). Development and application of a generalised steady-state electrochemical model for a pem fuel cell. *Journal of Power Sources*, 86 :173–180.
- [Meng, 2006] Meng, H. (2006). A three-dimensional pem fuel cell model with consistent treatment of water transport in mea. *Journal of Power Sources*, 162 :426–435.
- [Rao et al., 2007] Rao, R. M., Bhattacharyya, D., Rengaswamy, R., and Choudhury, S. (2007). A two-dimensional steady state model including the effect of liquid water for a pem fuel cell cathode. *Journal of Power Sources*, 1 :375–393.
- [Rowe and Li, 2001] Rowe, A. and Li, X. (2001). Mathematical modeling of proton exchange membrane fuel cells. *Journal of Power Sources*, 102 :82–96.