

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE

**MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR
ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE**

MEMOIRE

Présenté

**AU DEPARTEMENT DE MECANIQUE
FACULTE DES SCIENCES DE L'INGENIEUR
UNIVERSITE DE BATNA
Pour l'obtention du diplôme**

**MAGISTERE EN GENIE MECANIQUE
Option : Energétique**

**Par
Mr TAMRABET MONSAF**

**INFLUENCE DES ECOULEMENTS DES GAZ DANS LES CANAUX
SUR LA CONSOMMATION DES REACTIFS DANS UNE PILE À
COMBUSTIBLE DE TYPE PEMFC**

Soutenue publiquement le 07 juillet 2010 devant le jury composé de :

BEN MOUSSA Hocine	Prof., Univ. Batna	Président
ZEROUAL Mostefa	M.C.A., Univ. Batna	Rapporteur
NEMOUCHI Zoubir	Prof., Univ. constantine	Examineur
ZITOUNI Bariza	M.C.A., Univ. Batna	Examineur

« La meilleure preuve de l'existence d'un lien de causalité entre deux phénomènes consiste à montrer que l'apparition de l'un de ces phénomènes permet toujours de prédire à l'avance l'apparition de l'autre »

(Max Planck)

Remerciement

Aucun travail n'est possible dans l'isolement. Les rencontres, les conseils et les encouragements constituent des aides précieuses souvent décisives. C'est pourquoi je tiens à remercier ici tous ceux qui ont contribué à ce travail parfois sans le savoir ou du moins sans mesurer la portée de leur influence.

Je souhaite d'abord remercier le Docteur ZEROUAL Mostefa, de l'université de Batna, du sujet qu'il m'a proposé et d'avoir ainsi bien voulu partager avec moi sa passion pour la recherche. La rigueur du raisonnement, le refus de toute idée préconçue, la remise en question perpétuelle même de ce qui semble établi, demeure à mes yeux les points forts de son enseignement et de ses directions de recherche.

Je remercie le Professeur BEN MOUSSA Hocine, de l'université de Batna, de m'avoir fait l'honneur de présider le jury. Je lui remercie aussi pour ses orientations et ses conseils durant toute la réalisation de ce mémoire.

Je tiens à remercier :

Le Professeur NEMOUCHI Zoubir, de l'université de Constantine, et le Docteur ZITOUNI Bariza, de l'université de Batna, qui ont accepté de juger ce travail.

Je remercie tous mes enseignants qui ont contribué à ma formation depuis mes premiers jours à l'école jusqu'aujourd'hui.

Je remercie également tous ceux qui m'ont aidé de près ou de loin à réaliser ce modeste travail.

Monsaf.

DEDICACE

*Je dédie ce modeste travail aux deux êtres qui me
sont les plus chères au monde : mon père et ma
mère, que dieu me les garde pour toujours*

(inchallah).

A mes frères et sœurs.

*A toute la famille du Département de
Mécanique.*

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

Nomenclature

Symbole	Description	Unité
x	Cordonnée de la direction longitudinale	(m)
y	Cordonnée de la direction transversale	(m)
z	Cordonnée de la direction verticale	(m)
x*	Cordonnée adimensionnelle de la direction longitudinale	-
Y*	Cordonnée adimensionnelle de la direction transversale	-
Z*	Cordonnée adimensionnelle de la direction verticale	-
U	vitesse selon la direction longitudinale	(m/s)
V	vitesse selon la direction transversale	(m/s)
W	vitesse selon la direction verticale	(m/s)
U*	vitesse adimensionnelle selon la direction longitudinale	-
V*	vitesse adimensionnelle selon la direction transversale	-
W*	vitesse adimensionnelle selon la direction verticale	-
U_{∞}	Vitesse de référence	(m/s)
h	hauteur du canal (longueur caractéristique)	(m)
t	Temps	(s)
t*	Temps de référence	-
F	Nombre de faraday	(C/mole)
n	Nombre d'électrons transférer	
C_k	Concentration de l'espèce k (hydrogène, oxygéné, eau)	(mole/m ³)
C_{ref}	Concentration de référence	(mole/m ³)
C*	Concentration adimensionnelle	-
Re	Nombre de Reynolds	-
Sc	Nombre de Schmidt	-
Da	Nombre de Darcy	-
Pe	Nombre de Peclet	-
J	Densité de courant volumique	(A/m ³)
\bar{J}	Densité de courant volumique moyenne	(A/m ³)
$a_{j_0}^{ref}$	Densité de courant volumique référentielle	(A/m ³)
P	Pression	(N/ m ²)
D_k	Coefficient de diffusion de l'espèce k	(m ² /s)
K	perméabilité	(m ²)

R	Constants des gaz parfaits	(J/mole.K)
T	Température de fonctionnement	(K)
S_k	Terme source de l'espèce k	(mole/m ³ s)
ρ	Masse volumique	(Kg/m ³)
ε	porosité	-
η_c	Surtension d'activation de la cathode	(V)
α_c^a	Coefficient de transfert de Charge du côté anodique	-
α_c^c	Coefficient de transfert de Charge du côté cathodique	-
μ	Viscosité dynamique	(kg/m.s)

Abréviation	Signification
GDL	Couche de diffusion des gaz
MEA	Cœur de la cellule
PEMFC	Pile à combustible à membrane échangeuse de protons
pdc	Paramètre de diffusion de catalyseur

sommaire	page
Introduction générale	1
Chapitre 1 : pile à combustible à membrane échangeuse de proton	
1.1. Introduction	3
1.2. Pile à Combustible PEMFC	4
1.3. Principe de fonctionnement du PEMFC	5
1.4. Structure de la pile à combustible PEMFC	6
1.4.1 Électrolyte	7
1.4.2 Couche Active (catalyseur).....	7
1.4.3 Couche de diffusion	8
1.4.4 Plaques Bipolaires	8
1.5. Géométrie des Canaux	8
1.6. Performance	12
Chapitre 2 : recherche bibliographique	
2.1. Introduction	14
2.2. Modèles partiels	14
2.3. Modèles complets	19
Chapitre 3: étude numérique	
3.1. Introduction	25
3.2. Domaine de calcul	25
3.3. Hypothèses	27
3.4. Modèle mathématique	27
3.5. Équation de pression	32
3.6. Conditions initiales et aux limites	35
3.7. Résolution des équations	36
3.7.1. Principe de la méthode des volumes finis	36
3.7.2. Application à l'intégration d'une équation de transport-diffusion ...	37
3.7.3. Discrétisation des différents termes de l'équation de transport- diffusion	38
3.7.4. Discrétisation de l'équation de pression	41
3.7.5. Résolution du système d'équations	40
Chapitre 4: Résultats et discussions	
4.1. Introduction	45
4.2. Distribution des vitesses	45

4.3. Distribution d'hydrogène	50
4.4. Distribution d'oxygène	62
4.5. Distribution d'eau	69
4.6. Distribution de densité de courant	74
Conclusions et perspectives	79
Bibliographie	81

Introduction

Une pile à combustible à membrane échangeuse de protons (PEMFC) se compose d'une anode, d'une cathode, de deux plaques bipolaires, de deux catalyseurs et d'une membrane. L'hydrogène et l'oxygène doivent être transportés, comme réactifs, aux couches de catalyseur d'anode et de cathode par les canaux d'écoulement et les couches de diffusion des gaz (GDL), tandis que l'eau produite des réactions électrochimiques au niveau du catalyseur doit être transportée aux canaux d'écoulement à travers la GDL. La membrane de polymère doit être hydratée pour assurer la conductivité élevée des protons. Une interface triple (gaz, liquide et solide) dans les couches de catalyseur est nécessaire pour assurer, des flux élevés de réactif gazeux et de protons, ainsi que de faibles pertes ohmiques et ioniques. Les couches de diffusion doivent avoir assez de pores pour transporter les réactifs gazeux des canaux aux couches de catalyseur et emporter efficacement l'eau excessive du catalyseur aux canaux. Les canaux d'écoulement doivent avoir une forme et des dimensions de telle sorte que la consommation des réactifs soit maximale et uniforme.

Comme l'écoulement des gaz dans les canaux a une grande influence sur les performances des piles à combustible à membrane échangeuse de protons (PEMFC), l'objectif de ce mémoire est de réaliser une modélisation numérique, tridimensionnelle, transitoire du transfert de masse et d'étudier l'influence de la vitesse d'écoulement des gaz dans les canaux ainsi que leur forme géométrique sur la consommation des réactifs.

Après l'introduction, un premier chapitre sur les généralités introduira un rappel sur certaines notions de bases des piles à combustible.

Dans le deuxième chapitre une étude bibliographique concernant l'influence des écoulements dans les canaux sur les performances des piles à combustible à membrane échangeuse de protons (PEMFC) est faite.

Le troisième chapitre est consacré à la modélisation du problème, et à la résolution numérique des équations gouvernantes.

Enfin, la présentation des résultats et leur analyse est faite au quatrième chapitre. Le mémoire se termine par une conclusion générale et des perspectives.

CHAPITRE 1

PILE A COMBUSTIBLE A MEMBRANE ECHANGEUSE DE PROTONS

1.1. INTRODUCTION

Une pile à combustible (PAC) est un dispositif électrochimique qui convertit l'énergie chimique d'une réaction directement en énergie électrique. Elle est intéressante non seulement par son rendement plus élevé par rapport aux conversions thermiques traditionnelles (moteur à combustion interne, turbine) mais encore par son faible impact environnemental.

Une pile à combustible se compose de deux électrodes poreuses (anode et cathode) séparées par un électrolyte permettant un transfert d'ions entre les électrodes. L'anode est alimentée par un combustible gazeux (Hydrogène) et la cathode est alimentée par un oxydant (en général, l'oxygène de l'air). A l'anode, le carburant se dissocie en ions et en électrons. Les électrons passent par le circuit externe pour fournir le courant électrique tandis que les ions se déplacent par l'électrolyte vers l'électrode opposée, selon la nature de l'électrolyte. La chaleur et l'eau sont obtenues grâce aux différentes réactions produites aux électrodes. Puisqu'une cellule produit approximativement un volt ($\approx 1\text{v}$) au chargement complet, les cellules sont empilées en série pour produire des tensions utilisables.

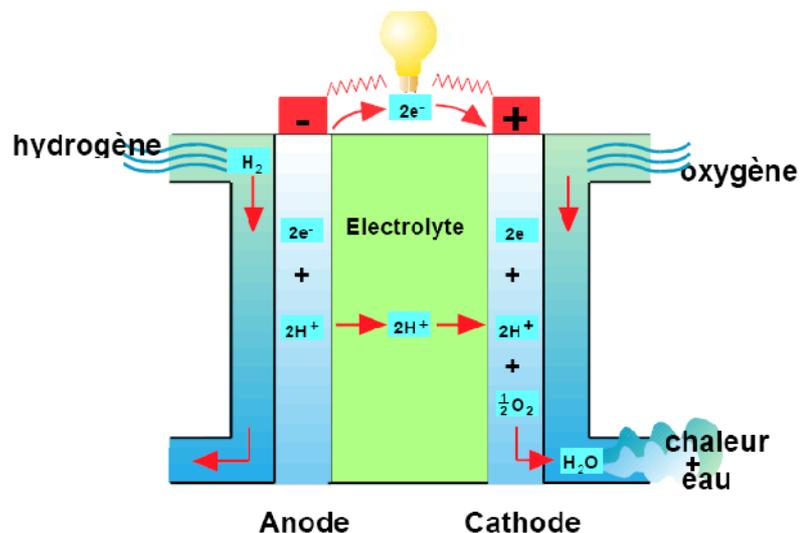


Figure. 1.1: Pile à combustible

Il existe différents types de piles qui se différencient généralement selon la nature de leur électrolyte. Une exception dans cette classification est la pile de type DMFC (Direct Methanol Fuel Cell) qui est en fait une PEMFC (Proton Exchange Membrane Fuel Cell), mais utilisant comme carburant du méthanol qui est directement envoyé à l'anode. Une autre caractéristique utilisée pour classer les piles est leur température de fonctionnement. On distingue en effet les piles qui fonctionnent à basses températures (jusqu'à 250°C) :

PEMFC : Proton Exchange Membrane Fuel Cell

DMFC : Direct Methanol Fuel Cell

AFC : Alkaline Fuel Cell

et PAFC : Phosphoric Acid fuel Cell

et celles qui fonctionnent à hautes températures (entre 600 et 1000°C):

SOFC : Solid Oxide Fuel Cell

et MOFC : Molten Fuel Cell.

En générale, les piles à combustible exigent un environnement complexe : divers composants étant nécessaires pour, conditionner les réactifs, extraire les produits, stocker et transformer l'électricité produite, et conditionner la pile thermiquement ; l'ensemble constitue ce qu'on appelle un système de piles à combustible. Tous les accessoires interviennent dans le bilan énergétique, et comme généralement ils sont des consommateurs, leur intégration dans le calcul du rendement électrique global du système conduit parfois à observer des performances décevantes. L'étude détaillée de certains composants d'un système de production électrique à pile à combustible constitue souvent un sujet de recherche à part entière : notamment c'est le cas des compresseurs, des humidificateurs, des convertisseurs électriques, des reformeurs pour la production de l'hydrogène ou des moyens de son stockage.

1.2. Pile à Combustible PEMFC

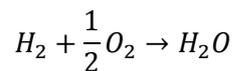
La pile du type PEMFC présente plusieurs avantages par rapport aux autres types de pile: sa basse température de fonctionnement (80-90°C), sa densité de puissance relativement élevée (1.3 kw/l de combustible) [1], sa taille est relativement réduite, son temps de démarrage est relativement court et elle présente un intérêt potentiel dans de multiples applications. La technologie PEMFC concentre actuellement le plus gros effort de recherche et de développement dans le monde. Les objectifs sont d'améliorer les performances, le

rendement, la fiabilité, la durée de vie, et de diminuer le coût des composants qui contiennent des métaux précieux. Le choix s'est porté sur cette technologie pour plusieurs raisons [2] :

- La densité de puissance des PEMFC est élevée ($1\text{W}/\text{cm}^2$);
- le rendement peut aller jusqu'à 60% pour la pile et à 40% pour le système;
- Leur basse température de fonctionnement ($<100^\circ\text{C}$) laisse envisager une technologie simplifiée pour assurer un démarrage rapide ;
- Elles sont insensibles à la présence de CO_2 dans l'air contrairement à la filière alcaline ;
- L'électrolyte est solide, ce qui présente l'avantage de l'absence du liquide corrosif, donc on peut envisager une durée de vie sensiblement supérieure aux filières à électrolyte liquide.

1.3. Principe de fonctionnement d'une PEMFC

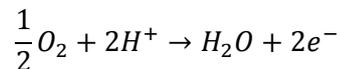
Il s'agit d'une combustion électrochimique d'hydrogène et d'oxygène, avec production simultanée, d'électricité, d'eau et de chaleur (figure1.2), selon la réaction chimique de fonctionnement de la pile :



L'hydrogène H_2 est amené sur l'anode. Il se transforme en ions H^+ et libère des électrons qui seront captés par l'anode :



Les protons H^+ arrivent sur la cathode où ils se combinent aux ions O_2 constitués à partir de l'oxygène de l'air, pour former de l'eau :



Le transfert des protons H^+ et des électrons vers la cathode produit un courant électrique continu. Cependant la tension ne dépasse pas 1 V par cellule ; il faut donc utiliser un grand nombre de cellules en série pour obtenir la tension requise (figure1.3).

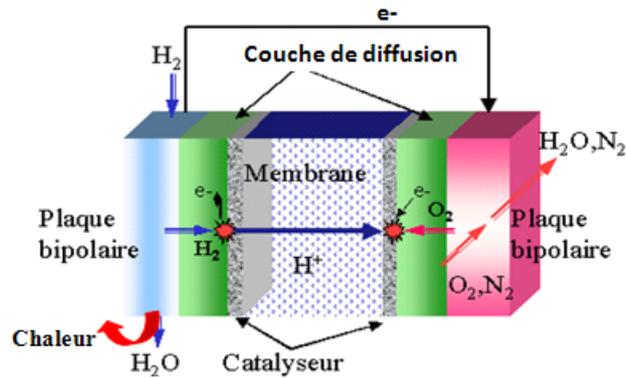


Figure. 1.2 : Schéma de Principe de la cellule d'une Pile à Combustible PEMFC.

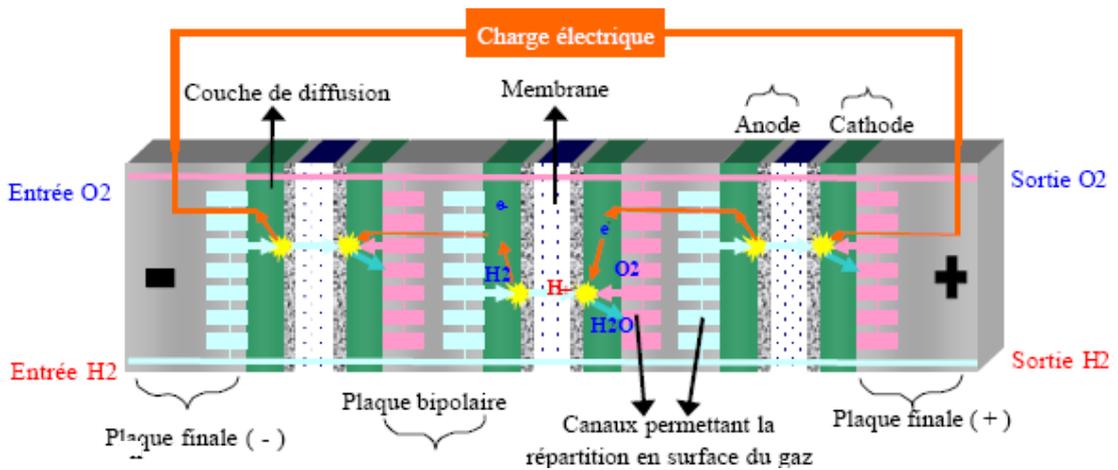


Figure. 1.3: Empilement des Cellules PEMFC

1.4. Structure de la pile à combustible PEMFC

La cellule de type PEMFC est constituée d'une membrane (l'électrolyte), de deux électrodes (catalyseurs), de deux couches de diffusion et deux plaques bipolaires.

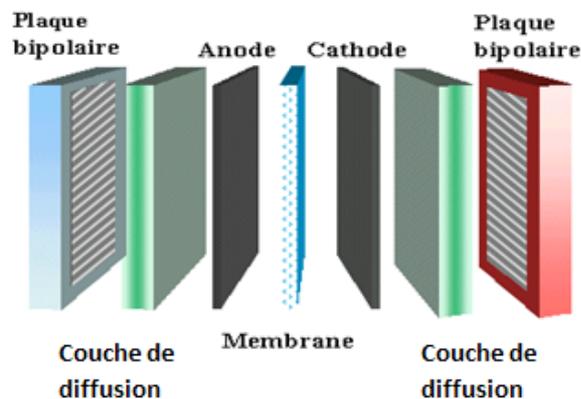


Figure. 1.4: Composants d'une cellule PEMFC

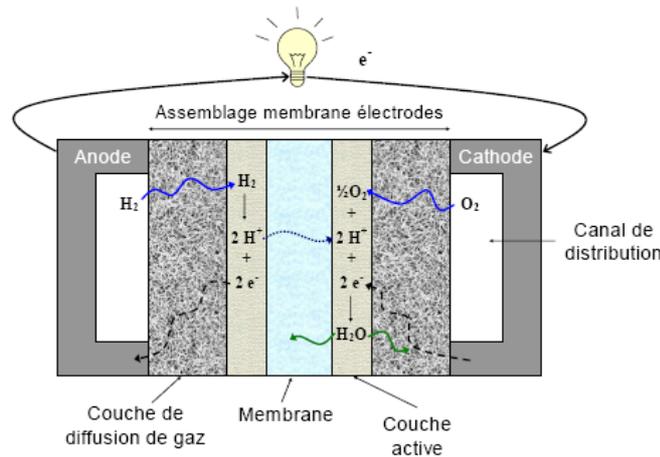


Figure. 1. 5: structure d'une cellule PEMFC

1.4.1. Électrolyte

Un électrolyte est une substance qui permet la dissociation d'un élément en ions chargés négativement et positivement. Le développement de ce composant, membrane conductrice de protons, a été l'élément clef de la percée des piles PEMFC à partir des années quatre-vingt. Plusieurs propriétés sont demandées à ces polymères:

- une conductivité protonique plus élevée que possible, afin de limiter les pertes associées à la chute de tension due à la résistance interne;
- une étanchéité suffisante pour empêcher le mélange des réactifs.

Les membranes répondant aujourd'hui à ces spécificités sont composées de macromolécules perfluorées contenant des fonctions acides SO_3H^+ dont la dissociation en présence d'eau permet la mobilité des protons. Leur température maximale d'utilisation est aux environs de 85°C .

1.4.2. Couche Active (catalyseur)

La zone active est le siège des deux demi-réactions d'oxydoréduction. C'est la zone de couplage des phénomènes électrique, chimique et de transfert de masse. La condition nécessaire aux réactions est la coexistence au même point, du gaz réactif, des protons et des électrons. La zone active est donc constituée d'un milieu polyphasique: des pores pour permettre l'alimentation en gaz, de l'électrolyte pour assurer la continuité ionique, du carbone pour la conductivité électronique et du platine pour catalyser la réaction [2] [3].

1.4.3. Couche de diffusion

C'est une couche poreuse entre la couche de catalyseur et la plaque bipolaire, elle a plusieurs fonctions [1] [3]:

- fournit un chemin pour les réactifs des canaux d'écoulement à la couche de catalyseur.
- fournit un chemin pour l'eau produite de la couche de catalyseur aux canaux d'écoulement.
- relie électriquement la couche de catalyseur à la plaque bipolaire, permettant aux électrons d'accomplir le circuit électrique.
- Sert également à transporter la chaleur produite par les réactions électrochimiques dans la couche de catalyseur à la plaque bipolaire, qui a des moyens pour l'évacuer.
- fournit un appui mécanique au cœur de la pile (les deux couches de catalyseur et la membrane), et empêche-le de fléchir dans les canaux d'écoulement.

1.4.4. Plaques Bipolaires

La plaque bipolaire est une barrière étanche qui sépare les cellules d'un empilement ; elle doit avoir une bonne conductivité électrique et thermique, inerte chimiquement dans ce milieu très acide et étanche. Les plaques bipolaires ont plusieurs fonctions [1] [2]:

- relie les cellules en série ;
- séparent les gaz des cellules adjacentes ; donc elles doivent être imperméables aux gaz ;
- fournissent l'appui structurel pour la pile ; donc elles doivent avoir une certaine rigidité, et doivent être légères ;
- servent au refroidissement de la pile ; donc elles doivent avoir une bonne conductivité thermique.
- logent les canaux d'écoulement.

1.5. Géométrie des Canaux

La géométrie des plaques bipolaires est très importante pour définir les performances d'une pile à combustible. Les piles PEMFC fonctionnent à des niveaux de pression et de température réduits, favorisant ainsi l'apparition d'écoulements diphasiques eau/gaz à l'intérieur des structures de distribution des réactifs aux électrodes. Ces distributeurs sont constitués de canaux usinés dans les plaques bipolaires. Leur rôle est d'assurer une répartition

homogène des gaz sur les électrodes, afin de garantir une utilisation optimale de leur surface active [2]. Les expériences effectuées jusqu'à présent ont permis d'identifier les régimes d'écoulement qui se rencontrent à l'intérieur des canaux de distribution et de mettre en évidence les effets sur la réponse électrique. Ainsi, les principaux modes d'écoulement diphasiques habituellement rencontrés dans une conduite horizontale se retrouvent ici, mais avec quelques spécificités liées à la taille réduite des canaux qui favorise les effets capillaires. En fonction de la nature du fluide (gaz ou liquide) et de la concentration des réactifs, la géométrie du canal peut être différente sur l'anode et sur la cathode ; différentes géométries de canaux de circulation peuvent être définies [3].

1.5.1. Canal en serpentin

La structure en serpentin (Figure. 1.7) est largement utilisée car elle assure un chemin préférentiel à Travers le système. Aucun canal n'est fermé ce qui rend plus difficile la formation d'un bouchon dans le fluide. Cependant, cette structure est responsable de chutes de pression et est plus difficile à fabriquer. Des résultats de travail d'optimisation sur les canaux serpentins ont été révélés par Watkins et al. (1991). Ils prétendent que les gammes les plus préférées sont de: 1.14 à 1.4 millimètre pour la largeur du canal, de 0.89 à 1.4 millimètre pour l'épaisseur des nervures et de 1.02 à 2.04 millimètres pour la profondeur du canal. L'inconvénient des systèmes serpentins est la longueur du chemin parcourue et le grand nombre de coudes, ce qui signifie qu'il faut un travail supplémentaire pour faire passer les gaz [2].

1.5.2. Canal en serpentins parallèles

La structure serpentine parallèle (Figure. 1.8), qui force les gaz à travers une couche de diffusion, peut être avantageuse pour les gaz purs, mais elle n'est généralement pas la structure préférée à cause des blocages dus à la formation des gouttelettes d'eau et à la perte de charge importante. La formation des bouchons dans les canaux, qui est due à l'évacuation inefficace de l'eau à cause de la distribution inégale des flux entre les canaux parallèle, présente l'inconvénient majeur de cette configuration.

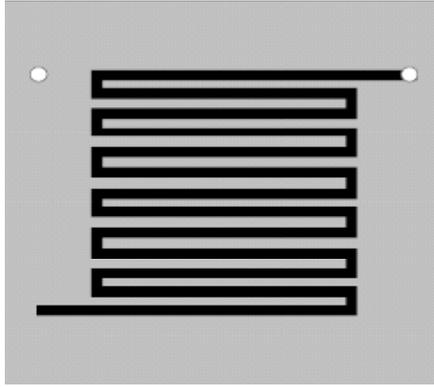


Figure. 1. 7: Canal serpentin

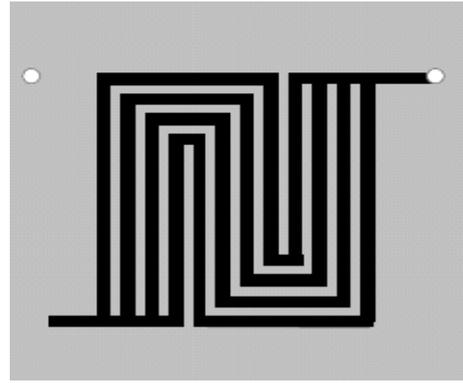


Figure. 1. 8 : Canal Serpentin Parallèle

1.5.3. Canal mixte

Cette configuration permet aux gaz de se mélanger au niveau des coudes afin de minimiser l'effet du blocage dans le canal. Ceci n'élimine pas la chance du bouchage du canal, mais limite son effet seulement à une partie du canal (Figure. 1.9) [3].

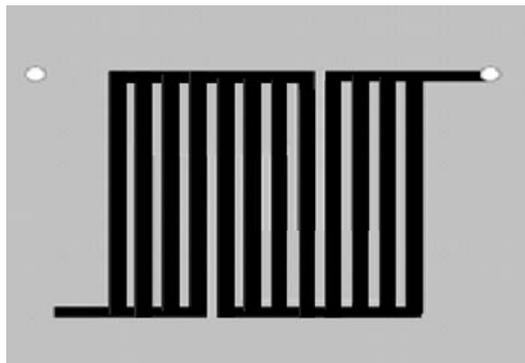


Figure. 1. 9 : Canal mixte Serpentin Parallèle

1.5.4. Plot en carré ou grille

Cette structure, constituée de plots régulièrement disposés, n'est pas optimale pour une distribution égale des gaz qui peuvent circuler à travers la pile par n'importe quel chemin possible. Le résultat est que certains chemins peuvent être bloqués (formation d'un bouchon de liquide) et ainsi la distribution de courant dans l'électrode n'est pas homogène. L'avantage de cette géométrie est que la chute de pression est minimale durant le trajet (Figure. 1.10).

1.5.5. Structure Parallèle

Cette structure utilise également des canaux fermés ce qui peut provoquer des bouchons par formation de gouttelettes d'eau. Cette structure souffre aussi de forte chute de pression.

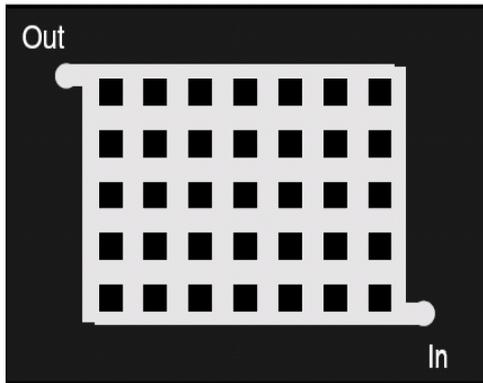


Figure. 1.10: Plot en carré ou grille

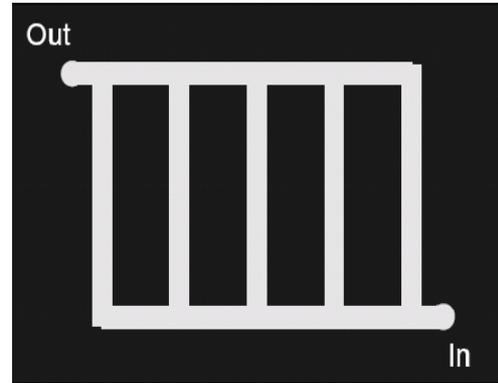


Figure. 1.11: Structure Parallèle

1.5.6. Canaux discontinus

Cette géométrie est une solution du problème de la diffusion décroissante du gaz dans la couche de diffusion : Comme les canaux sont discontinus, le gaz est obligé, pour passer des canaux d'admission aux canaux de sortie, de traverser la couche de diffusion poreuse (Figure 1.12). Le processus d'évacuation d'eau liquide et du transport des réactifs à travers la couche de diffusion est plus efficace par rapport aux autres configurations à cause de la convection forcée dans la GDL. Cette configuration a une bonne performance, mais la perte de charge est également élevée [1] [3].

1.5.7. Canal en spirale

La géométrie du canal en spirale est une alternative intéressante proposée par KASKIMIES (2000). Il combine le transport efficace de l'eau avec l'avantage d'avoir des canaux contenant des gaz cathodique frais et épuisé cote à cote.

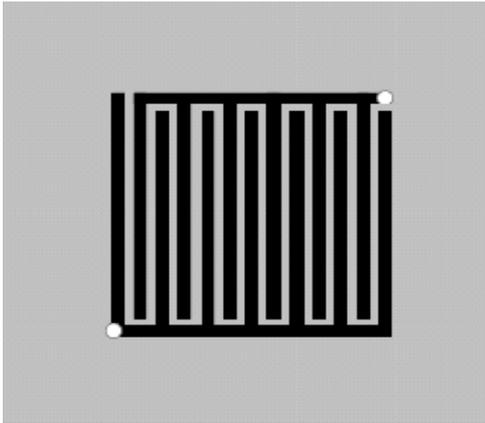


Figure. 1.12 : Canaux discontinus

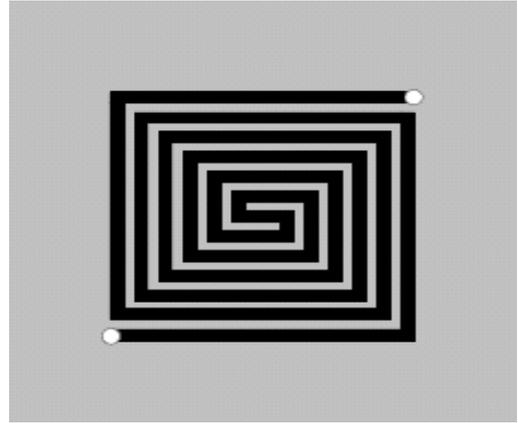


Figure. 1.13 : Canal en spirale

En fin, l'optimisation du classement par taille des canaux pour une géométrie donnée de base est une tâche complexe dans laquelle plusieurs conditions doivent être satisfaites :

- La diminution de la largeur des nervures entre les canaux facilite le passage de l'eau et des gaz dans les parties du cœur de la pile;
- La chute de pression dans un canal du gaz aide à éliminer les gouttelettes d'eau;
- L'augmentation de la largeur des canaux baisse la chute de pression dans les canaux, mais peut aboutir à une distribution non uniforme;
- L'augmentation de la largeur des canaux baisse aussi la chute de pression, mais augmente l'épaisseur des plaques bipolaires et baisse ainsi la densité de puissance de la pile ;
- Les chutes de pression de toutes les cellules individuelles doivent être évidemment égale.

1.6. Performance

La caractéristique principale d'une pile à combustible est de transformer directement l'énergie chimique d'une réaction en énergie électrique, le complément étant perdu sous forme de chaleur. Le travail électrique W_{elec} fourni par la pile correspond au déplacement des charges électriques (ions et électrons) entre les deux niveaux de potentiel auxquels se situent les électrodes. Il est égal à la variation d'enthalpie libre ΔG au cours de la réaction chimique

$$W_{elec} = -\Delta G$$

Si l'anode est au potentiel E_a et la cathode au potentiel E_c et si la réaction produit n électrons par mole de combustible oxyde, ce travail s'exprime par :

$$W_{elec} = -nF(E_a - E_c)$$

avec : F est la constante de Faraday.

En théorie, le travail maximum W_{max} de la pile peut fournir est donc :

$$W_{MAX} = -\Delta G = nF(E_a - E_c)_{MAX}$$

Ceci signifie que la tension maximale de la pile en circuit ouvert vaut :

$$(E_a - E_c)_{MAX} = -\frac{\Delta G}{nF}$$

Le rendement électrique d'une pile à combustible η_{elec} est défini comme étant le rapport entre l'énergie électrique produite W_{ele} à l'énergie chimique apportée par les réactifs, c'est à dire l'énergie thermique qui serait libérée par la réaction ΔH :

$$\eta_{elec} = \frac{W_{elec}}{\Delta H}$$

Le rendement énergétique maximal est le rapport entre le travail maximal théorique W_{max} fourni par une pile (c'est-à-dire qui fonctionnerait de manière réversible) et la variation d'enthalpie au cours de la réaction :

$$\eta_{rev} = -\frac{W_{MAX}}{\Delta H}$$

Pour une pile à combustible fonctionnant en hydrogène et oxygène, les enthalpies de formation de l'eau à 25°C sont de -285 kJ/mol (d'hydrogène) et -242 kJ/mol (d'oxygène) Selon que l'eau est formée respectivement sous forme liquide ou gazeuse. Le rendement Théorique maximal, a 25°C, est donc de 83% si l'eau formée est liquide et de 95% dans le cas de vapeur d'eau. En pratique, la tension U de la pile est inférieure à la valeur maximale, à cause de l'irréversibilité des réactions, de la chute ohmique et de la diffusion des réactifs jusqu'aux sites catalytiques. Le rendement électrique réel peut s'écrire en fonction de la tension U :

$$\eta_{elec} = -\frac{nFU}{\Delta H}$$

Cette expression peut se ramener à un rapport de tension, par exemple, à 25 °C :

$$\eta_{elec} = \frac{U}{1.48V} \quad \text{Pour l'eau liquide}$$

Où 1,48 V correspondent à la tension qui devrait être obtenues si le système était efficace à 100%. Ainsi, plus la tension de la pile est élevée, meilleur est le rendement en électricité. Comme toute l'énergie non convertie en électricité est perdue sous forme de chaleur, à l'inverse, plus la tension de la pile est basse, plus la pile produit de la chaleur. Ceci pose de nombreux problèmes pour la conception des cellules puisqu'il est nécessaire d'évacuer une grande quantité de chaleur dans un système que l'on souhaite le plus compact possible.

CHAPITRE II

ÉTUDE BIBLIOGRAPHIQUE

2.1. Introduction

Durant la dernière décennie, beaucoup de travaux ont été réalisés à fin d'étudier l'influence de la géométrie des canaux d'écoulement (canal en serpentif, canaux parallèles, canaux en grille,...) sur la performance des PEMFC. On peut diviser ces travaux selon les éléments étudiés en deux groupes: les modèles partiels qui concernent seulement quelques éléments de la pile et les modèles complets qui étudient tout les composants de la pile comme un ensemble.

2.2. Modèles partiels

Wei-Mon Yan et al. [4] un modèle numérique décrit les processus électrochimiques et les caractéristiques de transport des gaz des réactifs et son effet sur la performance des piles PEMFC. Le transport des réactifs à travers les électrodes, la longueur du canal, la porosité de la couche de diffusion des gaz et la surface de la couche catalytique, ont une influence directe sur la densité de courant et les caractéristiques transitoires résultant du système. Il est constaté que l'augmentation de la densité de courant conduit à une réponse dynamique plus rapide.

Tableau2.1 : Wei-Mon Yan et al(2005)

Phénomènes étudiés	Influence de la largeur du canal, de la porosité de la couche de diffusion, et de la surtension catalytique superficielle sur la distribution de la densité de courant et de la fraction molaire d'oxygène.
Régions	Canal, couche de diffusion, et couche de catalyseur du côté cathodique
Dimensions	2D (plan transversal)
Hypothèses	<ul style="list-style-type: none">• Le canal est droit.• Régime instationnaire et isotherme• Ecoulement laminaire et incompressible• L'eau existe seulement à la phase vapeur• La réduction d'oxygène au niveau du catalyseur est

	irréversible
Equations gouvernantes	Equation de conservation des espèces
Conclusions	<ul style="list-style-type: none"> • La surtension superficielle représente la perte de tension due à la réaction chimique dans la couche de catalyseur. • Un canal plus large améliore la performance de la pile

Wang Ying et al. [5] développent un modèle mathématique couplée en trois dimensions et valident ses résultats par des données expérimentales. Les équations régissant le transfert de chaleur et de masse et la dynamique des fluides sont combinées avec les réactions électrochimiques. La résolution numérique des équations est effectuée en utilisant le code commerciale STAR-CD, basé sur les méthodes des différences et des volumes finis. Les caractéristiques électrochimiques de transport de l'eau sont également présentes pour étudier l'effet de la configuration des canaux sur la performance globale du système.

Tableau 2.2: Wang Ying et al. (2005)

Phénomènes étudiés	Influence de la géométrie des canaux sur la performance de la pile.
Régions	Canal, couche de diffusion, couche de catalyseur du côté cathodique, et membrane
Dimensions	3D
Hypothèses	<ul style="list-style-type: none"> • Le canal est droit. • Régime stationnaire et isotherme • Écoulement laminaire et incompressible • L'eau existe seulement à la phase vapeur • Les surtensions ohmiques sont négligeables.
Equations gouvernantes	Equations de conservation de masse, de quantité de mouvement, d'énergie, et des espèces.
Conclusions	la meilleure performance est obtenue avec une configuration de 3 mm de largeur du canal.

K.B. Shyam Prasad et S. Jayanti [6] présentent une étude numérique qui décrit le passage des gaz d'une branche à une autre d'un canal serpentin d'une cellule PEMFC. Un modèle basé sur les équations de Navier-Stokes pour un écoulement incompressible,

monophasique, et isotherme est développé pour étudier les différents aspects des écoulements liés aux PEMFC. Ils ont déterminé comment la vapeur d'eau est évacuée efficacement en raison de la diffusion et de la convection dans l'électrode et dans le canal du gaz.

Tableau2.3: K.B. Shyam Prasad et S. Jayanti (2008)

Phénomènes étudiés	<ul style="list-style-type: none"> • L'effet du coude sur les paramètres d'écoulement. • la distribution de vapeur d'eau dans l'électrode
Régions	Canal en 'U' et couche de diffusion du côté cathodique.
Dimensions	3D
Hypothèses	<ul style="list-style-type: none"> • Régime stationnaire et isotherme • Le canal et sous forme 'U'. • Ecoulement laminaire et incompressible • L'eau existe seulement à la phase vapeur
Equations gouvernantes	Equations de conservation de masse, de quantité de mouvement, et des espèces.
Conclusions	Si la perméabilité d'électrode ou la chute de pression est haute, alors l'écoulement à travers le coude peut être établi et mènera à une meilleure évacuation de la vapeur d'eau.

Xiao-Dong Wang et al. [7]: Un modèle tridimensionnel a été employé pour analyser l'effet des paramètres de conception des plaques bipolaires (le nombre des canaux en serpent, le nombre de coude dans chaque serpent, et la largeur du canal d'écoulement) sur le fonctionnement d'une cellule PEMFC. L'effet de la formation de l'eau liquide dans les pores des couches poreuses a été également pris en considération dans le modèle, tandis que l'écoulement diphasique complexe était négligé. L'étude montre que pour un canal d'écoulement sous forme de serpent simple, la performance de la cellule s'améliore en augmentant le nombre de coudes, aussi la performance d'une cellule à serpent simple est mieux que celle à doubles ou à triples serpents.

Tableau2.4: Xiao-Dong Wang et al. (2008)

Phénomènes étudiés	Influence de la géométrie des plaques bipolaire sur les performances des PEMFC.
--------------------	---

Régions	Canal serpentin, couche de diffusion, couche de catalyseur du côté cathodique, et membrane.
Dimensions	3D
Hypothèses	<ul style="list-style-type: none"> • Régime stationnaire, isotherme • Les canaux sont de forme serpentin. • Ecoulement laminaire et incompressible • L'eau existe seulement à la phase vapeur
Equations gouvernantes	Équations de conservation de masse, de quantité de mouvement, et des espèces.
Conclusions	<ul style="list-style-type: none"> • L'augmentation du nombre de coudes dans un canal serpentin améliore les performances de la cellule • Un canal serpentin simple donne des performances mieux que celui doublé ou triplé. • Un canal plus large conduit à une performance meilleure.

Shiang-Wuu Perng et al. [8] présentent une étude numérique bidimensionnelle sur les performances d'une pile à combustible à membrane échangeuse de protons (PEMFC) en employant la méthode des éléments finis. Le facteur étudié dans ce travail est l'influence de l'installation d'une chicane transversalement dans le canal d'écoulement sur la consommation d'oxygène et la production du courant. Les résultats prouvent que l'installation transversale d'une chicane ou d'un obstacle dans le canal d'écoulement peut efficacement augmenter la performance locale (autour de la chicane) d'une PEMFC. En outre, l'effet d'un obstacle sur la performance globale de la cellule est plus favorable que d'une chicane.

Tableau 2.5: Shiang-Wuu Perng et al. (2008)

Phénomènes étudiés	l'effet de l'installation d'une chicane ou d'un obstacle dans le canal d'écoulement sur la performance d'une PEMFC.
Régions	Canal, couche de diffusion, et catalyseur du côté cathodique
Dimensions	2D (plan longitudinal).
Hypothèses	<ul style="list-style-type: none"> • Régime transitoire, isotherme • Le canal est droit. • Ecoulement laminaire et incompressible

	<ul style="list-style-type: none"> • L'eau existe seulement à la phase vapeur • La couche de catalyseur est considérée comme une couche ultra-mince, et la réduction d'oxygène se produit seulement sur la surface de la couche de catalyseur.
Equations gouvernantes	Equations de conservation de masse, de quantité de mouvement, et des espèces.
Conclusions	<ul style="list-style-type: none"> • la meilleure performance locale de la cellule est produite autour de la chicane ou de l'obstacle. • la plus mauvaise performance locale de la cellule se produit en aval de la chicane.

Shiang-Wuu Perng et al. [9] étudient numériquement l'effet de la position et des dimensions d'un obstacle rectangulaire, installé dans le canal d'écoulement du côté cathodique, sur les performances d'une cellule d'une pile à combustible à membrane échangeuse de protons en utilisant un modèle bidimensionnel stationnaire, isotherme, et monophasique. Les champs de distribution de vitesse, de pression, et de concentration d'oxygène sont présentés et analysés, ainsi que le profil de la densité de courant local.

Tableau 2.6: Shiang-Wuu Perng et al. (2009)

Phénomènes étudiés	l'effet de l'installation d'un obstacle dans le canal d'écoulement sur la performance d'une PEMFC.
Régions	Canal, couche de diffusion, et catalyseur du côté cathodique
Dimensions	2D (plan longitudinal).
Hypothèses	<ul style="list-style-type: none"> • Régime instationnaire et isotherme • Les canaux sont droits. • Ecoulement laminaire et incompressible • L'eau existe seulement à la phase vapeur
Equations gouvernantes	Equations de conservation de masse, de quantité de mouvement, d'énergie, et des espèces.
Conclusions	<ul style="list-style-type: none"> • Les meilleures performances sont obtenues quand l'obstacle est installé au milieu du canal.

2.3. Modèles complets

S. Shimpalee et al. [10] présentent un modèle en trois dimensions qui décrit les processus de transport, de distribution et de consommation des réactifs, ainsi que le transport d'eau à travers la membrane. Le modèle apporte une modification de distribution des flux des réactifs, qui est d'une manière plus uniforme et d'une façon qui permet de réduire les contraintes de diffusion. Les résultats montrent comment la température, la teneur en eau et la distribution de la densité de courant sont de plus en plus uniforme pour un domaine des canaux serpentin plus large et avec un plus grand nombre de chemins.

Tableau 2.7: S. Shimpalee et al. (2006)

Phénomènes étudiés	Etude de l'effet des concentrations des réactifs sur les performances de la pile.
Régions	Tous les éléments de la cellule sauf les plaques bipolaires.
Dimensions	3D
Hypothèses	<ul style="list-style-type: none"> • Canal serpentin • Régime transitoire et isotherme • Écoulement laminaire et incompressible • L'eau existe seulement à la phase vapeur
Equations gouvernantes	Equations de conservation de masse, de quantité de mouvement, d'énergie, et des espèces.
Conclusions	L'uniformité de distribution de la densité de courant exige que le canal serpentin occupe la plus grande surface possible.

Lixin You et al. [11] présentent un modèle mathématique multi composants valable dans les différents composants d'une cellule PEMFC. Le modèle décrit le potentiel électrique, la distribution de la densité de courant dans les électrodes, et le processus de diffusion des gaz. Les résultats de ce modèle montrent les distributions typiques des concentrations en utilisant un couplage (concentration d'oxygène-densité de courant). Et permet de prédire les différentes courbes de polarisation cathodiques comparée par la suite avec des données expérimentales.

Tableau 2.8: Lixin You et al. (2006)

Phénomènes étudiés	<ul style="list-style-type: none"> • Les flux d'Oxygène et d'Hydrogène ainsi que leurs consommations • Le flux d'eau et sa production
Régions	Tous les éléments de la cellule sauf les plaques bipolaires.
Dimensions	2D (plan longitudinal).
Hypothèses	<ul style="list-style-type: none"> • Écoulement diphasique dans les canaux et les couches de diffusion • Régime transitoire et isotherme • Le canal est droit. • Écoulement laminaire et incompressible
Equations gouvernantes	Équations de conservation de masse, de quantité de mouvement, des espèces, ainsi que l'équation de Butler-Volmer.
Conclusions	<ul style="list-style-type: none"> • La fraction de l'oxygène diminue le long du sens de l'écoulement en raison de sa consommation dans la couche de catalyseur. • le gradient de la fraction d'oxygène dans le catalyseur est beaucoup plus haut que ceux dans la GDL et le canal. • l'augmentation de la densité de courant augmente la consommation des réactifs et diminue leurs concentrations dans la couche de catalyseur. • à des densités de courant basses, aucune eau liquide n'est présente au début du côté de cathode, tandis qu'à des densités plus élevées, plus d'eau est produite à la cathode et l'eau liquide est présente.

Dewan Hasan Ahmed et al. [12] ont utilisé le code commercial CFD pour simuler la performance d'une cellule PEMFC avec inclusion des électrodes et pour différentes géométries des canaux sous une haute densité de courant électrique. Un modèle en trois dimensions a été développé avec un canal de géométrie rectiligne. Les résultats de la simulation montrent qu'un canal de section rectangulaire donne des tensions plus ou moins élevées par rapport à celui de section trapézoïdale ou parallélogramme; cependant la forme

trapézoïdale facilite la diffusion des réactifs, ce qui conduit à une distribution uniforme de ces derniers et de la densité de courant. La simulation des trois géométries, en utilisant les mêmes conditions aux limites, montre que parmi les paramètres géométriques, la largeur des nervures est l'un des paramètres les plus importants; la diminution de la largeur des nervures facilite la distribution des réactifs et permet de réduire les pertes de concentration.

Tableau 2.9: Dewan Hasan Ahmed et al. (2006)

Phénomènes étudiés	l'effet de la forme de la section transversal des canaux sur la performance de la pile.
Régions	Tous les éléments de la cellule.
Dimensions	3D
Hypothèses	<ul style="list-style-type: none"> • Régime stationnaire • Le canal est droit. • Écoulement laminaire et incompressible • L'eau existe seulement à la phase vapeur
Equations gouvernantes	Equations de conservation de masse, de quantité de mouvement, d'énergie, et des espèces.
Conclusions	<ul style="list-style-type: none"> • Le canal à section rectangulaire donne le potentiel le plus élevé • Le canal à section trapézoïdale donne une distribution des réactifs et du courant plus uniforme.

J. Scholta et al [13] présentent une étude expérimentale de l'influence de la géométrie des canaux sur la performance d'une PEMFC. Une configuration des canaux parallèle a été développée. L'influence de la largeur du canal et l'épaisseur des nervures sur la performance de la pile a été étudiée. Un optimum entre 0,7 et 1mm a été trouvé pour le canal et pour la largeur des nervures. Pour des dimensions très petites, la fabrication devient très difficile et la probabilité que le canal devient obstrué par la formation des gouttelettes d'eau augmente. En général, des dimensions étroites de canal sont préférées pour des densités de courant élevées, tandis que des dimensions plus larges sont meilleures pour des basses densités de courant.

Tableau2.10: J. Scholta et al. (2006)

Phénomènes étudiés	l'influence de la géométrie des canaux sur la performance d'une PEMFC
Régions	Tous les éléments de la pile.
Conclusions	<ul style="list-style-type: none"> • une corrélation de correspondance positive existe entre la tension de la cellule à 0.7 Acm^{-2} et le rapport de la largeur (nervure/canal). • Les largeurs optimales des canaux et des nervures ont été trouvées entre 0,5 et 1 mm. • Pour des dimensions plus larges, l'influence de la largeur des canaux sur le transport de masse devient significative. • Pour des dimensions très petites, le cout de fabrication des plaques bipolaires devient élevé et le risque de l'obstruction du canal par les gouttelettes augmente. • une largeur du canal et de nervure $\geq 1.5 \text{ mm}$ n'est pas favorable pour des densités de courant élevées.

B. Rismanchi et M.H. Akbari [14] présentent une étude numérique pour simuler les performances d'une PEMFC en utilisant un modèle tridimensionnel et stationnaire. La solution numérique est basée sur la méthode des volumes finis. Dans ce travail le code CFD a été employé pour résoudre les équations de transport, alors que des modèles mathématiques pour les phénomènes physiques et électrochimiques étaient conçus dans le solveur en utilisant des sous-programmes développés.

Tableau2.11: B. Rismanchi et M.H. Akbari (2008)

Phénomènes étudiés	Étude des performances d'une PEMFC
Régions	Tous les éléments de la cellule.
Dimensions	3D
Hypothèses	<ul style="list-style-type: none"> • Régime stationnaire • Les canaux sont droits. • Ecoulement laminaire et incompressible avec masse volumique variable.

	<ul style="list-style-type: none"> • L'eau existe seulement à la phase vapeur • Le catalyseur et le GDL sont isotropes et homogènes. • Le potentiel électrique est constant dans les plaques collectrices en raison de leur conductivité électrique élevée.
Equations gouvernantes	Equations de quantité de mouvement, de conservation de la masse, d'espèces, d'énergie, et de charge, ainsi que l'équation Butler–Volmer.
Conclusions	<ul style="list-style-type: none"> • en diminuant la tension de la cellule, la densité de courant augmentera et atteindra une limite en raison de la résistance à la diffusion des réactifs à travers le GDL et le catalyseur. • Le paramètre de diffusion de catalyseur (PDC) inclut les aspects structuraux de la couche de catalyseur qui sont liés au transport gazeux de réactif. Un changement de 25% du PDC a peu d'effet sur les performances de la cellule.

Maher A.R. Sadiq Al-Baghdadi [15] développent un modèle présentatif en trois dimensions permet de simuler les processus de transport pour le développement et l'optimisation des systèmes PEMFC. Ce modèle complet décrit les phénomènes de transport, la cinétique électrochimique des électrodes, le mécanisme de changement de phase et l'interaction des nombreux phénomènes de transport qui ne peut pas être étudié expérimentalement. A travers ce modèle les profils des espèces, la distribution de température, de tension et de la densité de courant locale sont présentés et analysés pour un régime stationnaire.

Tableau 2.12: Maher A.R. Sadiq Al-Baghdadi (2009)

Phénomènes étudiés	La distribution de température, des concentrations des espèces, et des surtensions
Régions	Tous les éléments de la cellule
Dimensions	3D
Hypothèses	<ul style="list-style-type: none"> • Écoulement incompressible, biphasé et stationnaire • Les canaux sont droits.

	<ul style="list-style-type: none"> • Ecoulement laminaire et incompressible
Equations gouvernantes	Equations de conservation de masse, de quantité de mouvement, d'énergie, et des espèces.
Conclusions	<ul style="list-style-type: none"> • Les densités de puissance les plus élevées sont réalisées avec des vitesses d'écoulement faibles en raison des plus petites surtensions d'activation et de diffusion.

Mohammad Hadi Akbari et al. [15] développent un modèle complet, tridimensionnel d'une PEMFC. Les équations, de conservation de masse, de quantité de mouvement, d'espèces, d'énergie et de charge sont résolues par la méthode des volumes finis, en tenant compte de la cinétique chimique basée sur l'équation de Butler-Volmer. Dans cette étude les effets des dimensions du canal d'écoulement sur le fonctionnement de la cellule sont étudiés. Les résultats de simulation indiquent que l'augmentation de la largeur du canal améliore la densité de courant.

Tableau 2.13: Mohammad Hadi Akbari et al. (2009)

Phénomènes étudiés	Influence des dimensions du canal sur les performances d'une PEMC.
Régions	Tous les éléments de la pile.
Dimensions	3D
Hypothèses	<ul style="list-style-type: none"> • Régime stationnaire et isotherme • Les canaux sont droits. • Ecoulement laminaire et incompressible, mais la masse volumique est variable à cause de la consommation des réactifs. • L'eau existe seulement à la phase vapeur
Equations gouvernantes	Equations de conservation de masse, de quantité de mouvement, d'énergie, et des espèces.
Conclusions	<ul style="list-style-type: none"> • Un canal plus large conduit à une meilleure performance.

CHAPITRE III

ETUDE NUMERIQUE

3.1. Introduction

Un modèle tridimensionnel, instationnaire, isotherme, et monophasique est présenté dans ce travail. Les équations de quantité de mouvement, de continuité et de conservation des espèces sont résolues par la méthode des volumes finis, au niveau des canaux, des couches de diffusion, des catalyseurs et de la membrane. Ce modèle étudie l'influence du nombre de Reynolds, de la forme géométrique des canaux et leurs dimensions sur la consommation des réactifs.

3.2. Domaine de calcul

La simulation d'une pile à combustible complète aurait besoin d'un matériel informatique puissant et d'un temps de simulation excessivement long. Le domaine de calcul est donc limité à un canal d'écoulement droit. Il se compose de deux canaux d'écoulement de gaz cathodique et anodique, de la cathode, de l'anode et de la membrane (figure 1.3).

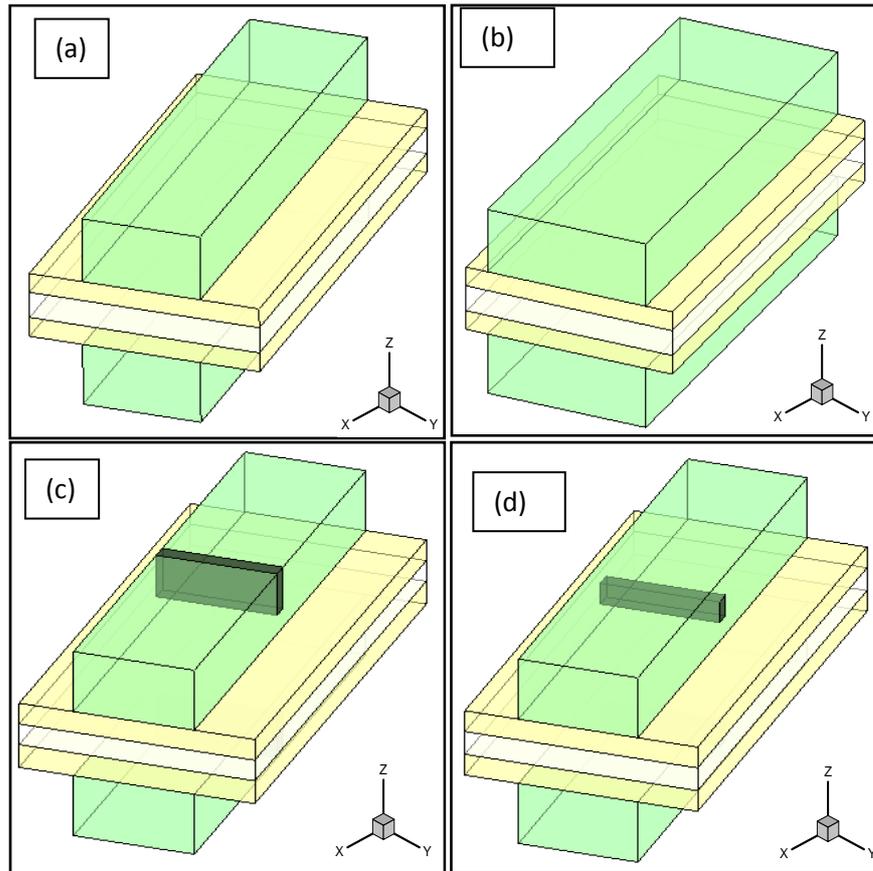


Figure 3.1. *Domaine de calcul pour les différentes géométries.*
a: canal simple, $\lambda=2$; **b:** canal simple, $\lambda=4$
c: canal avec chicane, $\lambda=2$; **d:** canal avec obstacle, $\lambda=2$

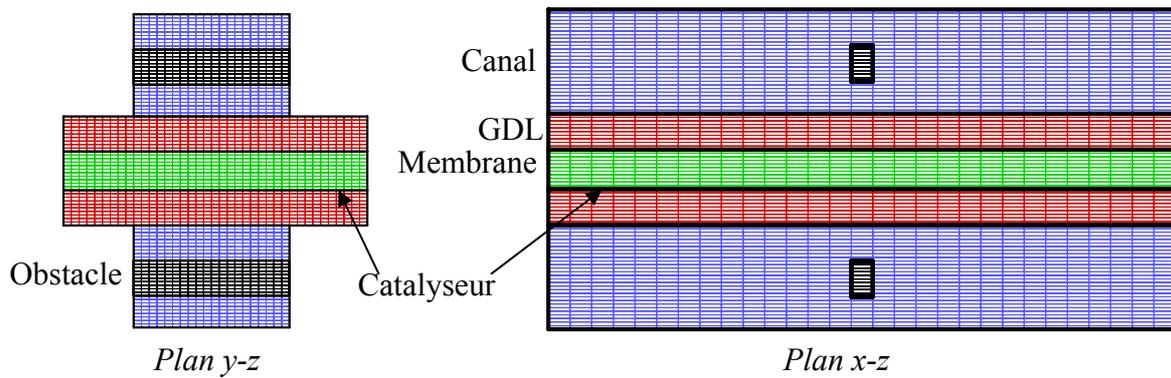


Figure 3.2. *coupes longitudinale et transversale du domaine de calcul.*

Les paramètres utilisés pour chaque géométrie sont indiqués dans le tableau suivant :

tableau3.1. paramètres géométriques de la cellule

paramètre	Géométrie			
	<i>a</i>	<i>b</i>	<i>c</i>	<i>d</i>
Longueur du canal (mm)	30	30	30	30
Largeur du canal (mm)	1	1	1	1
Hauteur du canal (mm)	1	1	1	1
Épaisseur de la couche de diffusion (mm)	1/3	1/3	1/3	1/3
Épaisseur de la membrane (mm)	1/3	1/3	1/3	1/3
Largeur des nervures (mm)	1/2	1/4	1/2	1/2
Longueur de la chicane (c), ou d'obstacle (d) (mm)	-	-	3	3
Longueur de la chicane (c), ou d'obstacle (d) (mm)	-	-	2/3	1/3
Longueur de la chicane (c), ou d'obstacle (d) (mm)	-	-	1	1
Coefficient de largeur du canal λ : (λ = largeur du canal/largeur de la nervure)	2	4	2	2

3.3. Hypothèses

- Les écoulements dans les canaux sont considérés laminaires, incompressibles et instationnaires;
- L'eau dans les canaux d'écoulement de gaz et les couches de diffusion est considérée à la phase vapeur;
- L'eau est produite sous forme de vapeur;
- La couche de diffusion est homogène et isotrope;
- La température des différents points de la pile est constante;
- La membrane est entièrement humidifiée de telle sorte que la conductivité ionique soit constante.

3.4. Modèle mathématique

Les équations régissant le problème peuvent être transformées à la forme adimensionnelle en utilisant les paramètres de référence suivants :

- h : longueur de référence (hauteur du canal) ;
- U_{∞} : vitesse de référence (vitesse d'entrée dans les canaux) ;
- h/U_{∞} : temps de référence ;
- ρU_{∞}^2 : pression de référence ;

- C^{ref} : concentration de référence.

Il est alors possible de déterminer les variables adimensionnelles :

$$x^* = \frac{x}{h}; y^* = \frac{y}{h}; z^* = \frac{z}{h}$$

$$U^* = \frac{U}{U_\infty}; V^* = \frac{V}{U_\infty}; W^* = \frac{W}{U_\infty}$$

$$t^* = tU_\infty/h; p^* = \frac{p}{\rho U_\infty^2}; C^* = \frac{C}{C^{ref}}$$

Les équations, de continuité, de Navier-Stokes, de conservation des espèces peuvent être écrites dans les différentes parties de la cellule comme suit :

a. Canaux des gaz

Dans les canaux, les champs d'écoulement des gaz et des concentrations des réactifs sont obtenus en résolvant les équations, de continuité, de quantité de mouvement et des espèces

- **Equations de la continuité**

$$\frac{\partial U}{\partial x} + \frac{\partial V}{\partial y} + \frac{\partial W}{\partial z} = 0$$

Ou sous forme adimensionnelle

$$\frac{\partial U^*}{\partial x^*} + \frac{\partial V^*}{\partial y^*} + \frac{\partial W^*}{\partial z^*} = 0$$

- **Equations de la quantité de mouvement**

$$\frac{\partial U}{\partial t} + U \frac{\partial U}{\partial x} + V \frac{\partial U}{\partial y} + W \frac{\partial U}{\partial z} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x} + \frac{1}{\rho} \mu \left(\frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial z^2} \right)$$

$$\frac{\partial V}{\partial t} + U \frac{\partial V}{\partial x} + V \frac{\partial V}{\partial y} + W \frac{\partial V}{\partial z} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial y} + \frac{1}{\rho} \mu \left(\frac{\partial^2 V}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial z^2} \right)$$

$$\frac{\partial W}{\partial t} + U \frac{\partial W}{\partial x} + V \frac{\partial W}{\partial y} + W \frac{\partial W}{\partial z} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial z} + \frac{1}{\rho} \mu \left(\frac{\partial^2 W}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 W}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 W}{\partial z^2} \right)$$

Ou sous forme adimensionnelle

$$\frac{\partial U^*}{\partial t^*} + U^* \frac{\partial U^*}{\partial x^*} + V^* \frac{\partial U^*}{\partial y^*} + W^* \frac{\partial U^*}{\partial z^*} = -\frac{\partial P^*}{\partial x^*} + \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial^2 U^*}{\partial x^{*2}} + \frac{\partial^2 U^*}{\partial y^{*2}} + \frac{\partial^2 U^*}{\partial z^{*2}} \right)$$

$$\frac{\partial V^*}{\partial t^*} + U^* \frac{\partial V^*}{\partial x^*} + V^* \frac{\partial V^*}{\partial y^*} + W^* \frac{\partial V^*}{\partial z^*} = -\frac{\partial P^*}{\partial y^*} + \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial^2 V^*}{\partial x^{*2}} + \frac{\partial^2 V^*}{\partial y^{*2}} + \frac{\partial^2 V^*}{\partial z^{*2}} \right)$$

$$\frac{\partial W^*}{\partial t^*} + U^* \frac{\partial W^*}{\partial x^*} + V^* \frac{\partial W^*}{\partial y^*} + W^* \frac{\partial W^*}{\partial z^*} = -\frac{\partial P^*}{\partial z^*} + \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial^2 W^*}{\partial x^{*2}} + \frac{\partial^2 W^*}{\partial y^{*2}} + \frac{\partial^2 W^*}{\partial z^{*2}} \right)$$

- **Equations de conservation des espèces**

Le bilan de matière est décrit par L'équation de transport de masse, pour l'espèce k , qui peut être écrite selon l'expression suivante :

$$\frac{\partial C_k}{\partial t} + U \frac{\partial C_k}{\partial x} + V \frac{\partial C_k}{\partial y} + W \frac{\partial C_k}{\partial z} = D_k \left(\frac{\partial^2 C_k}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C_k}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C_k}{\partial z^2} \right)$$

$$\frac{\partial C_k^*}{\partial t^*} + U^* \frac{\partial C_k^*}{\partial x^*} + V^* \frac{\partial C_k^*}{\partial y^*} + W^* \frac{\partial C_k^*}{\partial z^*} = \frac{1}{Re Sc} \left(\frac{\partial^2 C_k^*}{\partial x^{*2}} + \frac{\partial^2 C_k^*}{\partial y^{*2}} + \frac{\partial^2 C_k^*}{\partial z^{*2}} \right)$$

L'indice inférieur k indique l'oxygène sur le côté de la cathode, l'hydrogène sur le côté de l'anode et la vapeur d'eau sur les deux côtés.

- **b. Couche de diffusion du gaz**

La couche de diffusion du gaz est modélisée en tant qu'un milieu poreux, les équations de Navier-Stokes et du transport des espèces dans cette couche deviennent:

- **Equations de la quantité de mouvement**

$$\rho \varepsilon_d \left(\frac{\partial U}{\partial t} + U \frac{\partial U}{\partial x} + V \frac{\partial U}{\partial y} + W \frac{\partial U}{\partial z} \right) = -\varepsilon_d \frac{\partial P}{\partial x} + \mu \left(\frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial z^2} \right) - \varepsilon_d^2 \frac{\mu}{k_d} U$$

$$\rho \varepsilon_d \left(\frac{\partial V}{\partial t} + U \frac{\partial V}{\partial x} + V \frac{\partial V}{\partial y} + W \frac{\partial V}{\partial z} \right) = -\varepsilon_d \frac{\partial P}{\partial y} + \mu \left(\frac{\partial^2 V}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial z^2} \right) - \varepsilon_d^2 \frac{\mu}{K} V$$

$$\rho \varepsilon_d \left(\frac{\partial W}{\partial t} + U \frac{\partial W}{\partial x} + V \frac{\partial W}{\partial y} + W \frac{\partial W}{\partial z} \right) = -\varepsilon_d \frac{\partial P}{\partial z} + \mu \left(\frac{\partial^2 W}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 W}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 W}{\partial z^2} \right) - \varepsilon_d^2 \frac{\mu}{K} W$$

Ou sous forme adimensionnelle

$$\frac{\partial U^*}{\partial t^*} + U^* \frac{\partial U^*}{\partial x^*} + V^* \frac{\partial U^*}{\partial y^*} + W^* \frac{\partial U^*}{\partial z^*} = -\frac{\partial P^*}{\partial x^*} + \frac{1}{\varepsilon_d Re} \left(\frac{\partial^2 U^*}{\partial x^{*2}} + \frac{\partial^2 U^*}{\partial y^{*2}} + \frac{\partial^2 U^*}{\partial z^{*2}} \right) - \frac{1}{Re Da_d} \varepsilon_d U^*$$

$$\frac{\partial V^*}{\partial t^*} + U^* \frac{\partial V^*}{\partial x^*} + V^* \frac{\partial V^*}{\partial y^*} + W^* \frac{\partial V^*}{\partial z^*} = -\frac{\partial P^*}{\partial y^*} + \frac{1}{\varepsilon_d Re} \left(\frac{\partial^2 V^*}{\partial x^{*2}} + \frac{\partial^2 V^*}{\partial y^{*2}} + \frac{\partial^2 V^*}{\partial z^{*2}} \right) - \frac{1}{Re Da_d} V^*$$

$$\frac{\partial W^*}{\partial t^*} + U^* \frac{\partial W^*}{\partial x^*} + V^* \frac{\partial W^*}{\partial y^*} + W^* \frac{\partial W^*}{\partial z^*} = -\frac{\partial P^*}{\partial y^*} + \frac{1}{\varepsilon_d Re} \left(\frac{\partial^2 W^*}{\partial x^{*2}} + \frac{\partial^2 W^*}{\partial y^{*2}} + \frac{\partial^2 W^*}{\partial z^{*2}} \right) - \frac{1}{Re Da_d} W^*$$

- **Equations de conservation des espèces**

$$\frac{\partial C_k}{\partial t} + U \frac{\partial C_k}{\partial x} + V \frac{\partial C_k}{\partial y} + W \frac{\partial C_k}{\partial z} = \frac{1}{\varepsilon} D_k^{eff} \left(\frac{\partial^2 C_k}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C_k}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C_k}{\partial z^2} \right) + S_k$$

Afin d'expliquer les contraintes géométriques du milieu poreux, les diffusivités sont corrigées en utilisant la formule de correction de Bruggemann [15]

$$D_k^{eff} = D_k \varepsilon^{1,5}$$

Ou sous forme adimensionnelle l'équation des espèces devient :

$$\frac{\partial C_k^*}{\partial t^*} + U^* \frac{\partial C_k^*}{\partial x^*} + V^* \frac{\partial C_k^*}{\partial y^*} + W^* \frac{\partial C_k^*}{\partial z^*} = \frac{1}{\varepsilon_d Re Sc} \left(\frac{\partial^2 C_k^*}{\partial x^{*2}} + \frac{\partial^2 C_k^*}{\partial y^{*2}} + \frac{\partial^2 C_k^*}{\partial z^{*2}} \right) + S_k \frac{h}{U_\infty C^{ref}}$$

c. Couche de catalyseur

La couche de catalyseur est traitée comme une interface mince entre la membrane et les électrodes, où le terme source de l'équation de conservation des espèces est pris en compte. En raison de son épaisseur infinitésimale, le terme source est pris en compte réellement dans la dernière cellule de la grille du milieu poreux (couche de diffusion).

Dans le côté cathodique le terme source pour l'oxygène est donné par :

$$S_{O_2} = -\frac{j}{4F}$$

Dans le côté anodique les termes sources, pour l'hydrogène et l'eau, sont donnés respectivement par :

$$S_{H_2} = -\frac{j}{2F} \quad ; \quad S_{H_2O} = \frac{j}{2F}$$

Où la densité de courant volumique j ; est définie par la formule de Butler-Volmer :

$$j = a j_0^{ref} \left(\frac{C_{O_2}}{C_{O_2}^{ref}} \right) \left(e^{\frac{\alpha_a F}{RT} \eta_c} - \frac{1}{e^{\frac{\alpha_c F}{RT} \eta_c}} \right)$$

La densité de courant moyenne \bar{j} est calculée par :

$$\bar{j} = \frac{1}{S} \int_S j \cdot dS$$

Ou S: surface de catalyseur ;

j : densité de courant local.

d. Membrane

- **Equations de la quantité de mouvement**

$$\rho \varepsilon_m \left(\frac{\partial U}{\partial t} + U \frac{\partial U}{\partial x} + V \frac{\partial U}{\partial y} + W \frac{\partial U}{\partial z} \right) = -\varepsilon_m \frac{\partial P}{\partial x} + \mu \left(\frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial z^2} \right) - \varepsilon_m^2 \frac{\mu}{K} U$$

$$\rho \varepsilon_m \left(\frac{\partial V}{\partial t} + U \frac{\partial V}{\partial x} + V \frac{\partial V}{\partial y} + W \frac{\partial V}{\partial z} \right) = -\varepsilon_m \frac{\partial P}{\partial y} + \mu \left(\frac{\partial^2 V}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial z^2} \right) - \varepsilon_m^2 \frac{\mu}{K} V$$

$$\rho \varepsilon_m \left(\frac{\partial W}{\partial t} + U \frac{\partial W}{\partial x} + V \frac{\partial W}{\partial y} + W \frac{\partial W}{\partial z} \right) = -\varepsilon_m \frac{\partial P}{\partial z} + \mu \left(\frac{\partial^2 W}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 W}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 W}{\partial z^2} \right) - \varepsilon_m^2 \frac{\mu}{K} W$$

Ou sous forme adimensionnelle

$$\frac{\partial U^*}{\partial t^*} + U^* \frac{\partial U^*}{\partial x^*} + V^* \frac{\partial U^*}{\partial y^*} + W^* \frac{\partial U^*}{\partial z^*} = -\frac{\partial P^*}{\partial x^*} + \frac{1}{\varepsilon_m Re} \left(\frac{\partial^2 U^*}{\partial x^{*2}} + \frac{\partial^2 U^*}{\partial y^{*2}} + \frac{\partial^2 U^*}{\partial z^{*2}} \right) - \frac{1}{Re} \frac{\varepsilon_c}{Da_m} U^*$$

$$\frac{\partial V^*}{\partial t^*} + U^* \frac{\partial V^*}{\partial x^*} + V^* \frac{\partial V^*}{\partial y^*} + W^* \frac{\partial V^*}{\partial z^*} = -\frac{\partial P^*}{\partial y^*} + \frac{1}{\varepsilon_m Re} \left(\frac{\partial^2 V^*}{\partial x^{*2}} + \frac{\partial^2 V^*}{\partial y^{*2}} + \frac{\partial^2 V^*}{\partial z^{*2}} \right) - \frac{1}{Re} \frac{\varepsilon_c}{Da_m} V^*$$

$$\frac{\partial W^*}{\partial t^*} + U^* \frac{\partial W^*}{\partial x^*} + V^* \frac{\partial W^*}{\partial y^*} + W^* \frac{\partial W^*}{\partial z^*} = -\frac{\partial P^*}{\partial z^*} + \frac{1}{\varepsilon_m Re} \left(\frac{\partial^2 W^*}{\partial x^{*2}} + \frac{\partial^2 W^*}{\partial y^{*2}} + \frac{\partial^2 W^*}{\partial z^{*2}} \right) - \frac{1}{Re} \frac{\varepsilon_c}{Da_m} W^*$$

- **Equation de conservation des espèces**

$$\frac{\partial C_k}{\partial t} + U \frac{\partial C_k}{\partial x} + V \frac{\partial C_k}{\partial y} + W \frac{\partial C_k}{\partial z} = \frac{1}{\varepsilon} D_k^{eff} \left(\frac{\partial^2 C_k}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C_k}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C_k}{\partial z^2} \right)$$

Ou sous forme adimensionnelle

$$\frac{\partial C_k^*}{\partial t^*} + U^* \frac{\partial C_k^*}{\partial x^*} + V^* \frac{\partial C_k^*}{\partial y^*} + W^* \frac{\partial C_k^*}{\partial z^*} = \frac{1}{\varepsilon_d Re Sc} \left(\frac{\partial^2 C_k^*}{\partial x^{*2}} + \frac{\partial^2 C_k^*}{\partial y^{*2}} + \frac{\partial^2 C_k^*}{\partial z^{*2}} \right)$$

3.5. Equation de pression

La résolution des équations de Navier-Stocks présente une difficulté qui réside dans le champ de pression P qui n'est pas connue car il n'existe pas d'équation qui gouverne ce champ.

L'astuce numérique que nous allons mettre en œuvre pour pallier à cette difficulté repose sur une méthode développée par (Cf. Peyret R. & Taylor T.D.) [17] ; elle est basée sur le fractionnement du pas de temps. Réécrivons les équations de conservation de la quantité de mouvement pour les différentes parties comme suit:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \varepsilon U) = -\frac{\partial(\rho \varepsilon U U)}{\partial x} - \frac{\partial(\rho \varepsilon V U)}{\partial y} - \frac{\partial(\rho \varepsilon W U)}{\partial z} + \Gamma \left(\frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial z^2} \right) + S_U - \varepsilon \frac{\partial P}{\partial x}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \varepsilon V) = -\frac{\partial(\rho \varepsilon U V)}{\partial x} - \frac{\partial(\rho \varepsilon V V)}{\partial y} - \frac{\partial(\rho \varepsilon W V)}{\partial z} + \Gamma \left(\frac{\partial^2 V}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial z^2} \right) + S_V - \varepsilon \frac{\partial P}{\partial y}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \varepsilon W) = -\frac{\partial(\rho \varepsilon U W)}{\partial x} - \frac{\partial(\rho \varepsilon V W)}{\partial y} - \frac{\partial(\rho \varepsilon W W)}{\partial z} + \Gamma \left(\frac{\partial^2 W}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 W}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 W}{\partial z^2} \right) + S_W - \varepsilon \frac{\partial P}{\partial z}$$

$$\text{Ou: } \Gamma = \frac{1}{\varepsilon Re}$$

On décompose le terme de stockage du temps t à $t + \frac{\Delta t}{2}$ et de $t + \frac{\Delta t}{2}$ à $t + \Delta t$, on trouve:

$$\begin{aligned} & \frac{\rho \varepsilon U^{t+\frac{\Delta t}{2}} - \rho \varepsilon U^t}{\Delta t} + \frac{\rho \varepsilon U^{t+\Delta t} - \rho \varepsilon U^{t+\frac{\Delta t}{2}}}{\Delta t} \\ & = -\frac{\partial(\rho \varepsilon U U)}{\partial x} - \frac{\partial(\rho \varepsilon V U)}{\partial y} - \frac{\partial(\rho \varepsilon W U)}{\partial z} + \Gamma \left(\frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial z^2} \right) + S_U - \varepsilon \frac{\partial P}{\partial x} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \frac{\rho \varepsilon V^{t+\frac{\Delta t}{2}} - \rho \varepsilon V^t}{\Delta t} + \frac{\rho \varepsilon V^{t+\Delta t} - \rho \varepsilon V^{t+\frac{\Delta t}{2}}}{\Delta t} \\ & = -\frac{\partial(\rho \varepsilon U V)}{\partial x} - \frac{\partial(\rho \varepsilon V V)}{\partial y} - \frac{\partial(\rho \varepsilon W V)}{\partial z} + \Gamma \left(\frac{\partial^2 V}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial z^2} \right) + S_V - \varepsilon \frac{\partial P}{\partial y} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \frac{\rho \varepsilon W^{t+\frac{\Delta t}{2}} - \rho \varepsilon W^t}{\Delta t} + \frac{\rho \varepsilon W^{t+\Delta t} - \rho \varepsilon W^{t+\frac{\Delta t}{2}}}{\Delta t} \\ & = -\frac{\partial(\rho \varepsilon U W)}{\partial x} - \frac{\partial(\rho \varepsilon V W)}{\partial y} - \frac{\partial(\rho \varepsilon W W)}{\partial z} + \Gamma \left(\frac{\partial^2 W}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 W}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 W}{\partial z^2} \right) + S_W - \varepsilon \frac{\partial P}{\partial z} \end{aligned}$$

On pose que le gradient de pression n'existe que dans le deuxième sous intervalle du temps $(t + \frac{\Delta t}{2}; t + \Delta t)$, les équations de conservation de la quantité de mouvement deviennent :

Dans le premier sous intervalle du temps $(t; t + \frac{\Delta t}{2})$:

$$\frac{\rho \varepsilon U^{t+\frac{\Delta t}{2}} - \rho \varepsilon U^t}{\Delta t} = -\frac{\partial(\rho \varepsilon U U)}{\partial x} - \frac{\partial(\rho \varepsilon V U)}{\partial y} - \frac{\partial(\rho \varepsilon W U)}{\partial z} + \Gamma \left(\frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial z^2} \right) + S_U \quad (a)$$

$$\frac{\rho \varepsilon V^{t+\frac{\Delta t}{2}} - \rho \varepsilon V^t}{\Delta t} = -\frac{\partial(\rho \varepsilon U V)}{\partial x} - \frac{\partial(\rho \varepsilon V V)}{\partial y} - \frac{\partial(\rho \varepsilon W V)}{\partial z} + \Gamma \left(\frac{\partial^2 V}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial z^2} \right) + S_V \quad (b)$$

$$\frac{\rho \varepsilon W^{t+\frac{\Delta t}{2}} - \rho \varepsilon W^t}{\Delta t} = -\frac{\partial(\rho \varepsilon U W)}{\partial x} - \frac{\partial(\rho \varepsilon V W)}{\partial y} - \frac{\partial(\rho \varepsilon W W)}{\partial z} + \Gamma \left(\frac{\partial^2 W}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 W}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 W}{\partial z^2} \right) + S_W \quad (c)$$

et dans le deuxième sous intervalle du temps $(t + \frac{\Delta t}{2}; t + \Delta t)$:

$$\frac{\rho \varepsilon U^{t+\Delta t} - \rho \varepsilon U^{t+\frac{\Delta t}{2}}}{\Delta t} = -\varepsilon \frac{\partial P}{\partial x} \quad (a1)$$

$$\frac{\rho \varepsilon V^{t+\Delta t} - \rho \varepsilon V^{t+\frac{\Delta t}{2}}}{\Delta t} = -\varepsilon \frac{\partial P}{\partial y} \quad (b1)$$

$$\frac{\rho \varepsilon W^{t+\Delta t} - \rho \varepsilon W^{t+\frac{\Delta t}{2}}}{\Delta t} = -\varepsilon \frac{\partial P}{\partial z} \quad (c1)$$

La résolution des trois équations (a), (b) et (c) représente l'étape dite de prédiction, elle permet l'obtention d'un champ provisoire des vitesses $U^{t+\frac{\Delta t}{2}}$, $V^{t+\frac{\Delta t}{2}}$ et $W^{t+\frac{\Delta t}{2}}$, calculé uniquement à partir du champ U^t , V^t et W^t . Ce champ provisoire ne vérifie pas a priori, l'équation de continuité.

La dérivation des trois dernières équations (a1), (b1) et (c1) respectivement par rapport à x, à y et à z nous permet d'écrire:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\rho U^{t+\Delta t} - \rho U^{t+\frac{\Delta t}{2}}}{\Delta t} \right) = -\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial P}{\partial x} \right) \quad (a2)$$

$$\frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\rho V^{t+\Delta t} - \rho V^{t+\frac{\Delta t}{2}}}{\Delta t} \right) = -\frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial P}{\partial y} \right) \quad (b2)$$

$$\frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\rho W^{t+\Delta T} - \rho W^{t+\frac{\Delta t}{2}}}{\Delta t} \right) = - \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial P}{\partial z} \right) \quad (c2)$$

La sommation des équations (a1), (b1) et (c1) nous donne :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\rho U^{t+\Delta T} - \rho U^{t+\frac{\Delta t}{2}}}{\Delta t} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\rho V^{t+\Delta T} - \rho V^{t+\frac{\Delta t}{2}}}{\Delta t} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\rho W^{t+\Delta T} - \rho W^{t+\frac{\Delta t}{2}}}{\Delta t} \right) \\ = - \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial P}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial P}{\partial y} \right) - \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial P}{\partial z} \right) \end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho U^{t+\Delta T})}{\partial x} + \frac{\partial(\rho V^{t+\Delta T})}{\partial y} + \frac{\partial(\rho W^{t+\Delta T})}{\partial z} - \left(\frac{\partial(-\rho U^{t+\frac{\Delta t}{2}})}{\partial x} + \frac{\partial(-\rho V^{t+\frac{\Delta t}{2}})}{\partial y} + \frac{\partial(-\rho W^{t+\frac{\Delta t}{2}})}{\partial z} \right) / \Delta t \\ = - \frac{\partial^2 P}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 P}{\partial y^2} - \frac{\partial^2 P}{\partial z^2} \end{aligned}$$

D'après l'équation de continuité on a :

$$\frac{\partial(\rho U^{t+\Delta T})}{\partial x} + \frac{\partial(\rho V^{t+\Delta T})}{\partial y} + \frac{\partial(\rho W^{t+\Delta T})}{\partial z} = 0$$

L'équation de pression sera :

$$\frac{\partial^2 P}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 P}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 P}{\partial z^2} = \left(\frac{\partial(-\rho U^{t+\frac{\Delta t}{2}})}{\partial x} + \frac{\partial(-\rho V^{t+\frac{\Delta t}{2}})}{\partial y} + \frac{\partial(-\rho W^{t+\frac{\Delta t}{2}})}{\partial z} \right) / \Delta t$$

La dernière étape de la méthode consiste évidemment à réinjecter le champ de pression, calculé ci-dessus, dans les équations (a1), (b1) et (c1), ce qui permet d'obtenir le champ de vitesse $U^{t+\Delta t}$, $V^{t+\Delta t}$ et $W^{t+\Delta t}$, qui satisfait aussi bien l'équation de quantité de mouvement et l'équation de continuité. L'étape de projection a donné son nom à cette méthode.

$$U^{t+\Delta T} = U^{t+\frac{\Delta t}{2}} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x} \Delta t$$

$$V^{t+\Delta T} = V^{t+\frac{\Delta t}{2}} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial y} \Delta t$$

$$W^{t+\Delta T} = W^{t+\frac{\Delta t}{2}} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial z} \Delta t$$

2.6. Conditions initiales et aux limites

2.6.1. Conditions initiales

On suppose que la pile est initialement vide (il n'y-a pas de réactifs) alors que les concentrations initiales des différents espèces sont nulles. La vitesse a été initialisée par une valeur aussi nulle :

$$P_0^* = U_0^* = V_0^* = W_0^* = C_{k0}^* = 0;$$

Les conditions aux limites sont appliquées à toutes les frontières externes du domaine de calcul.

2.6.2. Conditions d'entrée

Les valeurs des vitesses, des concentrations d'espèces, et de la pression d'admission à l'anode et à la cathode sont imposées (condition de Dirichlet).

$$P^* = U^* = 1$$

$$V^* = W^* = 0$$

$$C_{H_2O}^* = 0.1$$

sur le coté cathodique on a :

$$C_{O_2}^* = 1$$

$$C_{H_2}^* = 0$$

et sur le coté anodique on a :

$$C_{O_2}^* = 0$$

$$C_{H_2}^* = 1$$

2.6.3. Conditions de sortie

A la sortie des canaux d'écoulement des gaz et pour toutes les variables, on suppose que le gradient dans le sens d'écoulement (x) est zéro (condition de Neumann).

$$\frac{\partial U^*}{\partial x^*} = \frac{\partial V^*}{\partial x^*} = \frac{\partial W^*}{\partial x^*} = \frac{\partial P^*}{\partial x^*} = \frac{\partial C_{O_2}^*}{\partial x^*} = \frac{\partial C_{H_2}^*}{\partial x^*} = \frac{\partial C_{H_2O}^*}{\partial x^*} = 0$$

3.6.4. Surfaces externes

Sur les surfaces externes, et dans toutes les directions, les conditions aux limites pour la pression et les concentrations des espèces sont du type de Neumann. Les vitesses sur les surfaces externes sont nulles, à cause de la condition d'adhérence à la paroi.

$$U^* = V^* = W^* = \frac{\partial P^*}{\partial x^*} = \frac{\partial C_{O_2}^*}{\partial x^*} = \frac{\partial C_{H_2}^*}{\partial x^*} = \frac{\partial C_{H_2O}^*}{\partial x^*} = 0$$

$$U^* = V^* = W^* = \frac{\partial P^*}{\partial y^*} = \frac{\partial C_{O_2}^*}{\partial y^*} = \frac{\partial C_{H_2}^*}{\partial y^*} = \frac{\partial C_{H_2O}^*}{\partial y^*} = 0$$

$$U^* = V^* = W^* = \frac{\partial P^*}{\partial z^*} = \frac{\partial C_{O_2}^*}{\partial z^*} = \frac{\partial C_{H_2}^*}{\partial z^*} = \frac{\partial C_{H_2O}^*}{\partial z^*} = 0$$

2.7. Résolution des équations

2.7.1. Principe de la méthode des volumes finis

La méthode a été décrite pour la première fois en 1971 par Patankar et Spalding et publiée en 1980 par Patankar.

La méthode des volumes finis est une technique de discrétisation qui convertit les équations de conservation aux dérivées partielles en équations algébriques, qui peuvent être résolues numériquement. La technique des volumes de contrôle consiste dans l'intégration, des équations aux dérivées partielles, sur chaque volume de contrôle, pour obtenir les équations discrétisées qui conservent toutes les grandeurs physiques sur un volume de contrôle.

Le principe de discrétisation peut être illustré en considérant l'équation de transport pour une grandeur scalaire ϕ , valable pour toutes les équations d'écoulement:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon\rho\phi) + \text{div}(\varepsilon\rho u\phi) = \text{div}(\Gamma \text{grad}(\phi)) + S_\phi$$

Le premier terme représente le terme d'accumulation, le deuxième, le troisième et le quatrième représentent successivement les termes, convectif, diffusif et source.

2.7.2. Application à l'intégration d'une équation de transport-diffusion

L'intégration de l'équation du transport-diffusion sur le volume de contrôle doit sur un intervalle du temps Δt , permettre de former un système d'équations linéaires liant les valeurs de la fonction ϕ , aux différents points du maillage P_{ijk} , entre eux.

$$\begin{aligned} \iiint_{VC} \int_t^{t+\Delta t} \left(\frac{\partial}{\partial t}(\rho\varepsilon\phi) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho\varepsilon U\phi) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho\varepsilon V\phi) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho\varepsilon W\phi) \right) dt dv \\ = \iiint_{VC} \int_t^{t+\Delta t} \left(\frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma \frac{\partial}{\partial x}(\phi) \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\Gamma \frac{\partial}{\partial y}(\phi) \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\Gamma \frac{\partial}{\partial z}(\phi) \right) + S_\phi \right) dt dv \end{aligned}$$

avec $dv = dx dy dz$

Pour aborder l'intégration de l'équation de transport, nous commençons par définir à l'intérieur du domaine de calcul un maillage constitué d'un réseau de points P_{ijk} dans un repère cartésien.

L'approche du type volume de contrôle exige que l'on définisse autour du point P_{ijk} un volume élémentaire sur lequel on va intégrer l'équation aux dérivées partielles. Pour deux points voisins, les volumes de contrôle respectifs doivent posséder une facette commune. Il s'en suit que la réunion de tous les volumes de contrôle couvre l'ensemble du domaine de calcul.

Cette propriété fondamentale va nous permettre de mettre en évidence des propriétés de conservation des flux locaux et globaux, propriétés d'un grand intérêt en ce qui concerne la résolution numérique des équations.

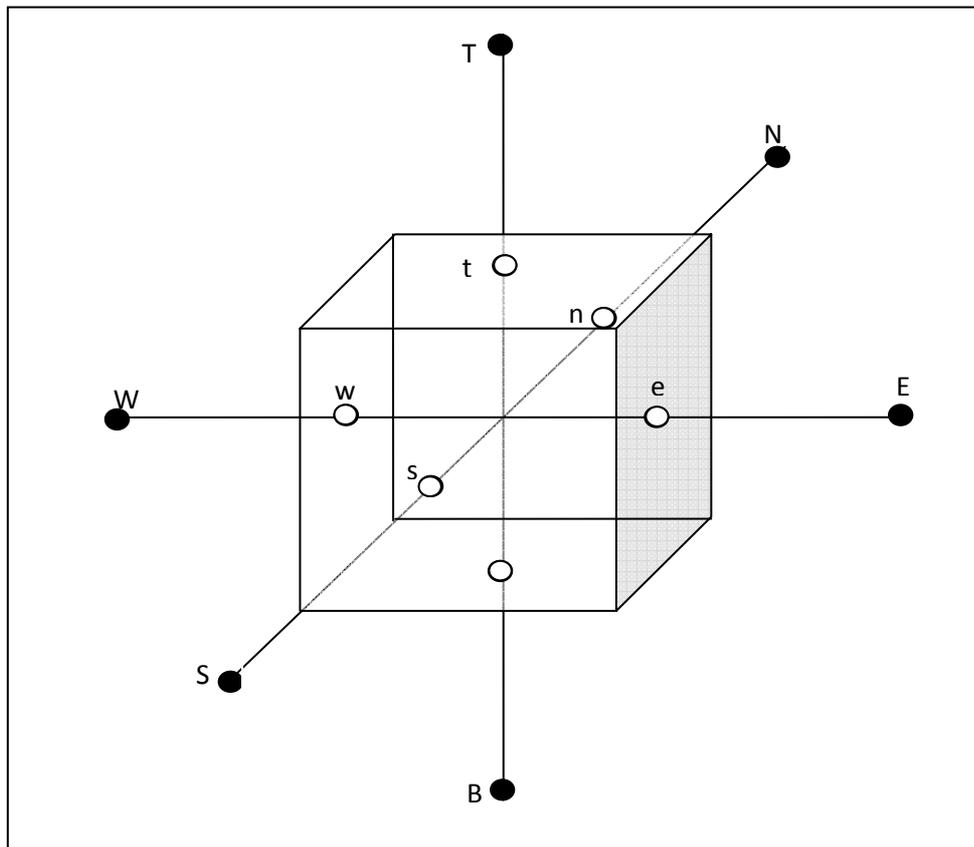


Figure 3.3 : volume de contrôle.

2.7.3. Discrétisation des différents termes de l'équation de transport-diffusion

- Terme de stockage

$$\iiint_{VC} \int_t^{t+\Delta t} \left(\frac{\partial}{\partial t} (\rho \varepsilon \phi) \right) dt dv = (\rho \varepsilon \phi) \Big|_t^{t+\Delta t} \Delta x \Delta y \Delta z = ((\rho \varepsilon \phi)^{t+\Delta t} - (\rho \varepsilon \phi)^t) \Delta x \Delta y \Delta z$$

- Terme convectif longitudinal

$$\int_t^{t+\Delta t} \iiint_{VC} \left(\frac{\partial}{\partial x} (\rho \varepsilon U \phi) \right) dv dt = (\rho \varepsilon U \phi) \Big|_w^e \Delta y \Delta z \Delta t = ((\rho \varepsilon U \phi)_e - (\rho \varepsilon U \phi)_w) \Delta y \Delta z \Delta t$$

$$= (F_e \phi_e - F_w \phi_w) \Delta t$$

Avec : $F_e = \varepsilon \rho U_e \Delta y \Delta z$, $F_w = \varepsilon \rho U_w \Delta y \Delta z$

- Terme convectif transversal

$$\int_t^{t+\Delta t} \iiint_{VC} \left(\frac{\partial}{\partial y} (\rho \varepsilon V \phi) \right) dv dt = (\rho \varepsilon V \phi) \Big|_s^n \Delta x \Delta z \Delta t = ((\rho \varepsilon V \phi)_n - (\rho \varepsilon V \phi)_s) \Delta x \Delta z \Delta t$$

$$= (F_n \phi_n - F_s \phi_s) \Delta t$$

Avec : $F_n = \varepsilon \rho V_n \Delta x \Delta z$, $F_s = \varepsilon \rho V_s \Delta x \Delta z$

- **Terme convectif vertical**

$$\int_t^{t+\Delta t} \iiint_{VC} \left(\frac{\partial}{\partial z} (\rho \varepsilon W \phi) \right) dv dt = (\rho \varepsilon W \phi) \Big|_b^t \Delta x \Delta y \Delta t = ((\rho \varepsilon W \phi)_t - (\rho \varepsilon W \phi)_b) \Delta x \Delta y \Delta t$$

$$= (F_t \phi_t - F_b \phi_b) \Delta t$$

Avec : $F_t = \varepsilon \rho W_t \Delta x \Delta y$, $F_b = \varepsilon \rho W_b \Delta x \Delta y$

- **Terme diffusif longitudinal**

$$\int_t^{t+\Delta t} \iiint_{VC} \left(\frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) \right) dv dt = \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) \Big|_w^e \Delta y \Delta z \Delta t = \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_e - \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_w \right) \Delta y \Delta z \Delta t$$

$$= \left(\Gamma \frac{\phi_E - \phi_P}{\delta x_{PE}} - \Gamma \frac{\phi_P - \phi_W}{\delta x_{WP}} \right) \Delta y \Delta z \Delta t$$

$$= \left(\Gamma_e \frac{\Delta y \Delta z}{\delta x_{PE}} (\phi_E - \phi_P) - \Gamma_w \frac{\Delta y \Delta z}{\delta x_{WP}} (\phi_P - \phi_W) \right) \Delta t$$

$$= (D_e (\phi_E - \phi_P) - D_w (\phi_P - \phi_W)) \Delta t$$

Avec : $D_e = \Gamma_e \frac{\Delta y \Delta z}{\delta x_{PE}}$, $D_w = \Gamma_w \frac{\Delta y \Delta z}{\delta x_{WP}}$

- **Terme diffusif transversal**

$$\int_t^{t+\Delta t} \iiint_{VC} \left(\frac{\partial}{\partial y} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) \right) dv dt = \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) \Big|_s^n \Delta x \Delta z \Delta t = \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} \Big|_n - \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} \Big|_s \right) \Delta x \Delta z \Delta t$$

$$= \left(\Gamma \frac{\phi_N - \phi_P}{\delta y_{PN}} - \Gamma \frac{\phi_P - \phi_S}{\delta y_{SP}} \right) \Delta x \Delta z \Delta t$$

$$= \left(\Gamma_n \frac{\Delta x \Delta z}{\delta y_{PN}} (\phi_N - \phi_P) - \Gamma_s \frac{\Delta x \Delta z}{\delta y_{SP}} (\phi_P - \phi_S) \right) \Delta t$$

$$= (D_n (\phi_N - \phi_P) - D_s (\phi_P - \phi_S)) \Delta t$$

avec : $D_n = \Gamma_n \frac{\Delta x \Delta z}{\delta y_{PN}}$, $D_s = \Gamma_s \frac{\Delta x \Delta z}{\delta y_{SP}}$

- **Terme diffusif vertical**

$$\begin{aligned}
\int_t^{t+\Delta t} \iiint_{VC} \left(\frac{\partial}{\partial z} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial z} \right) \right) dv dt &= \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial z} \right) \Big|_b^t \Delta x \Delta y \Delta t = \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial z} \Big|_t - \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial z} \Big|_b \right) \Delta x \Delta y \Delta t \\
&= \left(\Gamma \frac{\phi_T - \phi_P}{\delta_{Z_{PT}}} - \Gamma \frac{\phi_P - \phi_B}{\delta_{Z_{BP}}} \right) \Delta x \Delta y \Delta t \\
&= \left(\Gamma_t \frac{\Delta x \Delta y}{\delta_{Z_{PT}}} (\phi_T - \phi_P) - \Gamma_b \frac{\Delta x \Delta y}{\delta_{Z_{BP}}} (\phi_P - \phi_B) \right) \Delta t \\
&= (D_t (\phi_T - \phi_P) - D_b (\phi_P - \phi_B)) \Delta t
\end{aligned}$$

$$\text{avec: } D_t = \Gamma_t \frac{\Delta x \Delta y}{\delta_{Z_{PT}}}; D_b = \Gamma_b \frac{\Delta x \Delta y}{\delta_{Z_{BP}}}$$

- **Terme source**

On considère que le terme source S_ϕ est linéaire par rapport à la grandeur ϕ .

$$\int_t^{t+\Delta t} \iiint_{VC} S_\phi dv dt = S_\phi \Delta x \Delta y \Delta z \Delta t = S_P \phi_P + S_u$$

Après une substitution dans l'équation transport et en appliquant un schéma implicite pour le temps, on obtient la forme discrétisée suivante :

$$\begin{aligned}
a_P^0 (\phi_P^{t+\Delta t} - \phi_P^t) &+ (F_e \phi_e - F_w \phi_w) + (F_n \phi_n - F_s \phi_s) + (F_t \phi_t - F_b \phi_b) \\
&= (D_e (\phi_E - \phi_P) - D_w (\phi_P - \phi_W)) + (D_n (\phi_N - \phi_P) - D_s (\phi_P - \phi_S)) \\
&+ (D_t (\phi_T - \phi_P) - D_b (\phi_P - \phi_B)) + (S_P \phi_P + S_u) \Delta x \Delta y \Delta z
\end{aligned}$$

$$\text{Avec : } a_P^0 = \varepsilon \rho \frac{\Delta V}{\Delta t}$$

Le schéma en puissance est choisi pour la discrétisation des termes convectifs. Après un réarrangement on aura la forme finale:

$$\begin{aligned}
a_P \phi_P^{t+\Delta t} &= a_W \phi_W^{t+\Delta t} + a_E \phi_E^{t+\Delta t} + a_S \phi_S^{t+\Delta t} + a_N \phi_N^{t+\Delta t} + a_B \phi_B^{t+\Delta t} + a_T \phi_T^t \\
&+ a_P^0 \phi_P^{t+\Delta t} + S_u \Delta V
\end{aligned}$$

Les coefficients a_i ($i = w, s, b$), a_j ($j = e, n, t$) et a_P sont donnés par :

$$\begin{aligned}
a_i &= D_i \cdot \max[0, (1 - 0.1|Pe_i|)^5] + \max[+F_i, 0] \\
a_j &= D_j \cdot \max[0, (1 - 0.1|Pe_j|)^5] + \max[-F_j, 0]
\end{aligned}$$

$$ap = aw + ae + as + an + ab + at + a_p^0 + S_p \cdot \Delta V$$

2.7.4. Discrétisation de l'équation de pression

L'équation de pression est une équation de transport dont le terme de stockage et les termes convectifs sont nuls :

$$\nabla(\Gamma \cdot \nabla(\phi)) + S_\phi = 0$$

Sa forme discrétisée devient :

$$ap \phi_P^{t+\Delta t} = aw \phi_W^{t+\Delta t} + ae \phi_E^{t+\Delta t} + as \phi_S^{t+\Delta t} + an \phi_N^{t+\Delta t} + ab \phi_B^{t+\Delta t} + at \phi_T^{t+\Delta t} + S_p \Delta V$$

D'où les coefficients $ai (i = w, e, s, n, b, t)$ sont donnés par : $ai = D_i$.

2.7.5. Résolution du système d'équations

Après la discrétisation de l'équation du transport on obtient un système d'équations algébriques linéaires. La complexité de la résolution et la taille des résultats dépendent, de la dimensionnalité du problème, du nombre de nœuds de la grille et de la manière de discrétisation.

Dans ce travail on a utilisé la méthode ADI (alternating directions implicit) pour résoudre le système d'équations résultant de la discrétisation de l'équation du transport et la méthode itérative de Gauss-Seidel pour résoudre celui résultant de la discrétisation de l'équation de pression (équation de poisson).

- **Méthode ADI**

Cette méthode est proposée par *Peaceman et Rachford* en 1955. C'est une méthode à schéma implicite, elle est stable quelque soit la valeur de Δx et Δt . Cette méthode est largement utilisée dans la résolution des problèmes de la convection naturelle en régime transitoire. Le domaine de calcul est discrétisé selon un maillage uniforme suivant les trois directions de l'espace. Pour chaque pas de temps l'ADI donne lieu à trois systèmes matriciels tridiagonaux. Chaque système est un résultat d'une discrétisation implicite selon une direction et une discrétisation explicite selon les deux autres directions; autrement dit, pour chaque étape de temps, la solution est obtenue en balayant le domaine de calcul dans la direction des x puis dans celle des y et puis dans celle des z .

– 1^{er} direction

Une discrétisation implicite selon la direction des x et explicite selon les deux autres directions (y, z) nous permet d'écrire l'équation de transport pour un point P_{ijk} du domaine sous la forme :

$$-aw_{i,j,k} \phi_{i-1,j,k}^{t+\frac{1}{3}\Delta t} + ap_{i,j,k} \phi_{i,j,k}^{t+\frac{1}{3}\Delta t} - ae_{i,j,k} \phi_{i+1,j,k}^{t+\frac{1}{3}\Delta t} = +as_{i,j,k} \phi_{i,j-1,k}^t + an_{i,j,k} \phi_{i,j+1,k}^t + ab_{i,j,k} \phi_{i,j,k-1}^t + at_{i,j,k} \phi_{i,j,k+1}^t + ap_{i,j,k}^0 \phi_{i,i,k}^t + S_{P_{i,j,k}} \Delta V$$

La solution de ces systèmes tridiagonaux est plus facile que la solution de ceux dans les méthodes implicites.

– 2^{ème} direction

Pour cette direction, la discrétisation sera implicite selon la direction des y et explicite selon les deux autres directions (x, z), l'équation de transport pour un point P_{ijk} aura la forme :

$$-as_{i,j,k} \phi_{i,j-1,k}^{t+\frac{2}{3}\Delta t} + ap_{i,j,k} \phi_{i,j,k}^{t+\frac{2}{3}\Delta t} - an_{i,j,k} \phi_{i,j+1,k}^{t+\frac{2}{3}\Delta t} = +aw_{i,j,k} \phi_{i-1,j,k}^{t+\frac{1}{3}\Delta t} + ae_{i,j,k} \phi_{i+1,j,k}^{t+\frac{1}{3}\Delta t} + ab_{i,j,k} \phi_{i,j,k-1}^{t+\frac{1}{3}\Delta t} + at_{i,j,k} \phi_{i,j,k+1}^{t+\frac{1}{3}\Delta t} + ap_{i,j,k}^0 \phi_{i,i,k}^{t+\frac{1}{3}\Delta t} + S_{P_{i,j,k}} \Delta V$$

– 3^{ème} direction

En fin Pour la 3^{ème} direction, la discrétisation sera implicite selon la direction des z et explicite selon les deux autres directions (x, y), l'équation de transport pour un point P_{ijk} aura la forme :

$$-ab_{i,j,k} \phi_{i,j,k-1}^{t+\Delta t} + ap_{i,j,k} \phi_{i,j,k}^{t+\Delta t} - at_{i,j,k} \phi_{i,j,k+1}^{t+\frac{2}{3}\Delta t} = +aw_{i,j,k} \phi_{i-1,j,k}^{t+\frac{2}{3}\Delta t} + ae_{i,j,k} \phi_{i+1,j,k}^{t+\frac{2}{3}\Delta t} + as_{i,j,k} \phi_{i,j-1,k}^{t+\frac{2}{3}\Delta t} + an_{i,j,k} \phi_{i,j+1,k}^{t+\frac{2}{3}\Delta t} + ap_{i,j,k}^0 \phi_{i,i,k}^{t+\frac{2}{3}\Delta t} + S_{P_{i,j,k}} \Delta V$$

• Méthode de Gauss Seidel

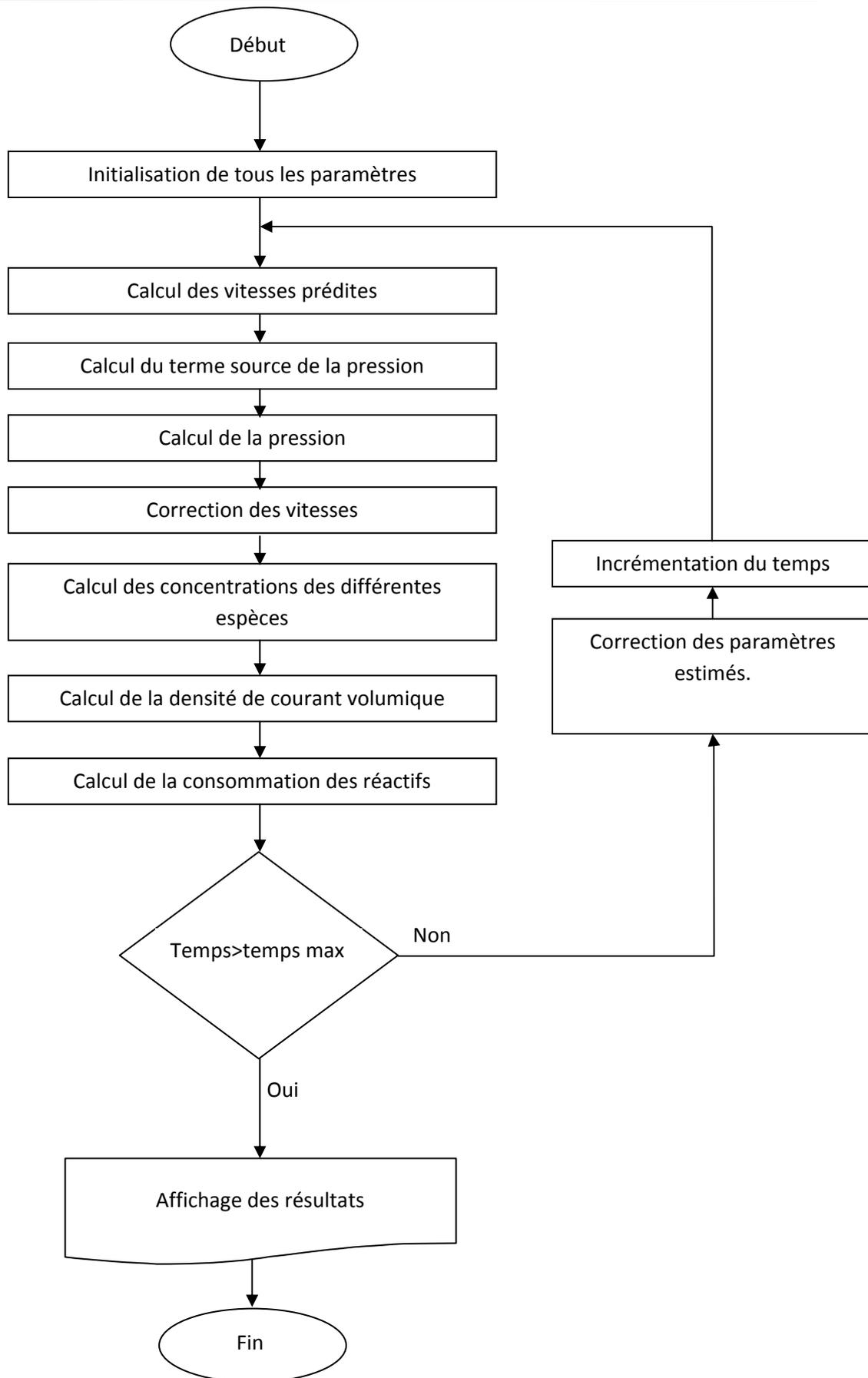
La méthode de Gauss Seidel consiste à estimer une solution ($\phi_{i,j,k}^n$) dans l'itération n , pour calculer ($\phi_{i,j,k}^{n+1}$) à partir de:

$$\phi_{i,j,k}^{n+1} = (aw_{i,j,k}\phi_{i-1,j,k}^n + ae_{i,j,k}\phi_{i+1,j,k}^n + as_{i,j,k}\phi_{i,j-1,k}^n + an_{i,j,k}\phi_{i,j+1,k}^n + ab_{i,j,k}\phi_{i,j-1,k}^n + at_{i,j,k}\phi_{i,j,k+1}^n + b_{i,j,k})/ap_{i,j,k}$$

La condition de convergence est : $|\phi_{i,j,k}^{n+1} - \phi_{i,j,k}^n| \leq \varepsilon$

Si la condition n'est pas satisfaite, on pose que $\phi_{i,j,k}^n = \phi_{i,j,k}^{n+1}$, et on recalcule par la même formule jusqu'à la vérification la condition de convergence.

Après la discrétisation des équations gouvernantes du problème, Un programme en Fortran « Compaq Visual Fortran 6 » est réalisé pour les résoudre. Les résultats obtenus seront discutées dans le chapitre suivant.



Organigramme de calcul

CHAPITRE IV

RESULTATS ET DISCUSSIONS

4.1. Introduction

Dans le chapitre précédent, les équations régissant les phénomènes de transfert de masse, dans les différentes parties (canaux, GDL, catalyseurs et membrane) d'une pile à combustible du type PEMFC, ont été discrétisées afin d'étudier l'influence de la vitesse d'écoulement et de la géométrie des plaques bipolaires (largeur du canal, installation d'un obstacle dans le canal d'écoulement) sur la distribution et la consommation des réactifs. L'écoulement a été supposé laminaire, incompressible et isotherme. La simulation nous a permis d'obtenir les champs de distribution de vitesse, de concentration des différentes espèces dans les différentes parties de la pile, ainsi que leur consommation ou production, en fonction du temps et de l'emplacement (x, y, z). Dans ce chapitre, les résultats obtenus seront présentés et discutés.

4.2. Distribution des vitesses

Le profil des vitesses est laminaire (profil de Poiseuille) où la vitesse la plus élevée est située au centre du canal, ce profil est maintenu tout le long du canal. Les vitesses des côtés, cathodique et anodique sont égales. La vitesse d'écoulement dans la GDL est négligeable à cause de la faible porosité, donc dans cette zone, le transfert de masse par diffusion devient plus important que celui par convection (figures 4.1, 4.2, 4.3 et 4.4).

Par l'installation transversale d'une chicane, dans le canal (figure 4.3), les gaz peuvent être obligés de s'infiltrer dans la GDL. La section du passage plus étroite du canal amène plus de gaz à la couche de diffusion, mais cause une déflexion d'écoulement derrière la chicane qui fait sortir le gaz de la GDL. Le champ des vitesses, dans la région entre la chicane et le catalyseur, montre clairement la déviation de l'écoulement vers la couche de diffusion des gaz, ce qui signifie l'augmentation de la portion des réactifs qui passe par cette zone. Cependant, en aval, et à cause de la déflexion, l'écoulement se déplace et passe principalement entre la couche de diffusion et le collecteur du courant (canal) et peu de gaz existe dans la couche de diffusion (GDL).

L'installation d'un obstacle, au lieu d'une chicane (figure 4.4), dans le canal peut réduire l'effet de la déflexion par le passage du gaz entre le collecteur du courant et l'obstacle. La vitesse en aval de l'obstacle est plus faible que celle en amont à cause de la perte de charge produite.

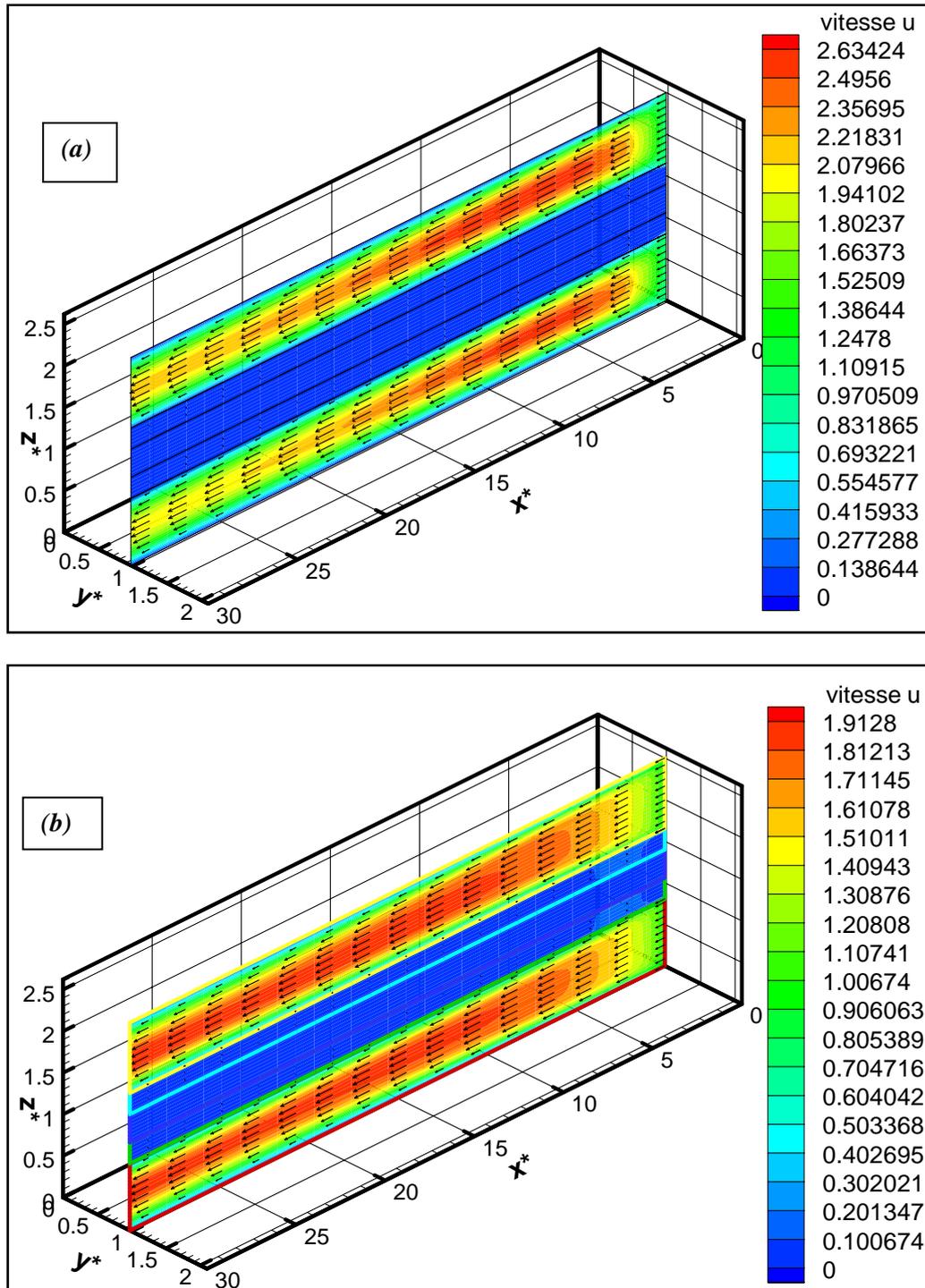


Figure.4.1. répartition du champ des vitesses pour un canal simple , $\lambda=2$.

a: $Re=100$; b: $Re=1000$

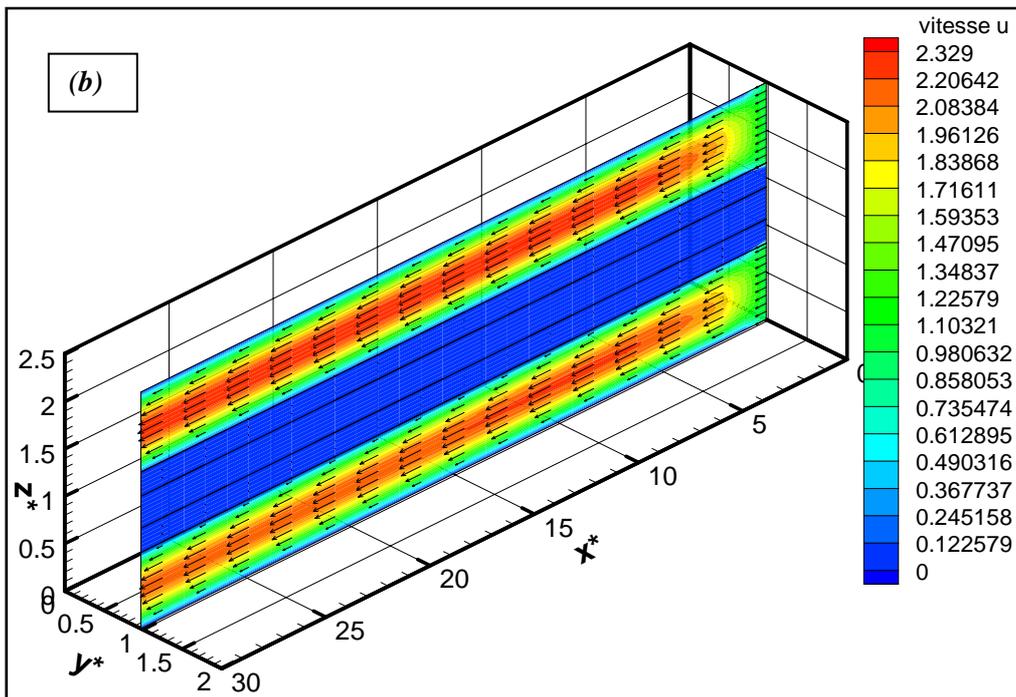
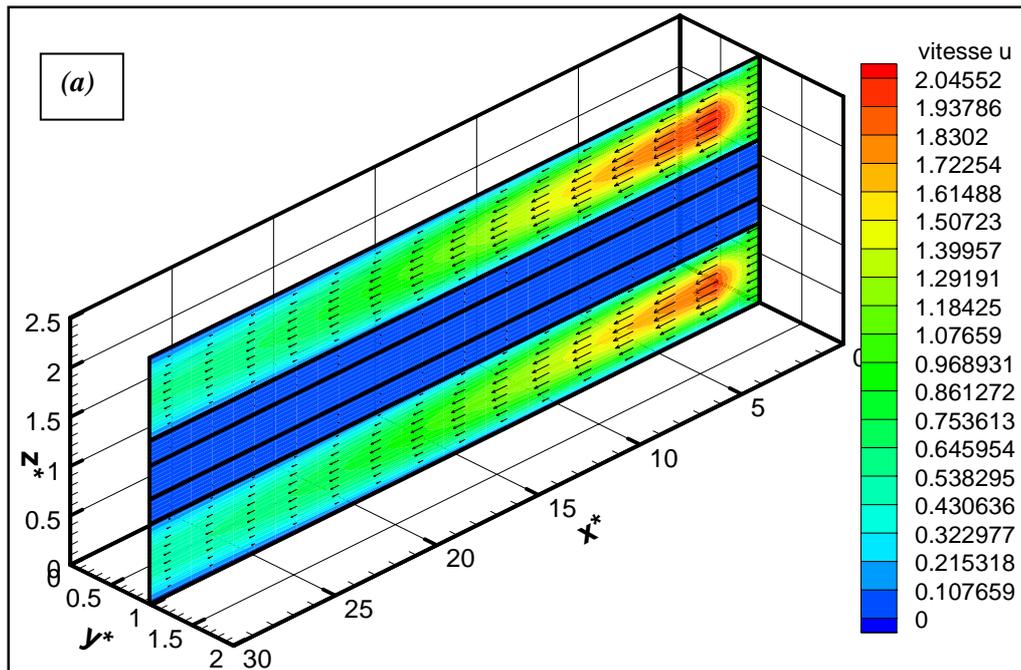


Figure.4.2. répartition du champ des vitesses pour un canal simple , $\lambda=4$.

a : $Re=100$, b : $Re=1000$.

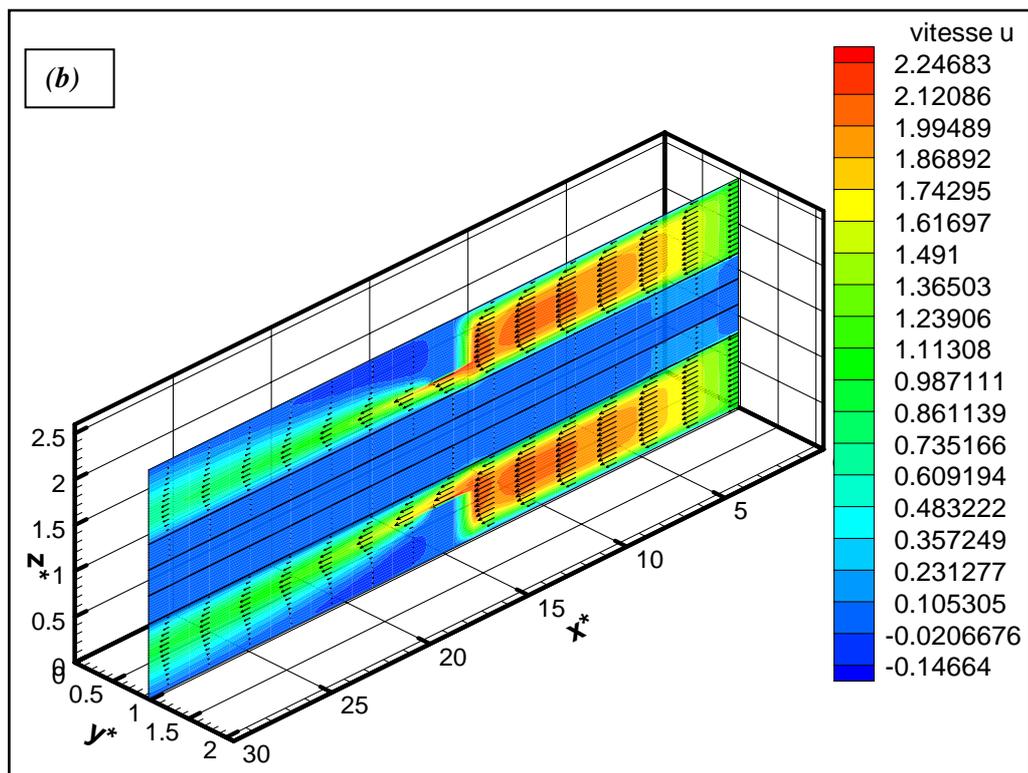
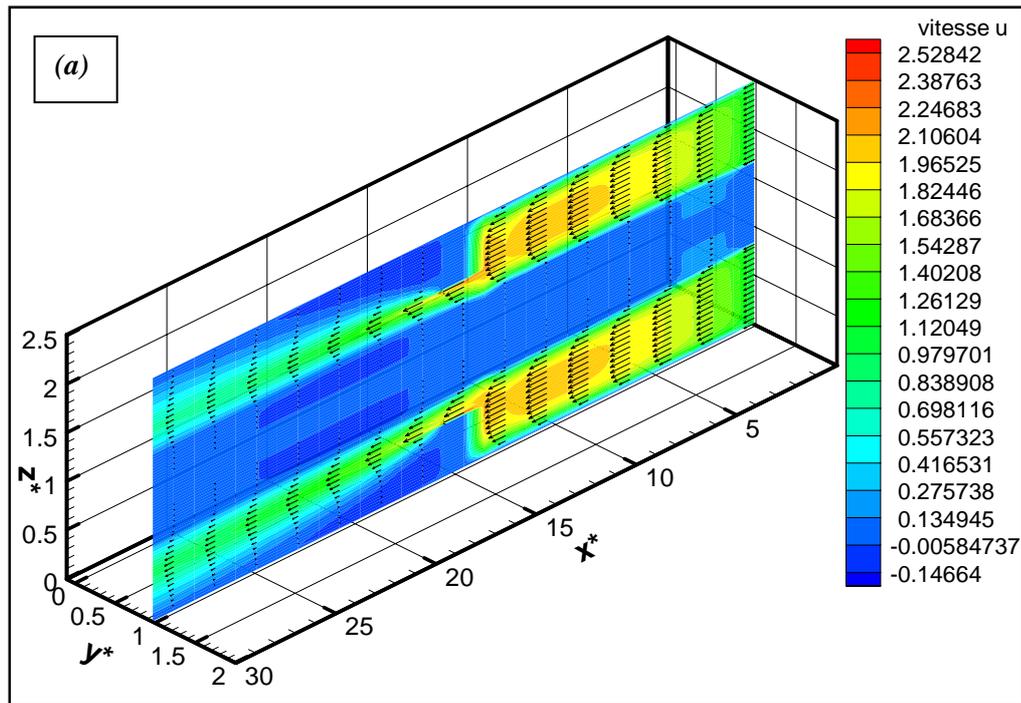


Figure 4.3. Répartition du champ des vitesses pour un canal avec chicane, $\lambda=2$,

a: $Re=100$; b: $Re=1000$

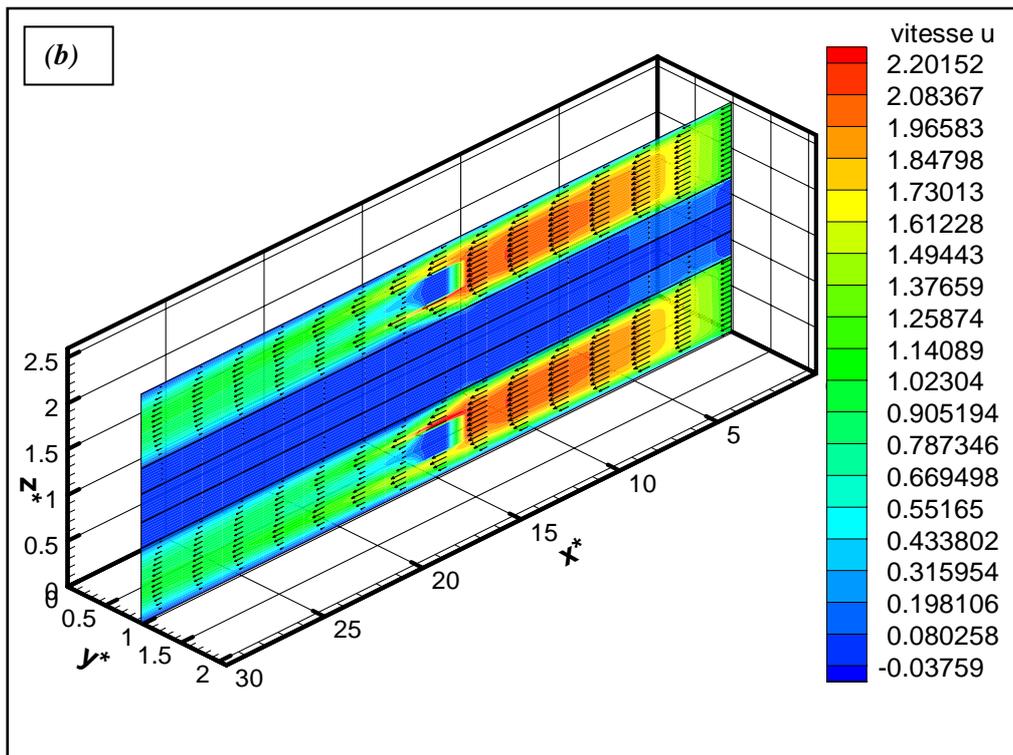
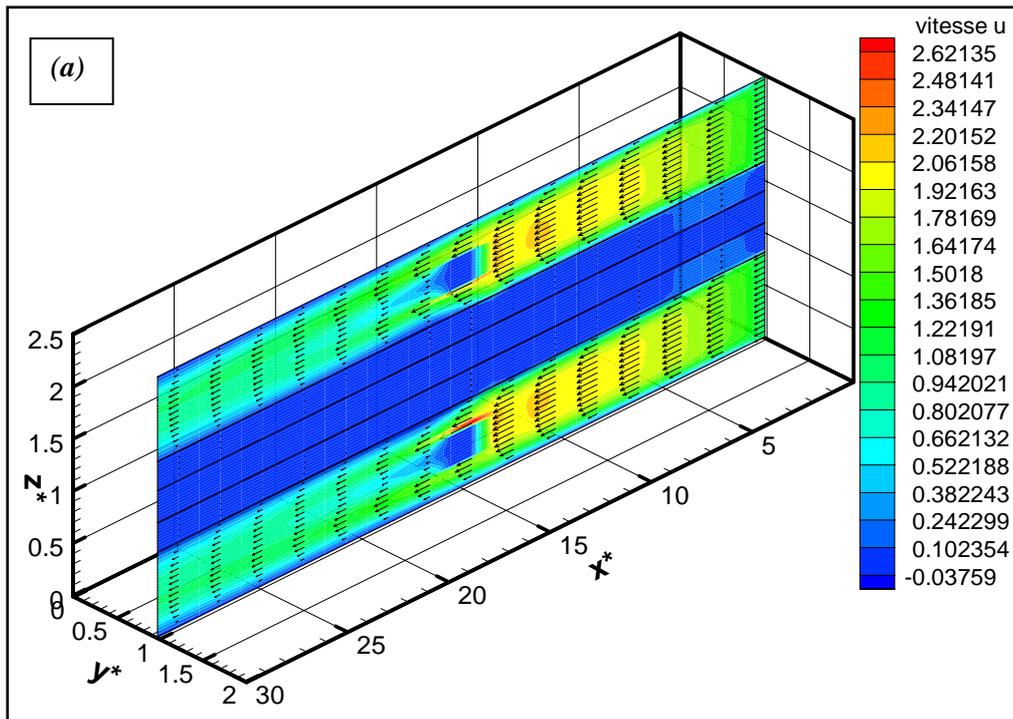


Figure 4.4. Répartition du champ des vitesses pour un canal avec obstacle, $\lambda=2$

a: $Re=100$; b: $Re=1000$

Le profil des vitesses dans la GDL, à un nombre de Reynolds $Re=1000$, est montré sur la figure 4.5. La figure montre le champ des vitesses dans le plan transversal (YOZ) de la GDL à $x^*=15$ et $x^*=21$. Sur la figure 4.5.a, les vitesses sont dirigées du canal vers la couche de catalyseur, pour que le réactif soit reçu et consommé dans cette couche. La figure 4.5.b montre le retour d'écoulement vers le canal, d'où les vitesses sont dirigées de la couche de catalyseur vers le canal, pour évacuer l'eau produite.

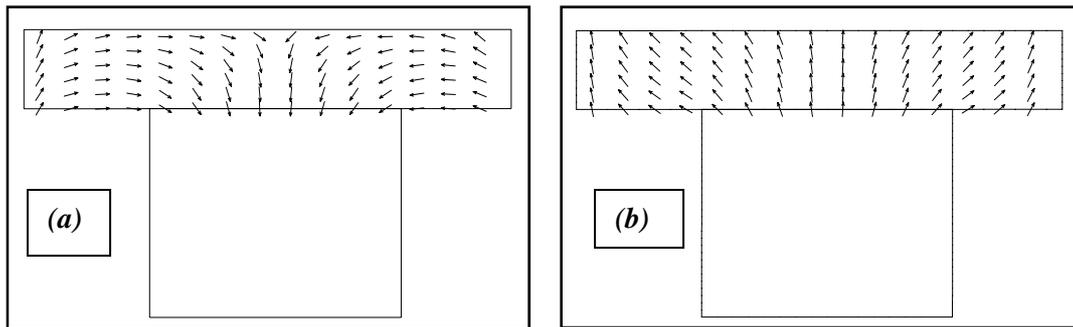


Figure 4.5. Répartition du champ de vitesses dans la couche de diffusion ($\lambda=2$, $Re=1000$) :
(a: $x=15$ mm ; b : $x=21$ mm).

4.3. Distribution d'hydrogène

La distribution détaillée de concentration molaire et de consommation d'hydrogène sont montrées sur les figures de 4.6 à 4.14.

Dans tous les cas étudiés, la concentration d'hydrogène diminue graduellement de l'entrée à la sortie du canal à cause de la consommation des réactifs dans la couche de catalyseur. Dans la GDL, la concentration d'hydrogène sous les parties pleines (nervures) de la plaque bipolaire est plus faible que celle sous la partie creuse (canal).

La concentration d'hydrogène dans la couche de catalyseur est équilibrée par la quantité d'hydrogène, reçue du canal d'écoulement à travers la couche de diffusion sous l'effet du gradient de concentration, qui récompense la quantité d'hydrogène consommé.

En ce qui concerne la distribution de la concentration d'hydrogène dans la GDL pour une configuration simple du canal, on remarque qu'à un faible nombre de Reynolds, et à cause du faible taux de consommation, plus d'hydrogène est transporté, par diffusion, vers les zones sous nervures, ce qui conduit à une uniformité de distribution de concentration de ce

réactif (figures 4.6.a et 4.7.a). A un nombre de Reynolds élevé, la concentration d'hydrogène sous les nervures atteint des valeurs proches de zéro, et puisque la densité du courant locale dépend directement des concentrations des réactifs, la distribution locale de densité de courant sous les nervures est beaucoup moins importante que sous le canal (figures 4.6.b et 4.7.b).

Donc, on peut dire que la diminution de la vitesse d'écoulement mène à une distribution plus uniforme des réactifs dans la GDL.

Pour examiner l'effet du rapport de largeur λ (λ =largeur du canal / largeur de la nervure) sur le transport et la consommation d'hydrogène, les champs de concentration et de consommation d'hydrogène pour deux rapports de largeur ($\lambda=2$) et ($\lambda=4$) sont étudiés ; et ceci pour deux nombre de Reynolds : $Re=100$ et $Re =1000$.

A un nombre de Reynolds élevé, les résultats indiquent que pour une cellule avec des canaux plus larges ($\lambda=4$) (Figure 4.7.b), la distribution d'hydrogène est plus uniforme, Ceci signifie que le gradient de la concentration d'hydrogène dans le cas des canaux plus étroits ($\lambda=2$) est plus évident (Figure 4.6.b).

A un faible nombre de Reynolds, les forces convectives deviennent plus faibles et la composante longitudinale du gradient de concentration devient plus importante, ce qui conduit à une concentration d'hydrogène très faible à la sortie du canal; ceci explique la faible consommation obtenue à la sortie.

On remarque aussi que la consommation locale des réactifs, dans le cas des canaux larges (Figures 4.9) est plus élevée et plus uniforme que celle dans le cas des canaux plus étroits (Figure 4.8). Donc, on peut conclure que :

- L'uniformité de distribution des réactifs dans la couche de diffusion dans le cas des canaux plus larges conduit à une consommation plus uniforme.
- L'élargissement des canaux augmente la surface d'alimentation de la GDL en réactif, ce qui augmente le taux de consommation.

Donc, la géométrie à canaux larges est plus pratique que celle à des canaux étroits.

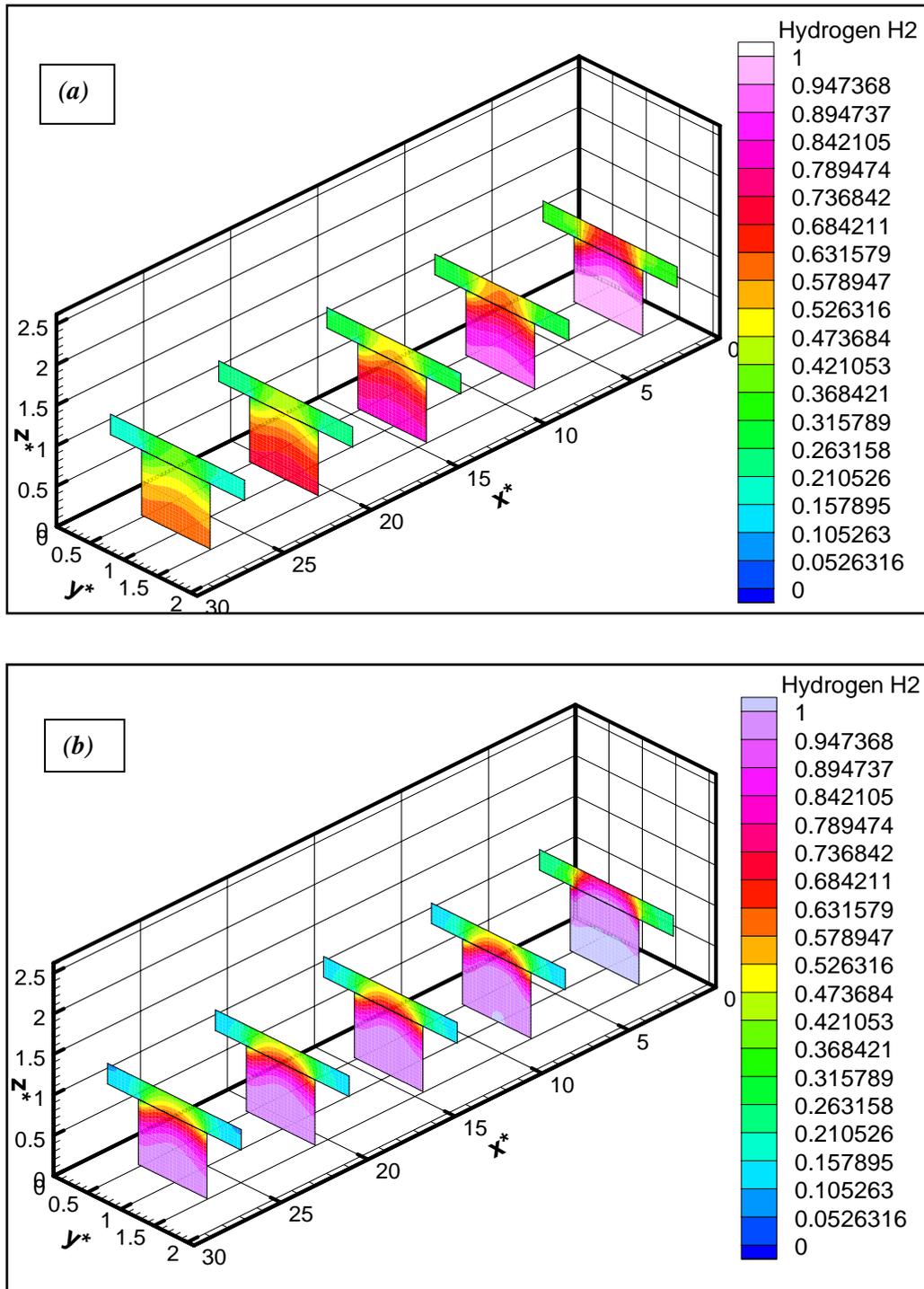


Figure 4.6: répartition du champ des concentrations d'hydrogène pour un canal simple, $\lambda=2$.

a : $Re=100$; b : $Re=1000$

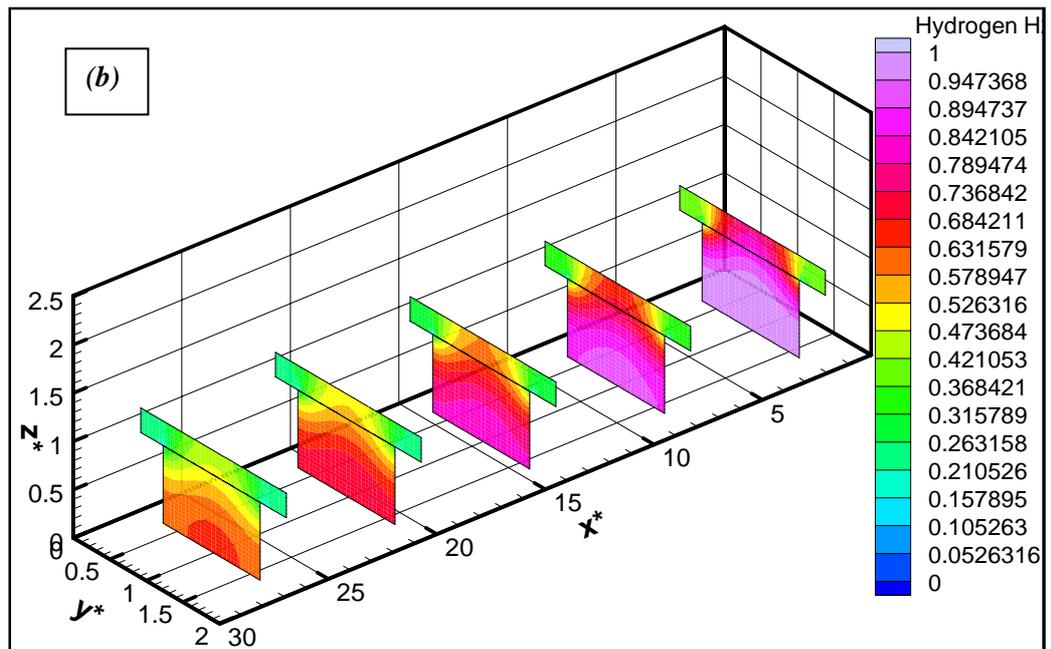
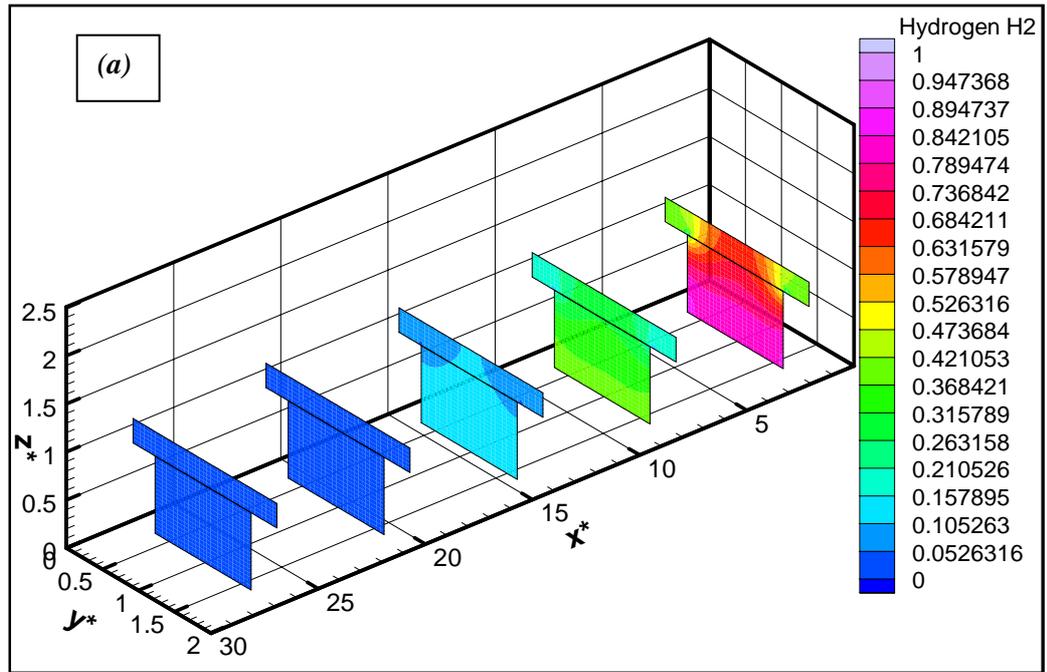


Figure 4.7: répartition du champ des concentrations d'hydrogène pour un canal simple, $\lambda=4$

a: $Re=100$; b: $Re=1000$

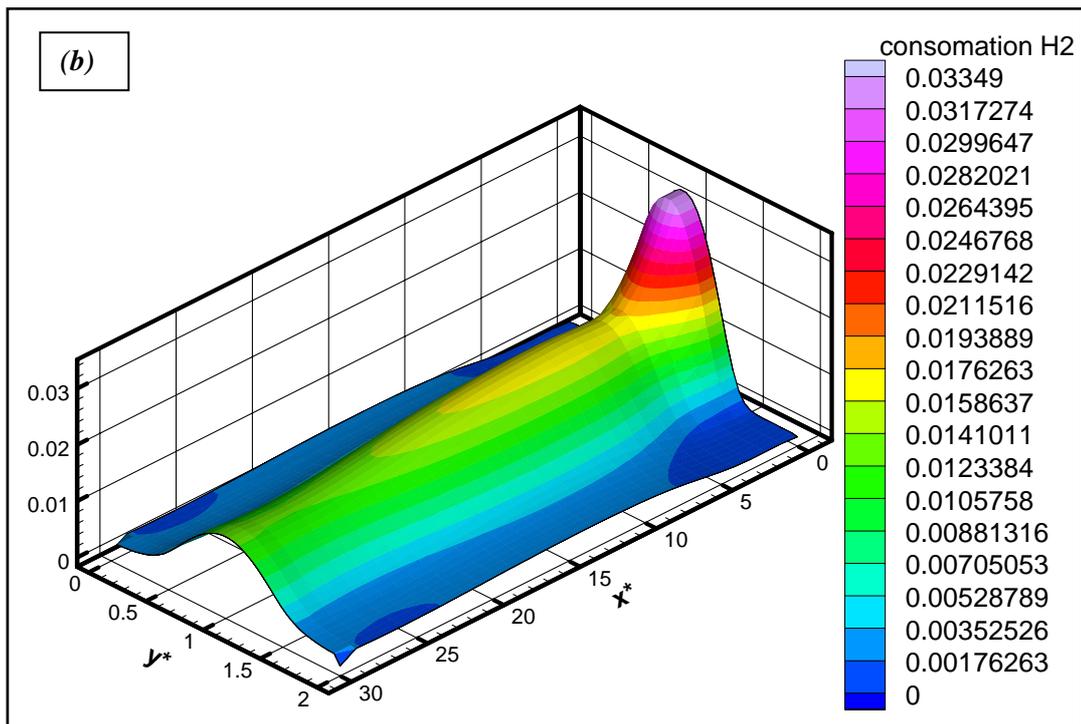
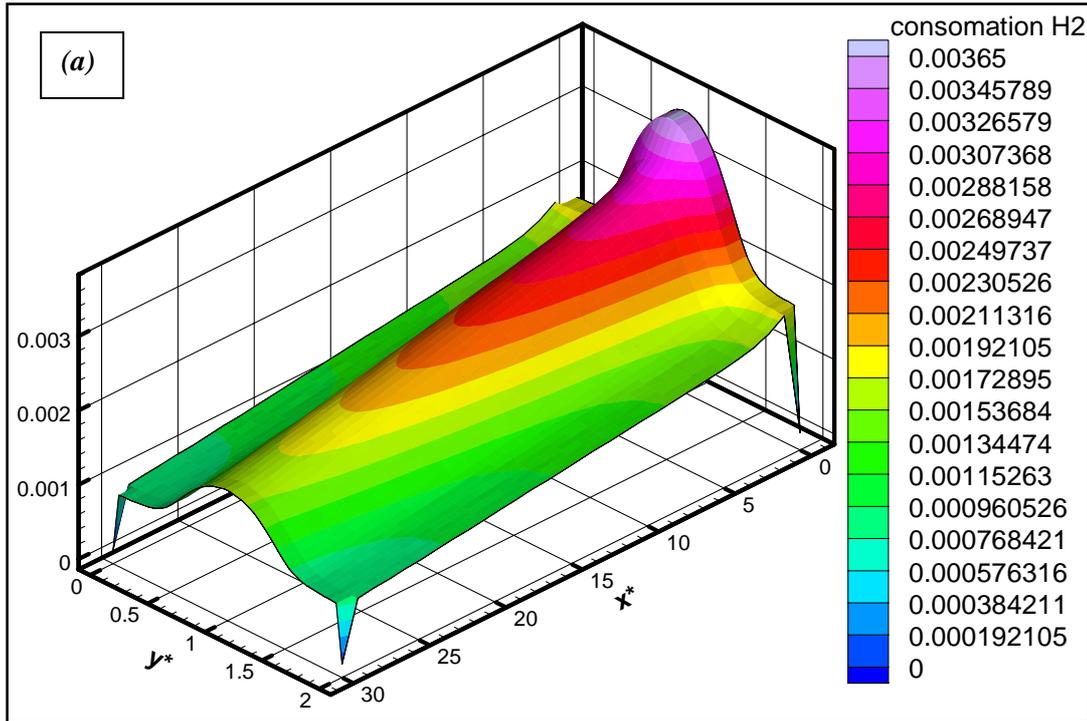


Figure 4.8: champ de consommation d'hydrogène pour un canal simple, $\lambda=2$

a: $Re=100$; b: $Re=1000$

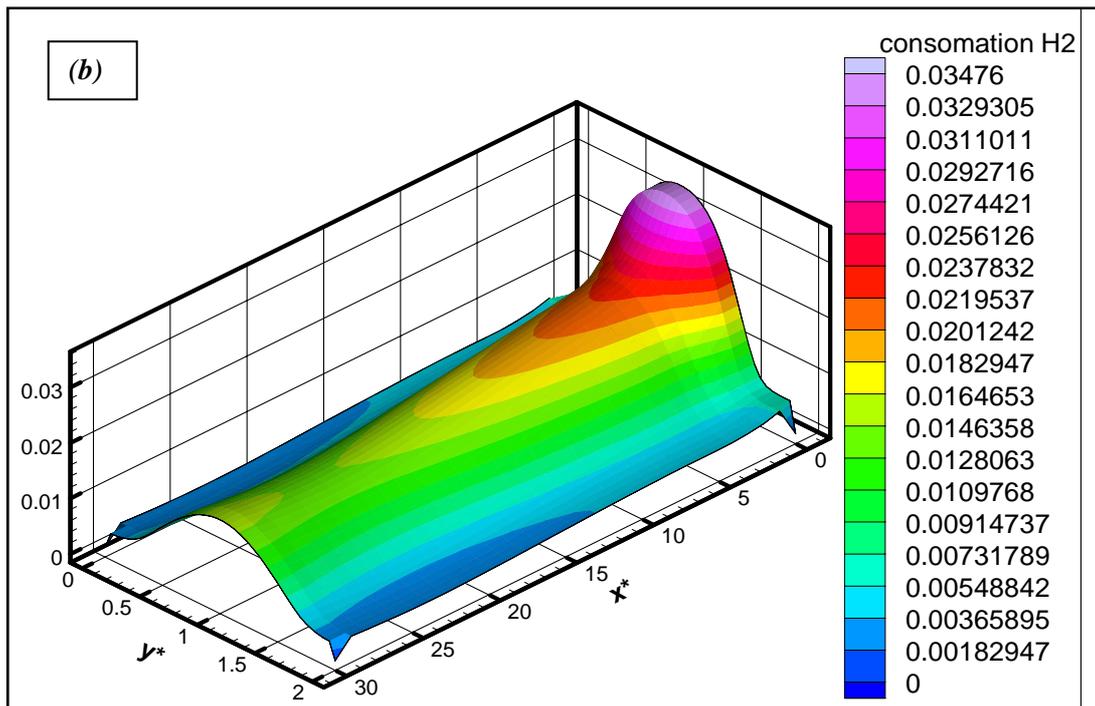
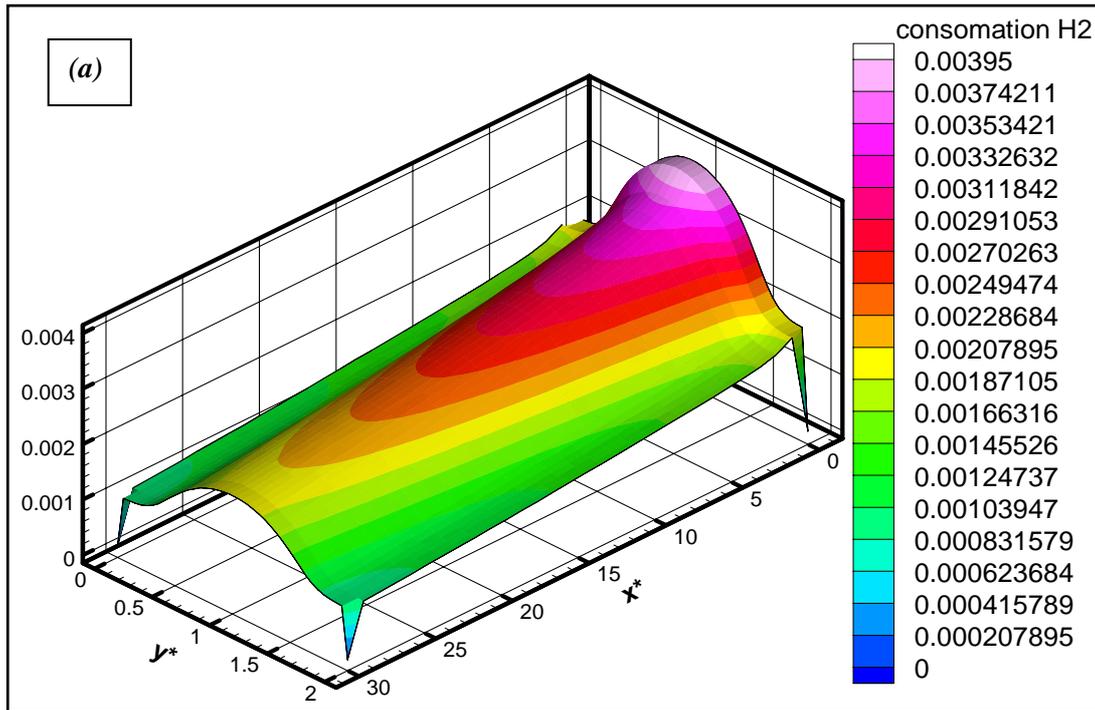


Figure 4.9: champ de consommation d'hydrogène pour un canal simple, $\lambda=4$
 a: $Re=100$; b: $Re=1000$

En ce qui concerne l'effet de l'installation d'une chicane, dans le canal d'écoulement sur la consommation des réactifs, il a été constaté que la consommation d'hydrogène diminue généralement le long du catalyseur, mais avec un pic qui se produit autour de l'endroit de la chicane (figures 4.10.a et 4.11.a). Ce pic est provoqué par la force convective due à la diminution de la section d'écoulement qui augmente le transfert de masse.

Une meilleure consommation est obtenue dans la région autour du pic. Ce phénomène signifie que la meilleure performance de la cellule est obtenue autour de la chicane. Ce ci est dû aux gaz bloqués par la chicane installé transversalement dans le canal d'écoulement, et qui sont obligés de traverser la couche de diffusion des gaz (GDL) ; ce qui augmente le taux de la réaction chimique sur la surface du catalyseur. A cause de la déflexion d'écoulement, la consommation maximale se produit juste en amont de la chicane, et moins de réactif coule dans la GDL en aval. La déflexion est due au transport plus efficace du réactif et au taux élevé de la réaction chimique. L'effet de déflexion réduit également la consommation des réactifs en aval de la chicane comme il est montré sur la figure.4.14.a.

Dans le but de réduire l'effet de la déflexion et d'obliger plus de gaz de s'écouler dans la GDL, la chicane est remplacée par un obstacle (figures .4.10.b et 4.11.b). L'écoulement du gaz peut être forcé pour pénétrer dans la couche de diffusion, à cause de l'espace étroit entre elle et l'obstacle. L'effet de déflexion, qui provoque la sortie des gaz du GDL, peut être réduit par le passage des gaz entre le collecteur du courant et l'obstacle.

Comme il est montré sur la figure.4.13.b, en aval de l'obstacle dans le cas d'un nombre de Reynolds élevé, la consommation augmente parce que la déflexion existe à peine, mais moins de réactif coule dans la GDL.

Dans le cas des faibles nombres de Reynolds, le remplacement de la chicane par un obstacle ne change presque rien, et la consommation des réactifs reste la même (figures 4.12.a et 4.13.a).

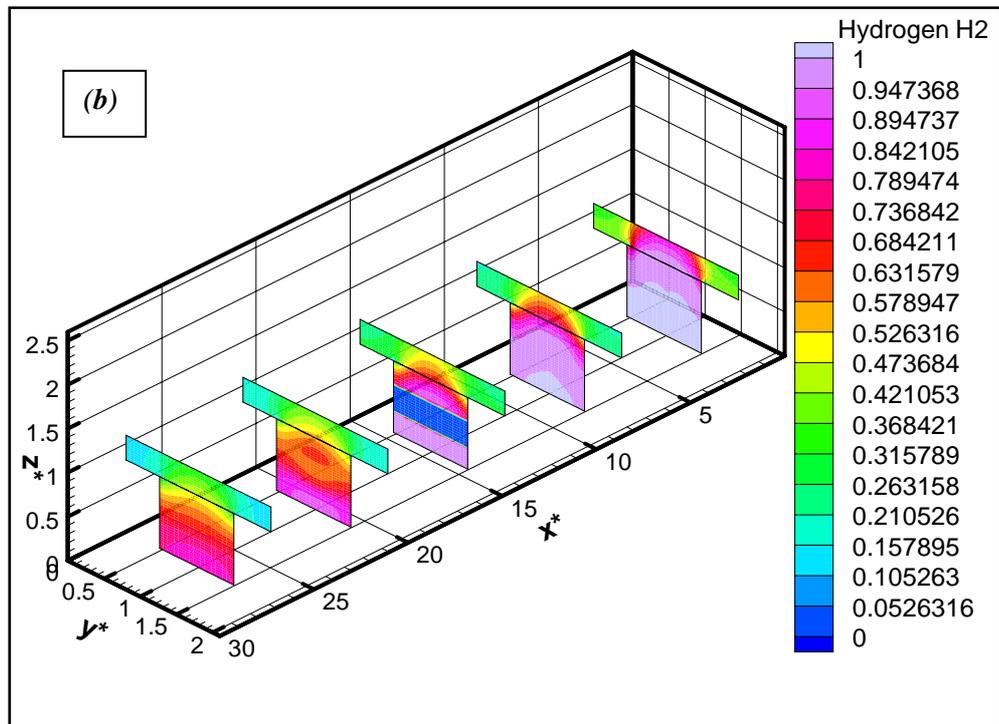
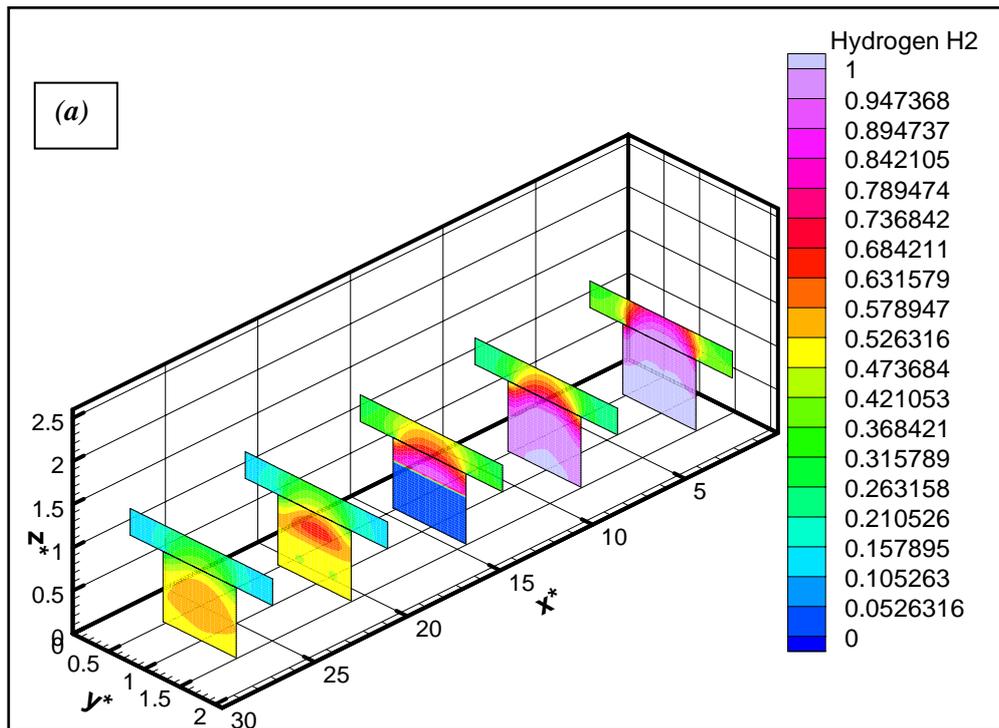


Figure 4.10: répartition du champ des concentrations d'hydrogène pour $Re=1000$, $\lambda=2$

a: canal avec chicane; *b*: canal avec obstacle.

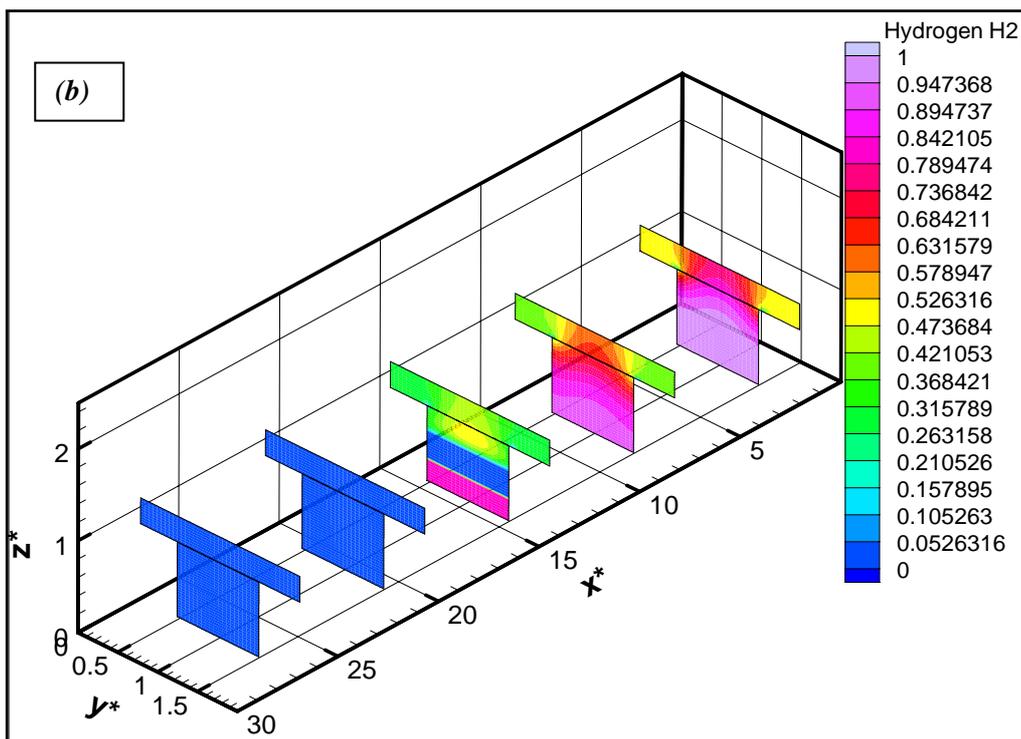
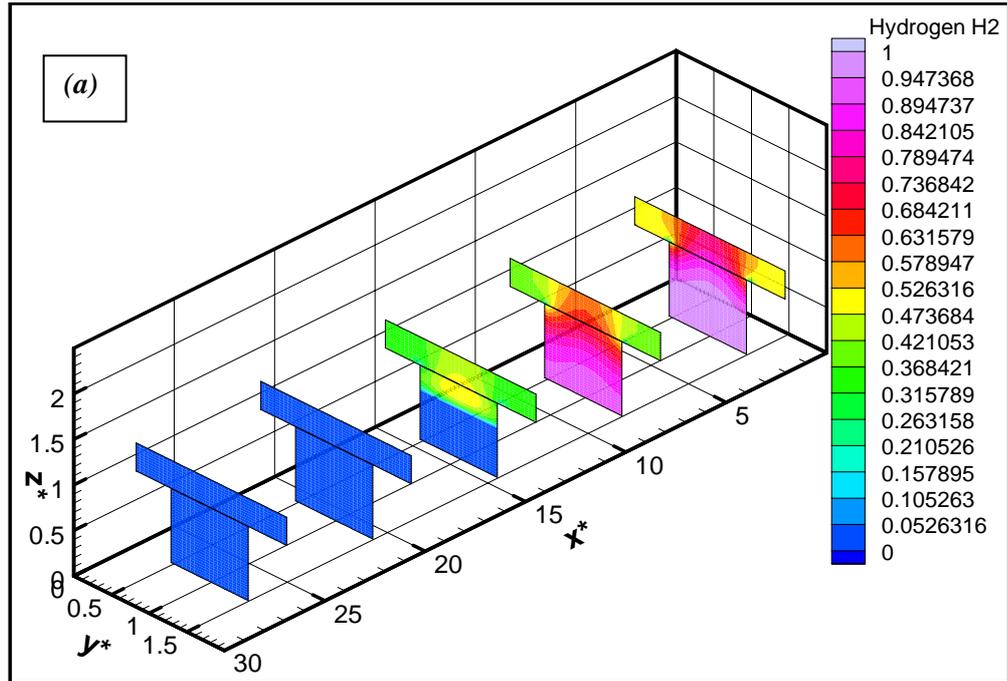


Figure 4.11: répartition du champ des concentrations d'hydrogène pour $Re=100$, $\lambda=2$

a: canal avec chicane; *b*: canal avec obstacle.

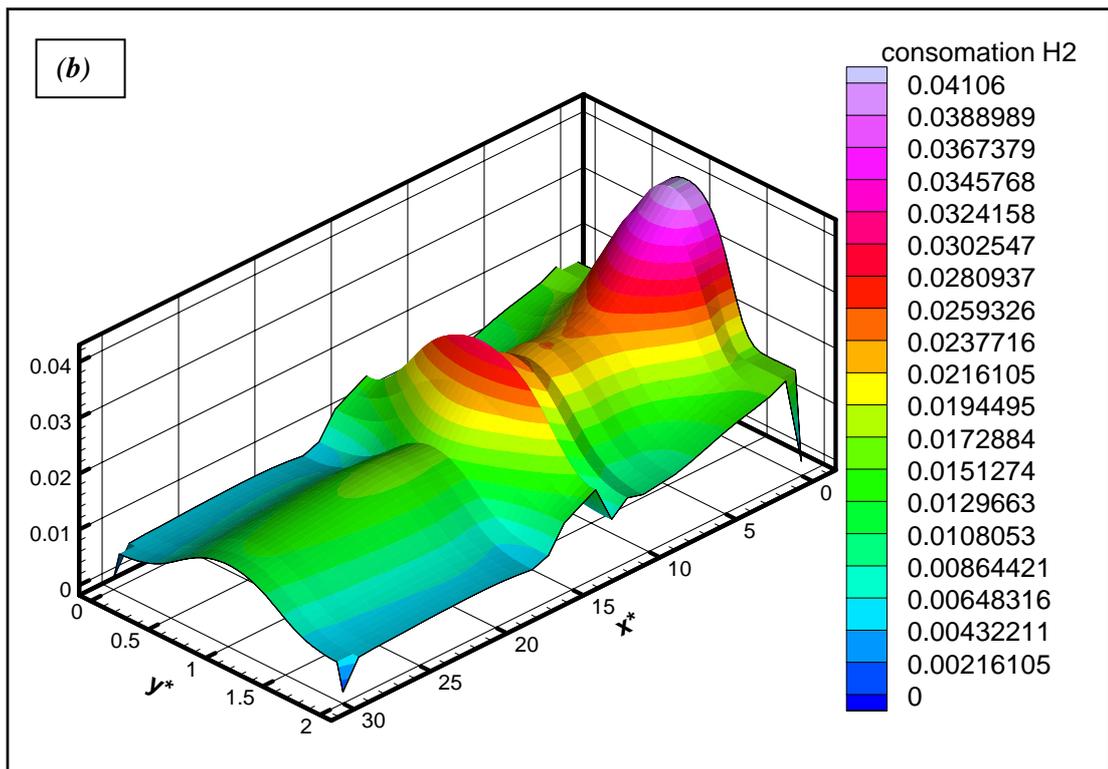
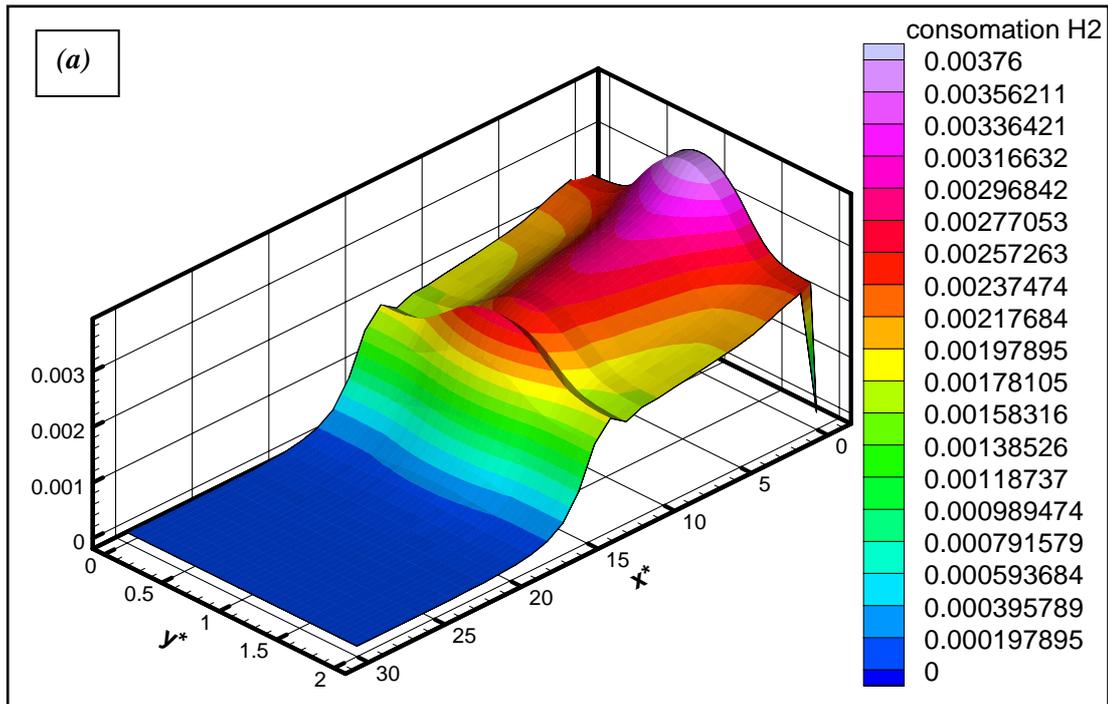


Figure 4.12: champ de consommation d'hydrogène pour un canal avec chicane, $\lambda=2$

a: $Re=100$; b: $Re=1000$.

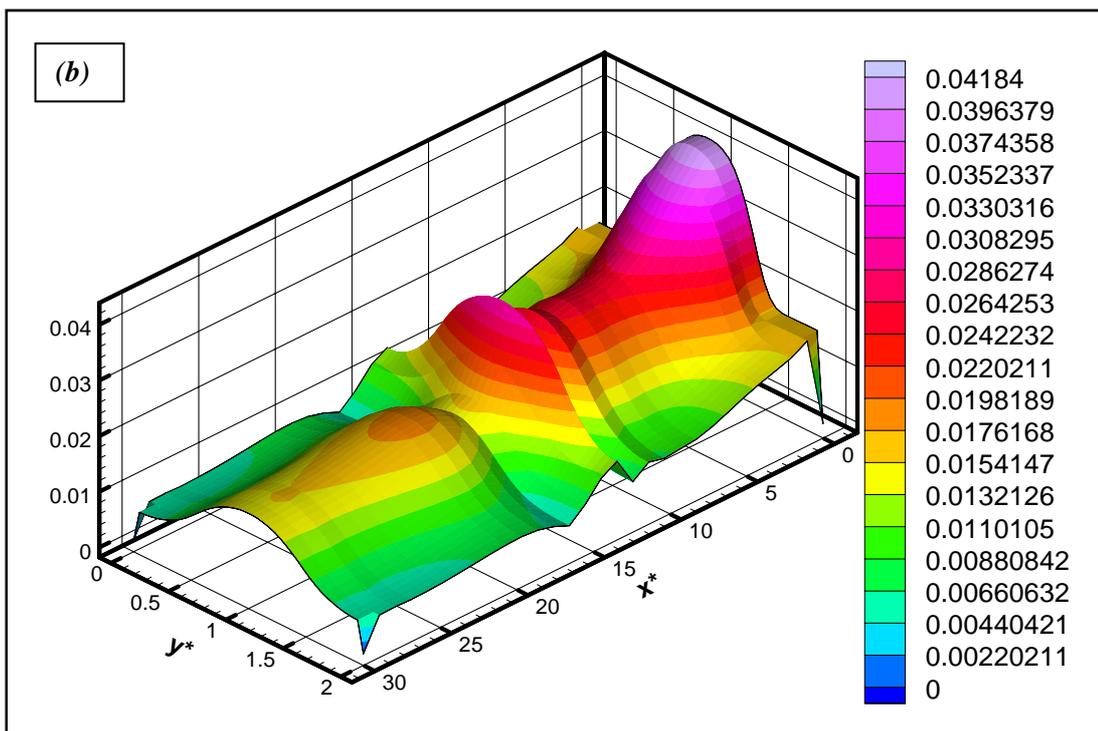
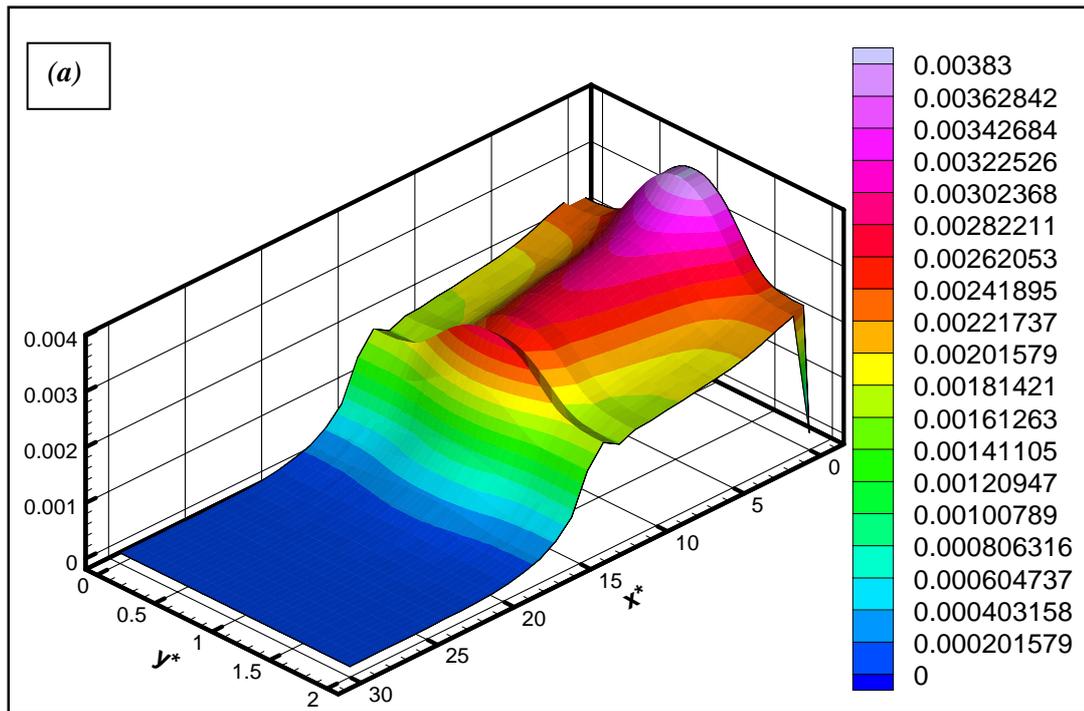


Figure 4.13: champ de consommation d'hydrogène pour un canal avec obstacle, $\lambda=2$

a: $Re=100$; b: $Re=1000$.

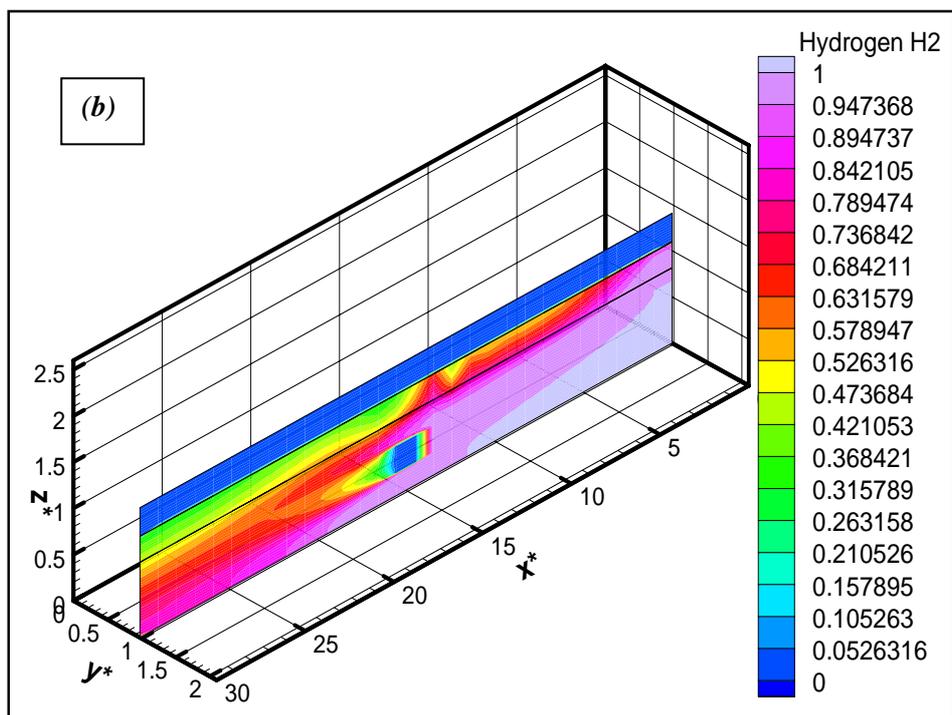
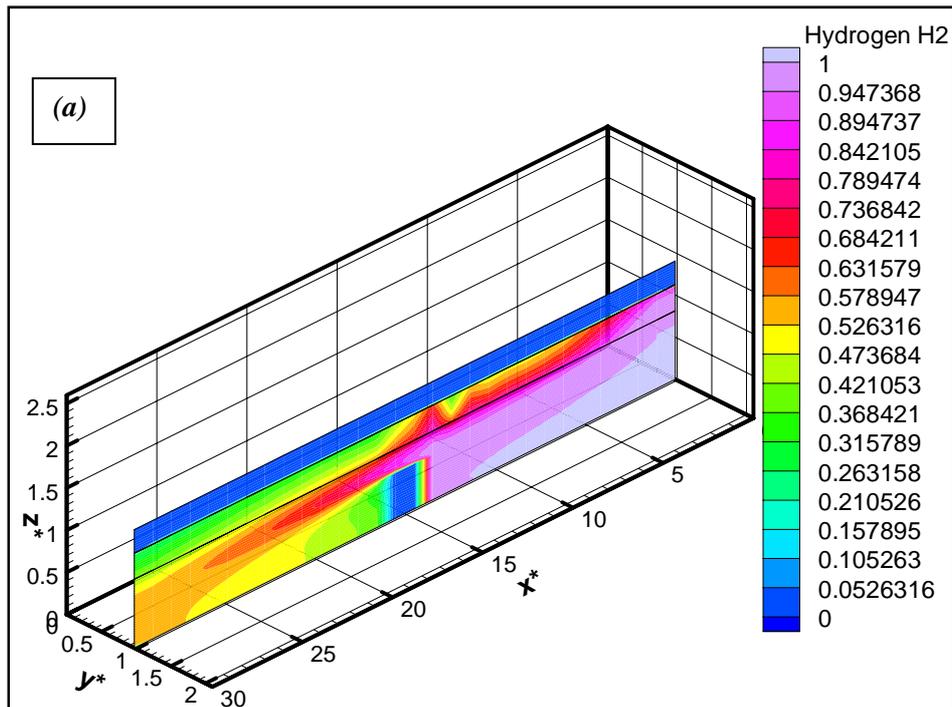


Figure 4.14: répartition du champ de concentration des réactifs pour $Re=1000$ (phénomène de déflexion).

a: canal avec chicane; *b*: canal avec obstacle.

4.4. Distribution d'oxygène

Les champs de concentration molaire d'oxygène, pour les différents cas étudiés, dans le canal, la GDL, et le catalyseur du côté cathodique, sont montrés sur les figures 4.15, 4.16, 4.17 et 4.18. La consommation d'oxygène pour les différentes géométries et pour $Re=1000$ est présentée sur les figures 4.19. En général, la concentration d'oxygène diminue graduellement de l'entrée à la sortie du canal. Cependant, à cause de la consommation stœchiométrique des réactifs, le taux de diminution de la concentration molaire de l'hydrogène dans la couche de diffusion anodique est plus élevé que celui de l'oxygène dans la GDL du côté cathodique.

Les champs de consommation d'oxygène et d'hydrogène sont similaires, sauf que la consommation d'hydrogène est deux fois plus grande que celle d'oxygène.

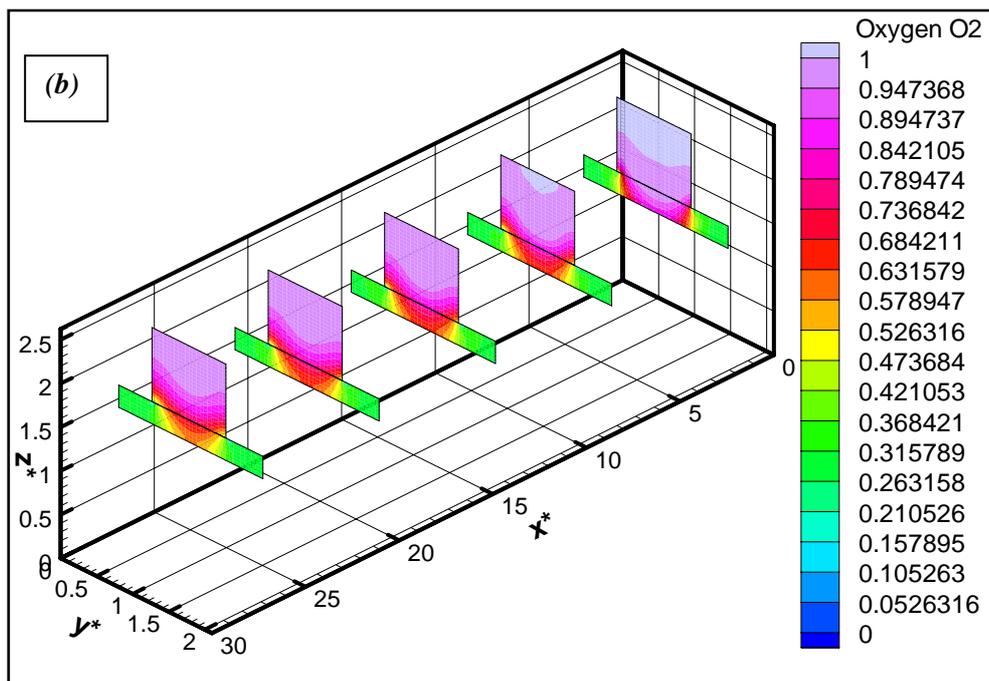
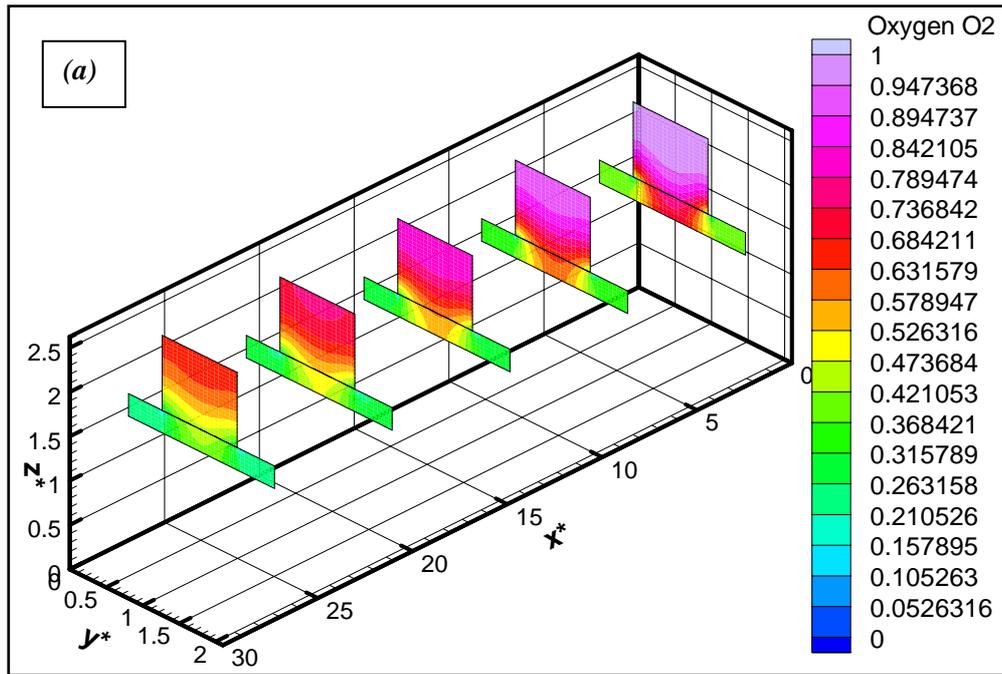


Figure 4.15: répartition du champ des concentrations d'oxygène pour un canal simple, $\lambda=2$

a : $Re=100$; *b* : $Re=1000$.

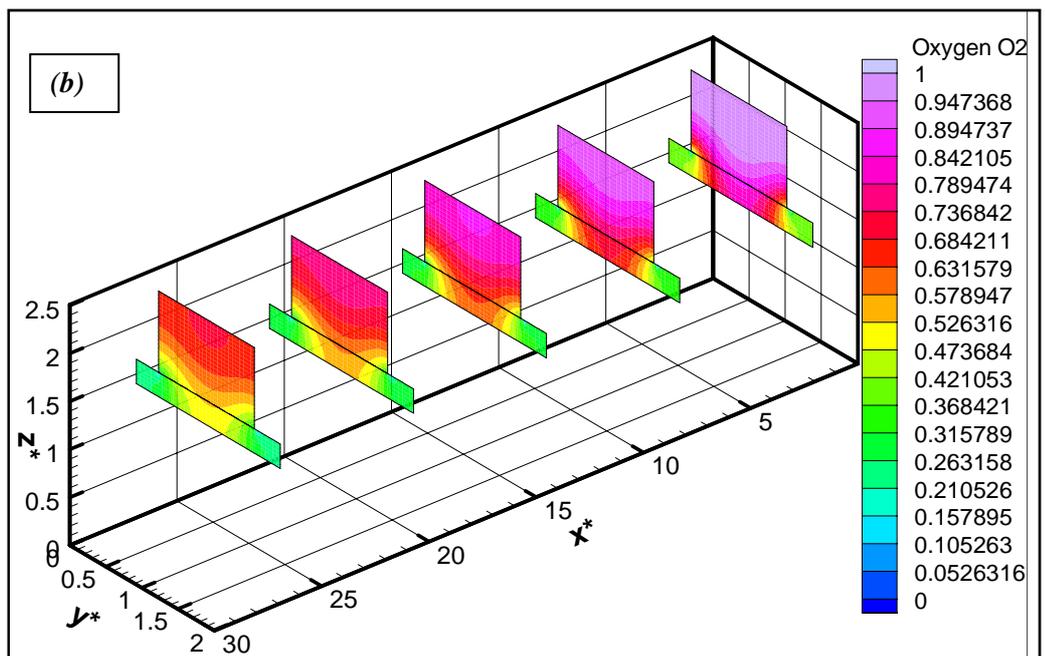
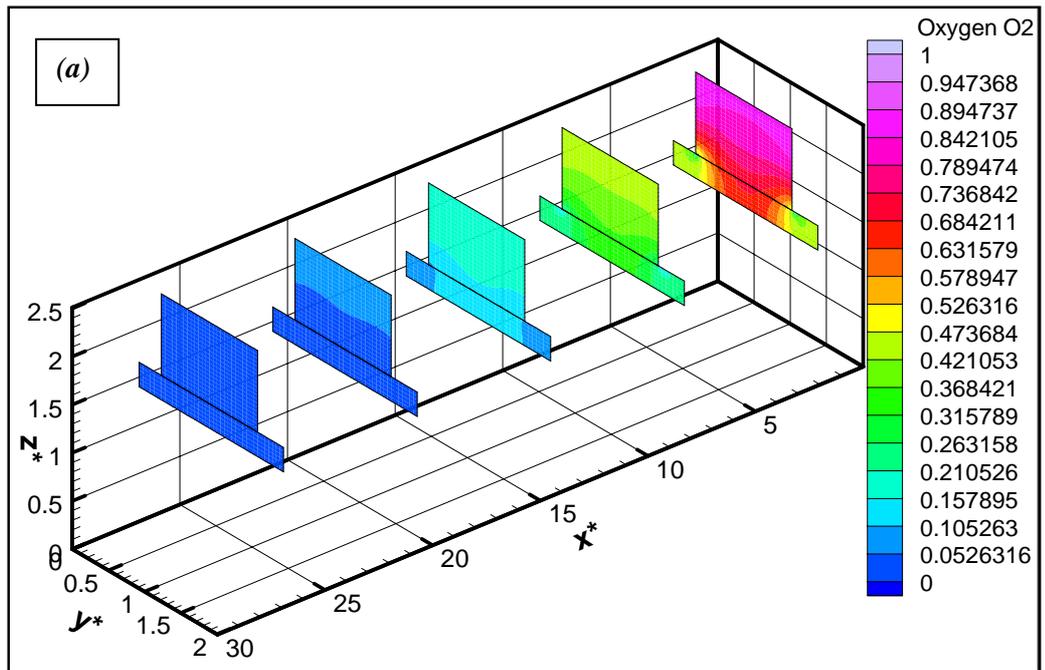


Figure 4.16: répartition du champ des concentrations d'oxygène pour un canal simple, $\lambda=4$

a: $Re=100$; b: $Re=1000$

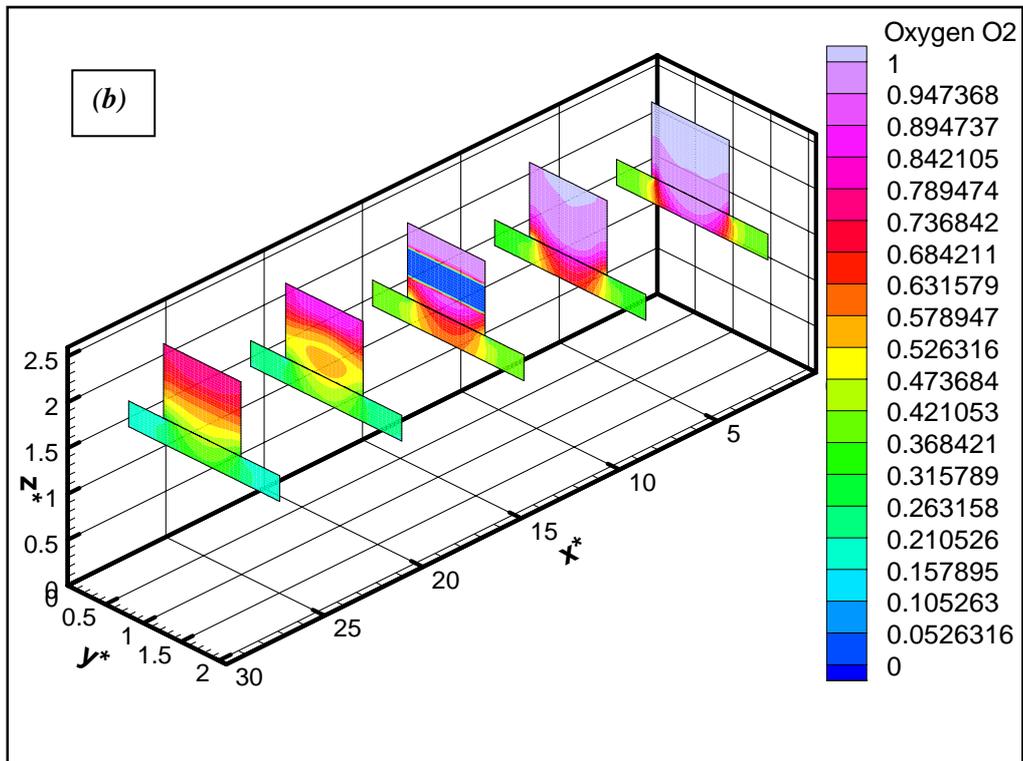
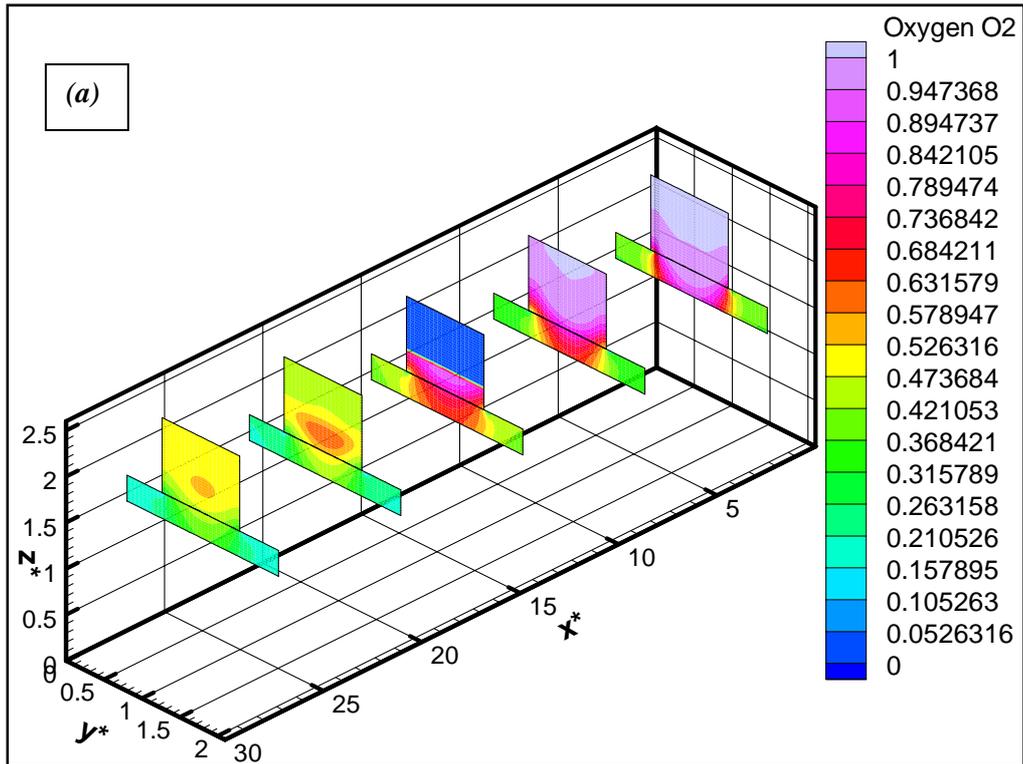


Figure 4.17: répartition du champ des concentrations d'oxygène pour $Re=1000$, $\lambda=2$

a: canal avec chicane; *b*: canal avec obstacle.

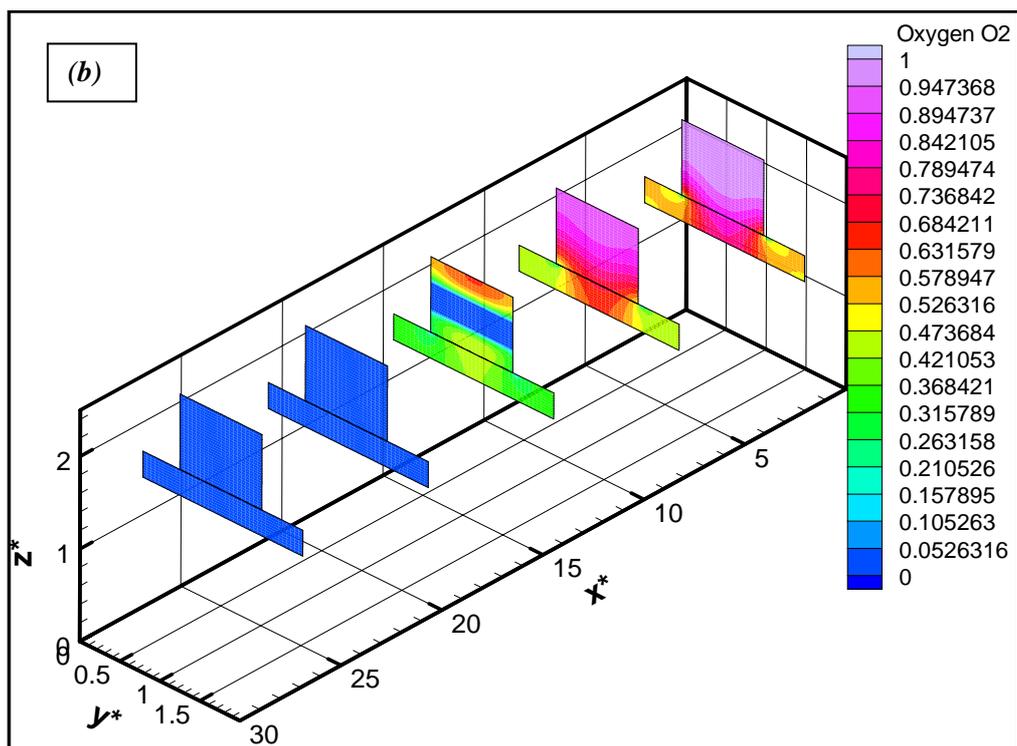
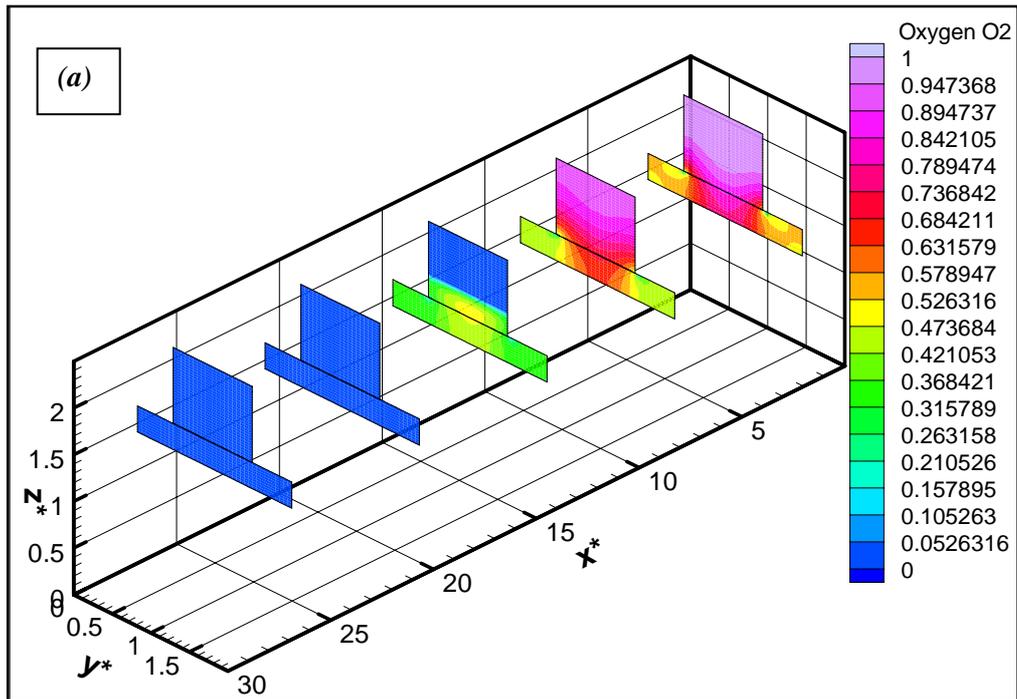


Figure 4.18: répartition du champ des concentrations d'oxygène pour $Re=100$, $\lambda=2$

a: canal avec chicane; *b*: canal avec obstacle.

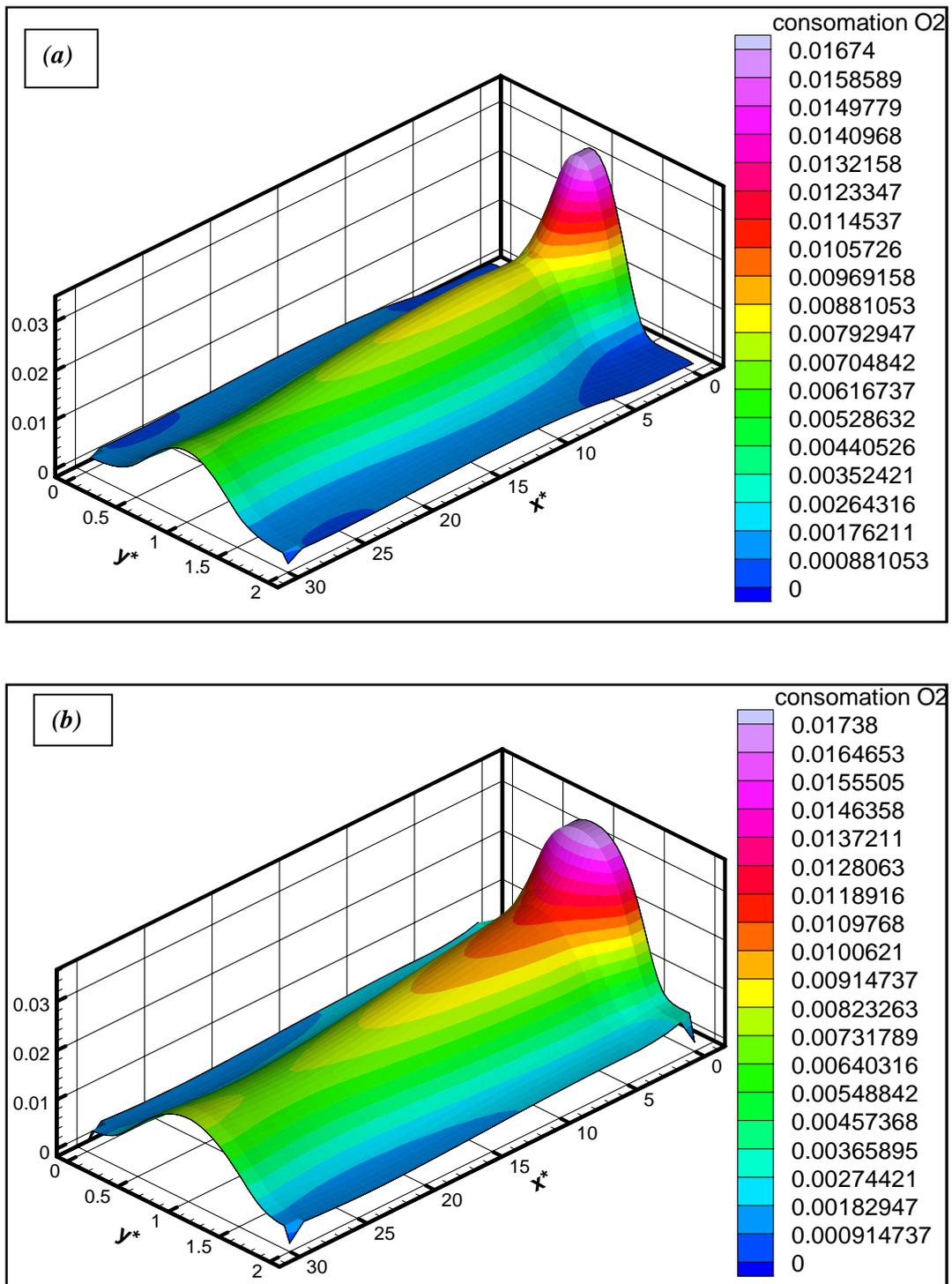


Figure 4.19. Champ de consommation d'oxygène pour un canal simple, $Re=1000$

a: $\lambda=2$; b : $\lambda=4$.

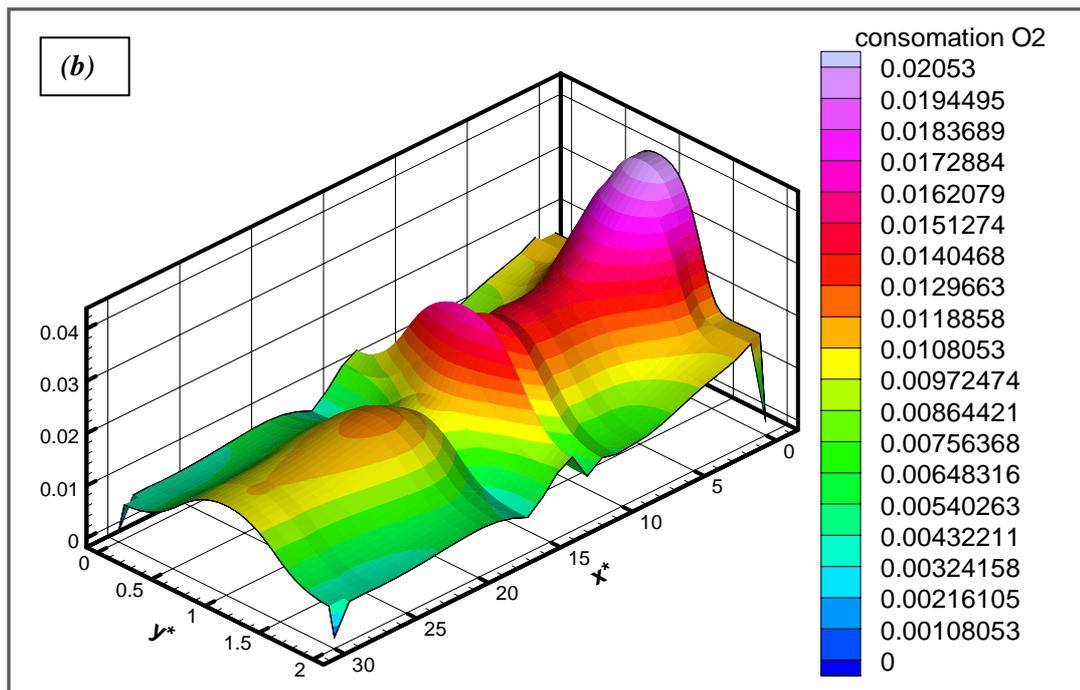
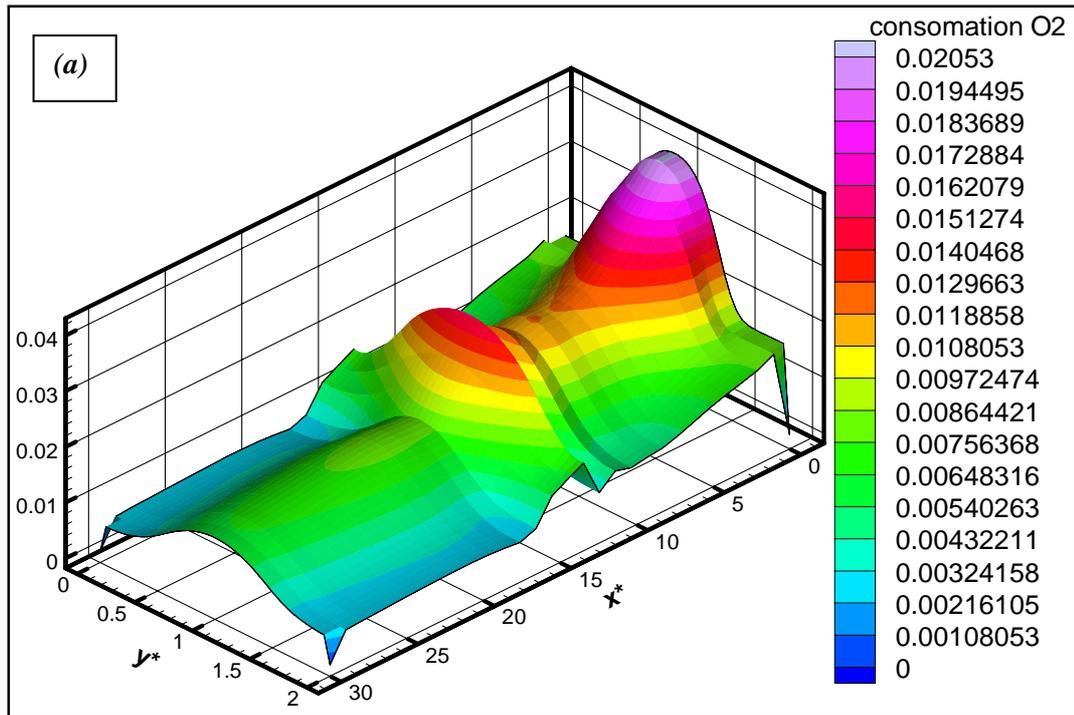


Figure 4.20. Champ de consommation d'oxygène pour $Re=1000$, $\lambda=2$
a: canal avec chicane ; *b* : canal avec obstacle.

4.5. Distribution d'eau

La distribution détaillée de la concentration molaire d'eau dans la cellule, est montrée sur les Figures de 4.21 à 4.24. Dans tous les cas, la concentration maximale d'eau se situe sur la couche catalytique du côté cathodique, à cause de la production d'eau, et elle diminue graduellement en s'éloignant de cette couche.

L'eau produite au niveau du catalyseur se divise en deux parties, La première partie franchit la membrane et la couche de diffusion vers le canal anodique, la deuxième partie traverse la GDL vers le canal cathodique. L'eau dans les canaux est entraînée par l'écoulement des réactifs, et évacuée vers l'extérieur. La concentration d'eau dans le côté cathodique est plus importante que celle dans le côté anodique à cause de la faible perméabilité de la membrane.

A un faible nombre de Reynolds, la concentration maximale de l'eau se situe près de l'entrée des canaux (figures 4.21.a, 4.22.a, 4.23.a et 4.24.a). Tandis qu'à un nombre de Reynolds plus élevé, la concentration maximale de l'eau se situe presque à la sortie des canaux (figures 4.21.b et 4.22.b). Ce ci signifie que l'augmentation de la vitesse d'écoulement améliore le processus de l'évacuation de l'eau en augmentant les forces convectives.

Les figures 4.23.b et 4.24.b montrent que la concentration maximale de l'eau se situe à la zone autour de l'obstacle (ou la chicane). Cette accumulation d'eau est due au taux de consommation des réactifs plus élevé dans cette région et à la faible vitesse derrière l'obstacle (ou la chicane). L'inconvénient de ces deux géométries est la possibilité de condensation de l'eau et l'engorgement des canaux.

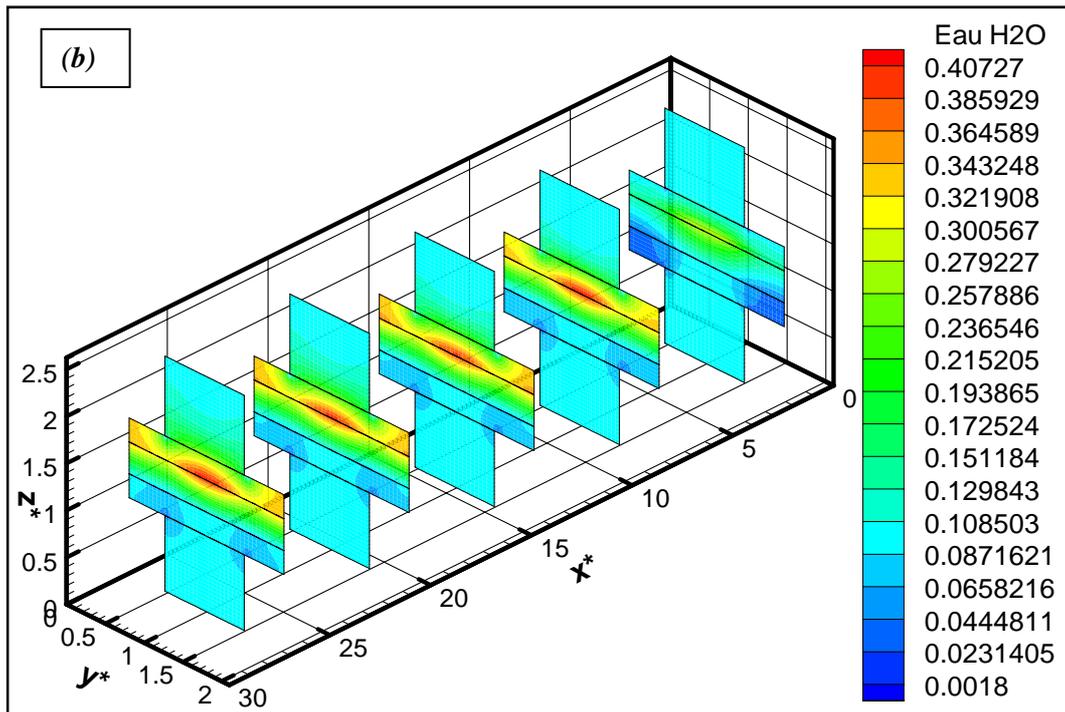
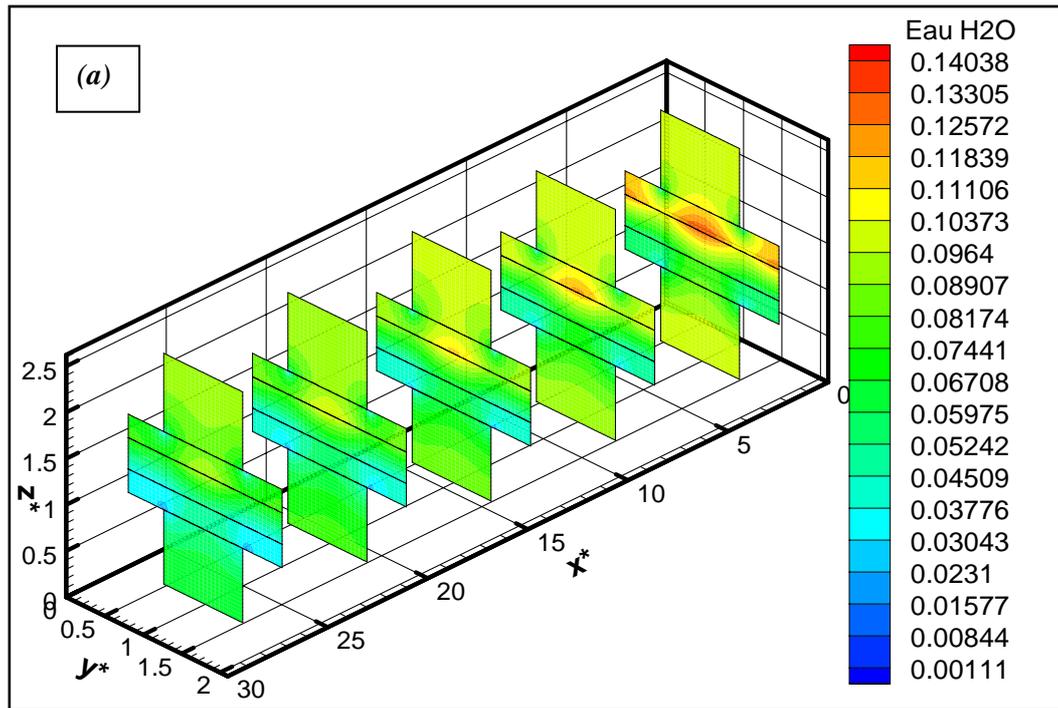


Figure 4.21: champ de concentration d'eau pour un canal simple, $\lambda=2$

a : $Re=100$; *b* : $Re=1000$

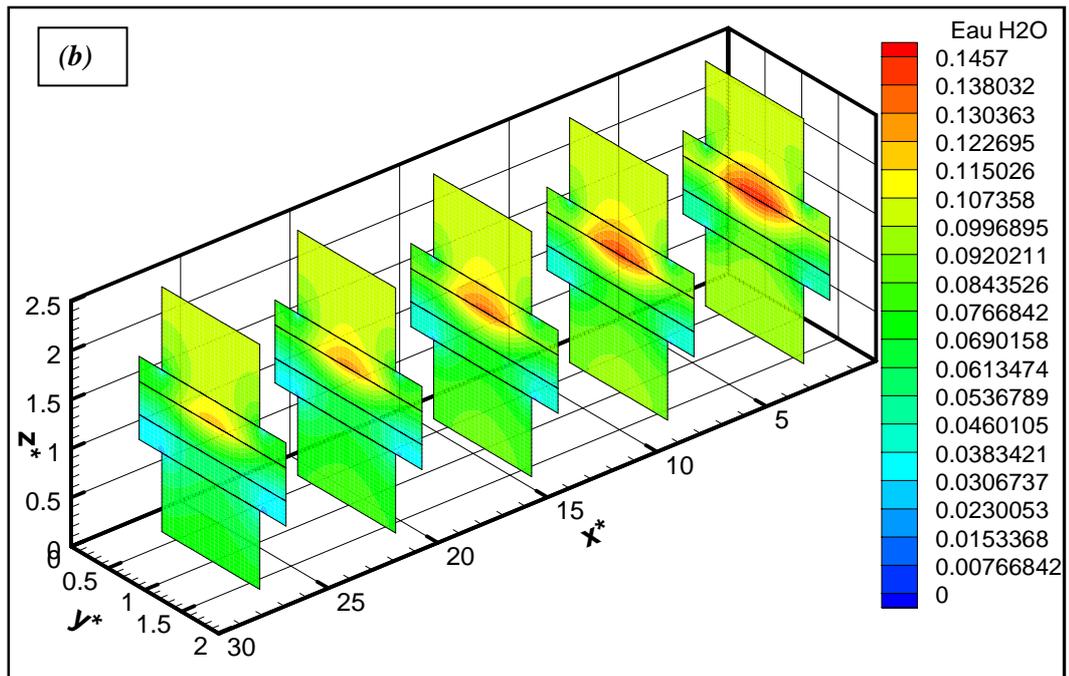
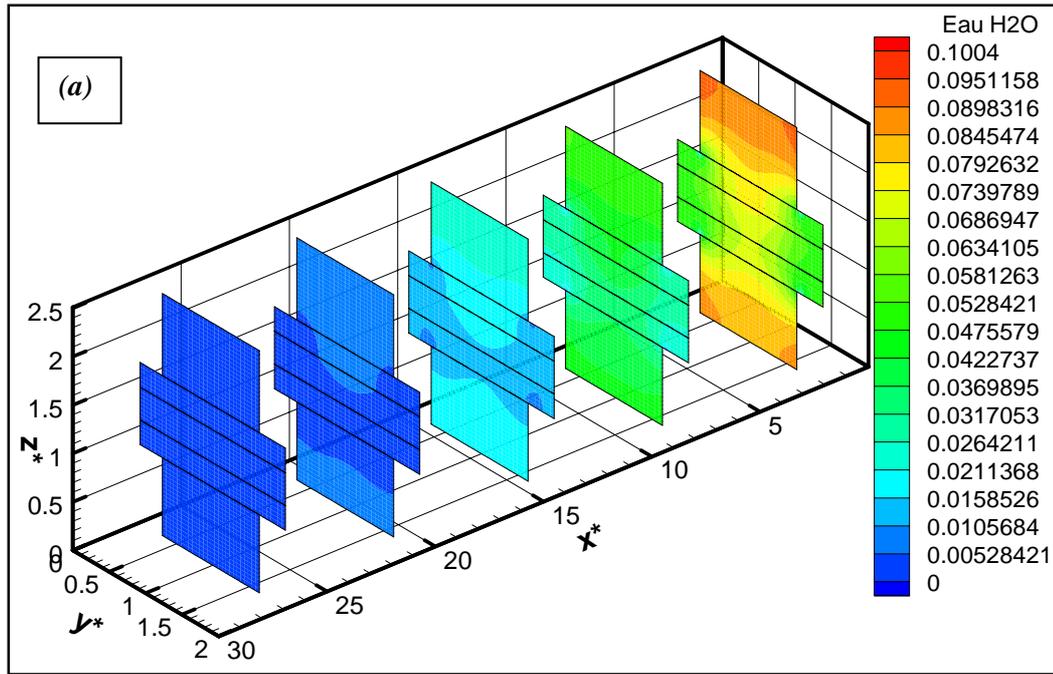


Figure 4.22: champ de concentration d'eau pour un canal simple, $\lambda=4$

a : $Re=100$; b : $Re=1000$

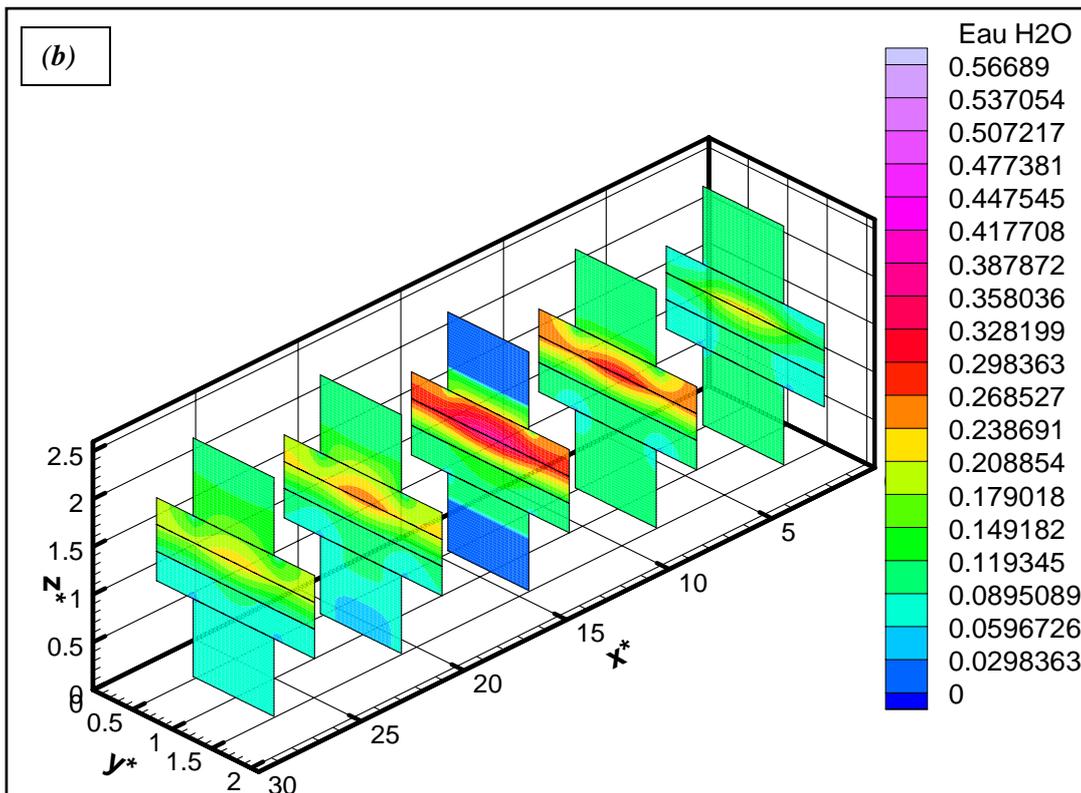
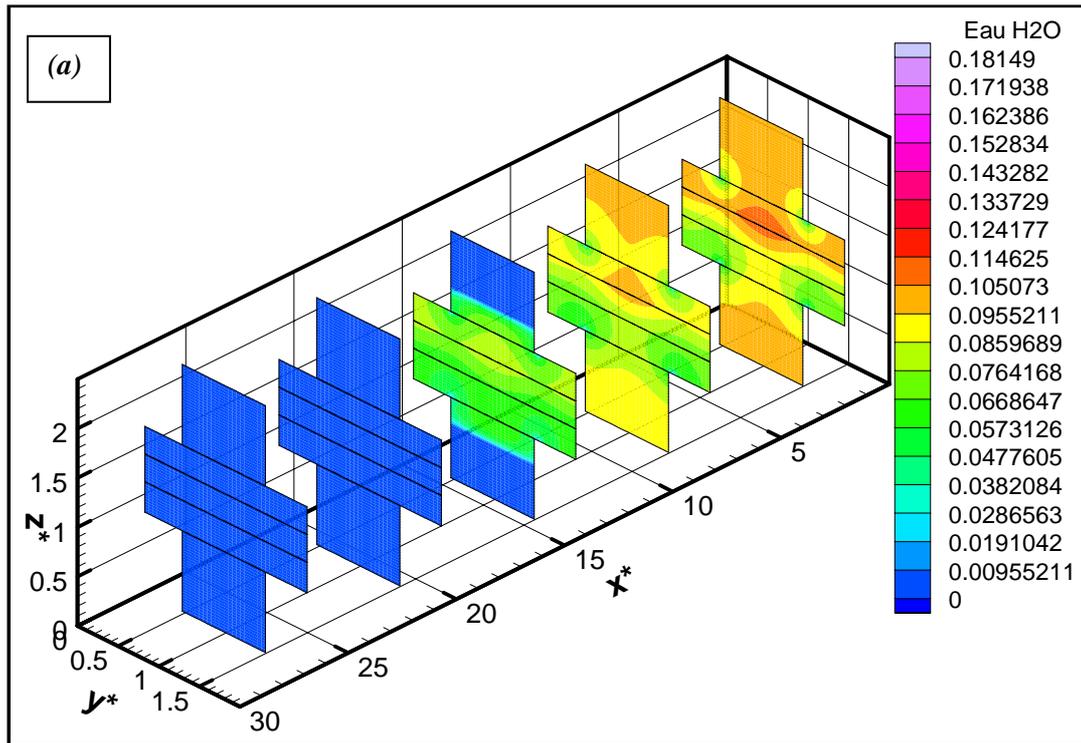


Figure 4.23. Champ de concentration d'eau pour un canal avec chicane, $\lambda=2$

a: $Re=100$; b: $Re=1000$.

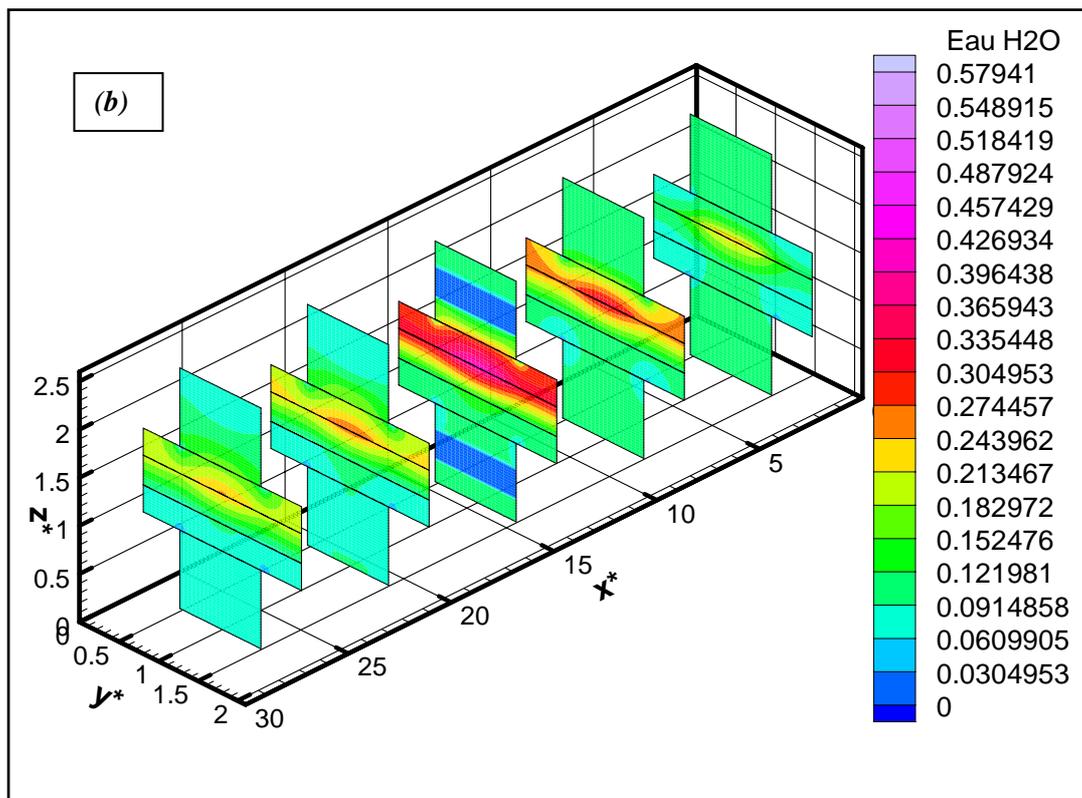
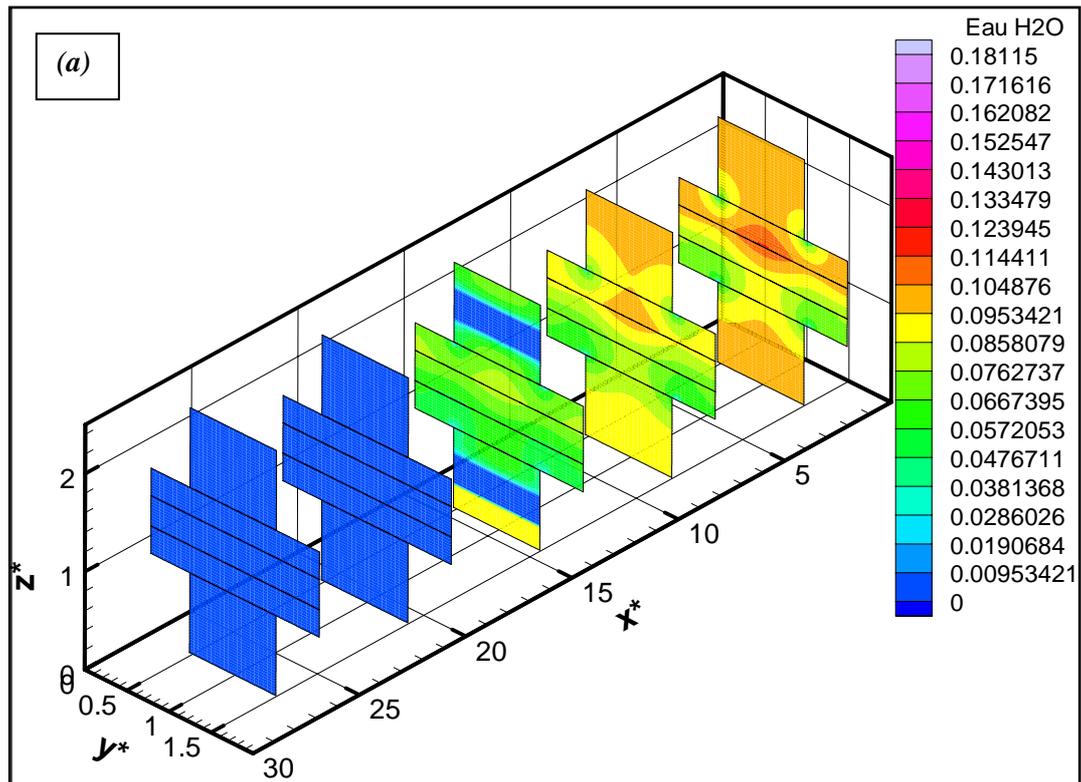


Figure 4.24. Champ de concentration d'eau pour un canal avec obstacle, $\lambda=2$

a: $Re=100$; b: $Re=1000$.

4.6. Distribution de la densité de courant

L'effet des changements du nombre de Reynolds et de la géométrie des canaux sur la densité de courant locale est montré sur la figure.4.25.

Pour toutes les géométries, on peut remarquer que la densité du courant à l'entrée de la cellule pour un faible nombre de Reynolds est plus importante que celle pour nombre de Reynolds plus élevé : en diminuant la vitesse, les force convectives diminuent, le transfert de masse par diffusion devient plus important, la quantité du réactif transporté vers le catalyseur devient plus importante, le taux de la réaction électrochimique augmente et la densité de courant augmente. Cette dernière diminue graduellement le long du catalyseur à cause du gradient des concentrations des réactifs le long des canaux. Le taux de diminution de la densité de courant dans le cas des faibles vitesses est plus important que dans le cas des vitesses élevées.

En ce qui concerne l'effet de la largeur des canaux, il est clair que pour un nombre de Reynolds élevé, la distribution de la densité de courant dans le cas des canaux plus larges ($\lambda=4$) est plus uniforme par rapport à celle dans le cas des canaux étroits ($\lambda=2$), ceci est dû à la distribution plus uniforme des réactifs dans la GDL. La densité de courant local est améliorée dans le cas de l'installation d'une chicane, ou d'un obstacle, dans le canal d'écoulement à cause de l'augmentation de la quantité des réactifs consommés. Dans le cas des faibles nombres de Reynolds la densité de courant s'annule en aval de la chicane, ou de l'obstacle, parce que les concentrations des réactifs, dans cette région, atteignent des valeurs proches du zéro.

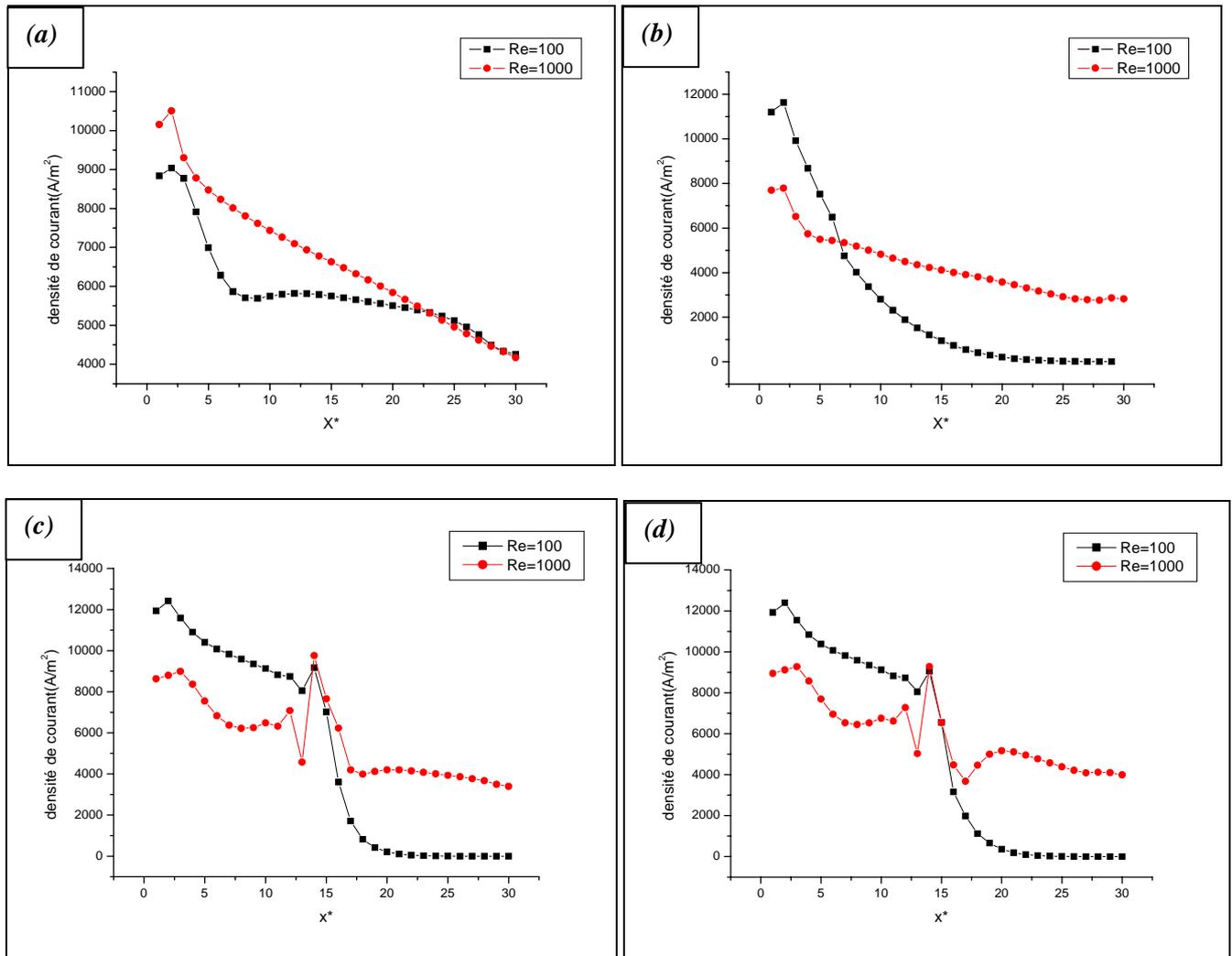


Figure 4.25. champ de distribution du Courant local

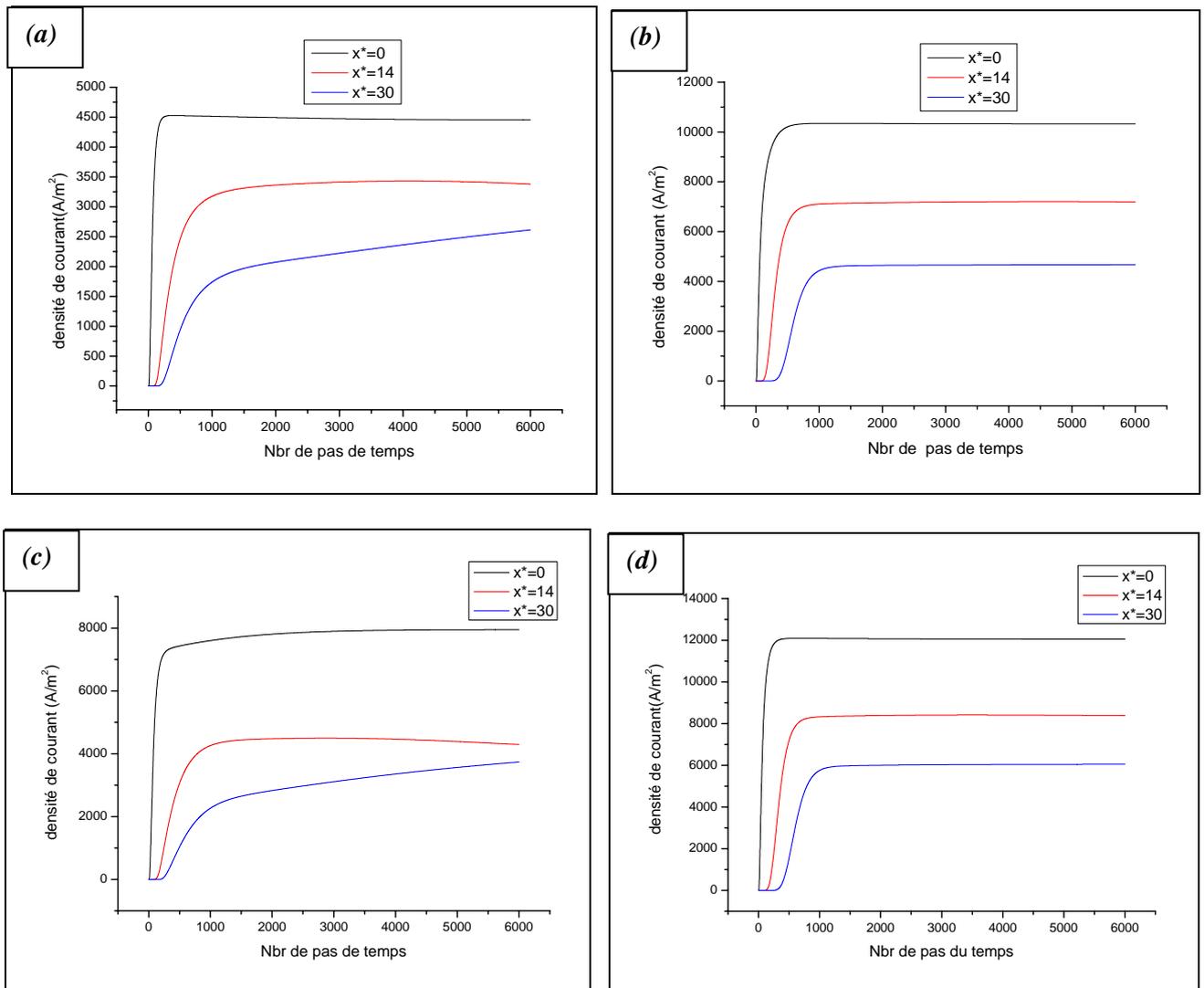
a: canal simple, $\lambda=2$; **b:** canal simple, $\lambda=4$;

c: canal avec chicane, $\lambda=2$; **d :** canal avec obstacle, $\lambda=2$.

Les résultats de l'étude transitoire de la densité de courant sont montrés sur les figures 4.26 et 4.27. Dans tous les cas, au début, la densité de courant est nulle, parce que les réactifs ne s'infiltrant pas à l'interface du catalyseur, puis elle augmente jusqu'à atteindre l'état stationnaire. Les figures 4.26.a et 4.26.b montrent que la densité de courant en régime stationnaire et le temps de séjour (temps nécessaire pour atteindre l'état stationnaire) diminuent avec l'augmentation de la vitesse d'écoulement. Autrement dit, en augmentant la vitesse d'écoulement, les réactifs occupent la totalité de la couche active dans un temps plus court mais avec une quantité moins, ce qui diminue le temps de séjours et diminue aussi la consommation. Cependant la diminution de la vitesse au dessous d'un certain seuil peut diminuer la densité de courant, parce que pour les petites vitesses, le transfert de masse par

convection devient négligeable et seule la diffusion transporte les réactifs vers le catalyseur, donc la consommation diminue, ce qui diminue la production d'électricité.

Le temps nécessaire pour que le système atteigne l'état stationnaire est plus long pour un canal étroit. Ceci peut être dû à la section d'admission des gaz au GDL plus petite (figure 4.27). L'installation d'une chicane, ou d'un obstacle, bloque les réactifs et les oblige à s'infiltrer dans la GDL, donc : le taux de consommation augmente, la densité de courant s'améliore et le temps de séjour se réduit.



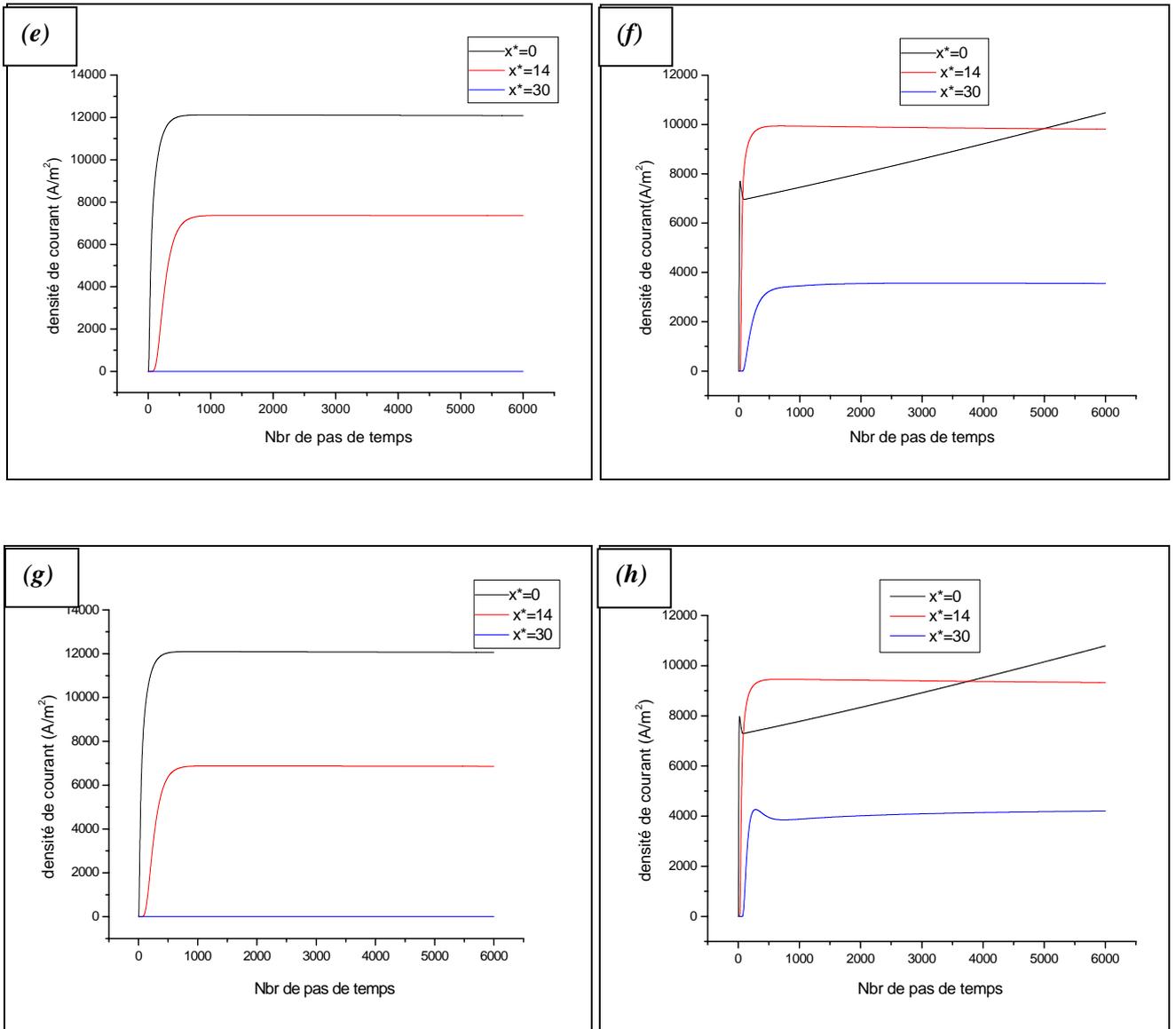


Figure 4.26. Variation temporelle de la densité de courant local
a: canal simple, $\lambda=2$, $Re=100$; **b:** canal simple, $\lambda=2$, $Re=1000$;
c: canal simple, $\lambda=4$, $Re=100$; **d:** canal simple, $\lambda=4$, $Re=1000$;
e: canal avec chicane, $\lambda=2$, $Re=100$; **f:** canal avec chicane, $\lambda=2$, $Re=1000$;
g: canal avec obstacle, $\lambda=2$, $Re=100$; **h:** canal avec obstacle, $\lambda=2$, $Re=1000$;

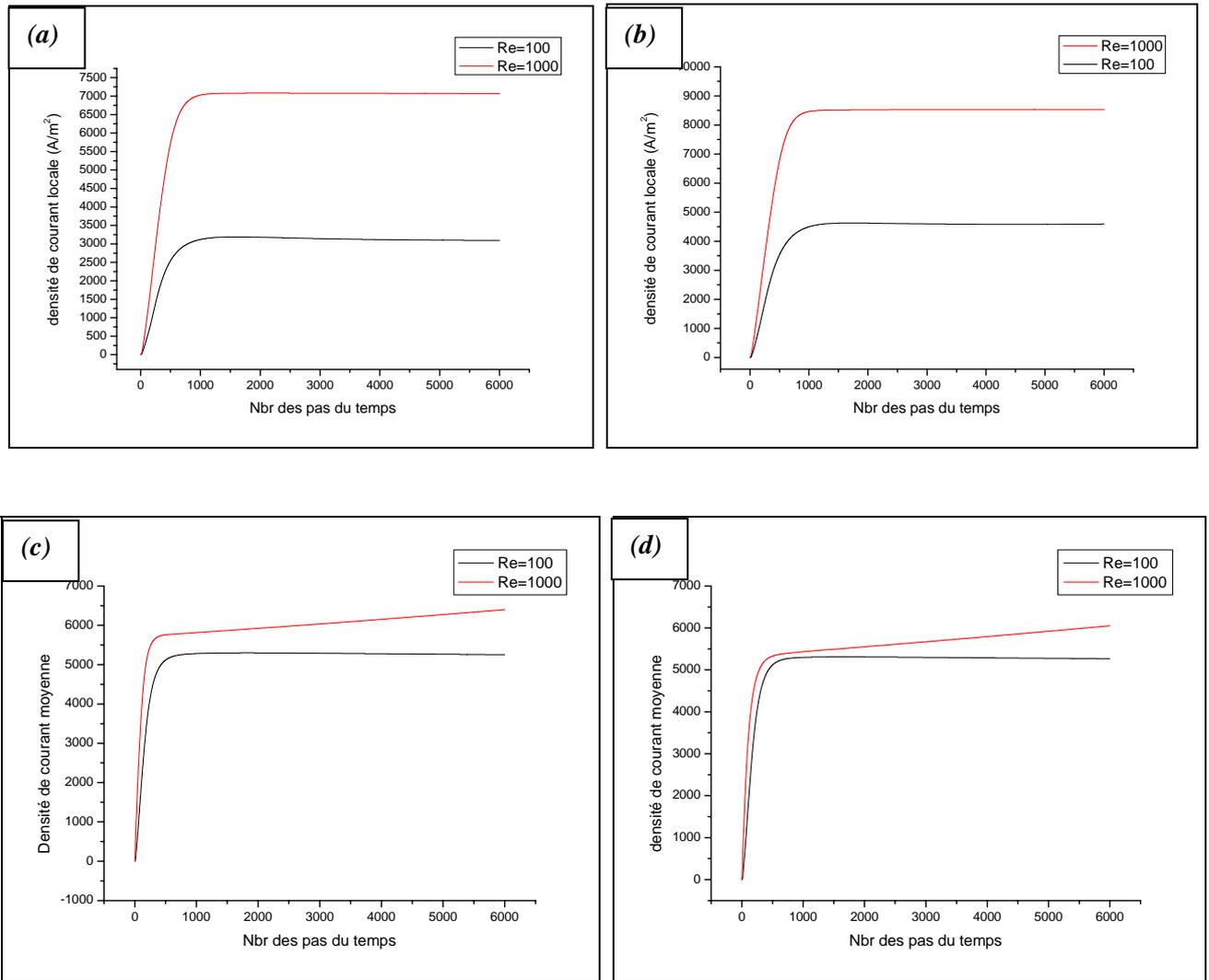


Figure 4.27. Variation temporelle de la densité de courant moyenne pour $Re=100$ et $Re=1000$

a: canal simple, $\lambda=2$; **b:** canal simple, $\lambda=4$,

c: canal avec chicane, $\lambda=2$; **d:** canal avec obstacle, $\lambda=2$,

CONCLUSIONS ET PERSPECTIVES

Conclusion générale

L'objectif de notre travail était d'étudier l'influence, des paramètres physique et géométriques, des écoulements des gaz dans les canaux, sur la consommation des réactifs, dans une pile à combustible à membrane échangeuse de protons (PEMFC). Les équations gouvernantes du problème ont été résolues par la méthode des volumes finis avec un schéma en puissance. Le problème du couplage pression-vitesse a été résolu par la méthode des projections.

Plusieurs difficultés ont été rencontrées durant la résolution du problème en raison de la présence de dimensions spatiales extrêmement petites et des coefficients variables qui ont exigé beaucoup d'arrangements et d'approximations numériques. Un autre problème, rencontré, est le temps d'exécution du programme excessivement long.

D'après les résultats obtenus, il est clair que la géométrie des plaques bipolaire et le type d'écoulement des gaz dans les canaux ont une grande influence sur la consommation des réactifs.

On peut résumer les effets constatés dans les points suivants :

- La consommation des réactifs devient plus uniforme en diminuant la vitesse d'écoulement des gaz dans les canaux, ce qui conduit à une uniformité de distribution de la densité de courant.
- La configuration des plaques bipolaires influe aussi sur la consommation des réactifs : une configuration à canaux plus large et des nervures plus minces implique une consommation plus uniforme.
- L'installation d'une chicane augmente la quantité consommée des réactifs autour d'elle et résulte une augmentation de la densité de courant dans cette région.
- En aval de la chicane, la consommation est très faible à cause du phénomène de déflexion de l'écoulement qui entraîne les réactifs en dehors de la couche de diffusion des gaz.
- Le remplacement de la chicane par un obstacle dans le cas des faibles vitesses ne change rien: les performances de la cellule restent les mêmes;

- Le remplacement de la chicane par un obstacle, dans le cas des vitesses élevées, diminue l'effet de déflexion à cause de la portion des réactifs qui passe par le vide existant entre l'obstacle et le collecteur du courant. la consommation des réactifs augmente derrière l'obstacle, mais moins de réactifs coulent dans la GDL.
- Le temps de séjour devient plus court en augmentant la vitesse d'écoulement des gaz dans les canaux.
- L'installation d'un obstacle dans les canaux d'écoulement des gaz, et L'élargissement de ces derniers réduisent le temps de séjour.

Perspectives

Dans ce travail, on a considéré que, la température est constante, l'eau existe seulement à la phase vapeur, le champ dynamique ne dépend pas du champ de concentration, et on a étudié les phénomènes de transport de la matière dans la cellule. Cette description doit être maintenant couplée à une modélisation du transfert de chaleur dans l'ensemble d'une pile avec une géométrie de canaux complexe (serpentin, parallèle...) en tenant compte de l'influence du transfert de masse sur le champ dynamique.

Références

- [1] *Matthew M. Mench/Fuel Cell Engines/ John Wiley & Sons, Inc. 2008*
- [2] *Mehmeh Bouziane / simulation numérique unidimensionnelle du phénomène de transfert de chaleur et de transport de masse et de charge dans une pile à combustible à membrane échangeuse de protons/mémoire de magistère/université d'Elhadj lakhdar. Batna/2008.*
- [3] *Franco Barbir PEM Fuel Cells theory and practice/ University of Connecticut Storrs, CT February 2005*
- [4] *Wei-Mon Yan, Chyi-Yeou, Soong Falin Chen, Hsin-Sen Chu/ Transient analysis of reactant gas transport and performance of PEM fuel cells/ Journal of Power Sources 143 (2005) 48–56.*
- [5] *Wang Ying, Tae-Hyun Yang, Won-Yong Lee, J. Ke, Chang-Soo Kim /Three-dimensional analysis for effect of channel configuration on the performance of a small air-breathing proton exchange membrane fuel cell (PEMFC)/ Journal of Power Sources 145 (2005) 572–581.*
- [6] *K.B. Shyam Prasad, S. Jayanti/ Effect of channel-to-channel cross-flow on local flooding in serpentine flow-fields/ Journal of Power Sources 180 (2008) 227–231*
- [7] *Xiao-Dong Wang, Yuan-Yuan Duan, Wei-Mon Yan, Xiao-Feng Peng/ Local transport phenomena and cell performance of PEM fuel cells with various serpentine flow field designs/ Journal of Power Sources 175 (2008) 397–407*
- [8] *Shiang-Wuu Perng, Horng-Wen Wu/ Effects of internal flow modification on the cell performance enhancement of a PEM fuel cell/Journal of Power Sources 175 (2008) 806–816*
- [9] *Shiang-Wuu Perng, Horng-Wen Wu, Tswen-Chyuan Jue, Kuo-Chih Cheng/ Numerical predictions of a PEM fuel cell performance enhancement by a rectangular cylinder installed transversely in the flow channel/ Applied Energy 86 (2009) 1541–1554*
- [10] *S. Shimpalee, W.-k. Lee, J.W. Van Zee, H. Naseri-Neshat/ Predicting the transient response of a serpentine flow- field PEMFC I. Excess to normal fuel and air/ Journal of Power Sources 156 (2006) 355–368*
- [11] *Lixin You, Hongtan Liu/ A two-phase flow and transport model for PEM fuel cells/ Journal of Power Sources 155 (2006) 219–230*
- [12] *Dewan Hasan Ahmed, Hyung Jin Sung /Effects of channel geometrical configuration and shoulder width on PEMFC performance at high current density/Journal of Power Sources 162 (2006) 327–339*
- [13] *J. Scholta, G. Escher, W. Zhang, L. Küppers, L. Jorissen, W. Lehnert / Investigation on the influence of channel geometries on PEMFC performance / Journal of Power Sources 155 (2006) 66–71*

- [14] *B. Rismanchi, M.H. Akbari/ Performance prediction of proton exchange membrane fuel cells using a three-dimensional model/ International Journal of Hydrogen Energy 33 (2008) 439 – 448*
- [15] *Maher A.R. Sadiq Al-Baghdadi/ Performance comparison between airflow-channel and ambient air-breathing PEM fuel cells using three-dimensional computational fluid dynamics models/ Renewable Energy 34 (2009) 1812–1824*
- [16] *Mohammad Hadi Akbari, Behzad Rismanchi/ Numerical investigation of flow field configuration and contact resistance for PEM fuel cell performance/ Renewable Energy 33 (2008) 1775–1783*
- [17] *Rolond schiestel, les écoulements turbulents, modilisation et simulation. Edition 2 revue et augmentee, Edition hermts paris,1998.*

Résumé

Un modèle, numérique, tridimensionnel, isotherme et instationnaire d'une pile à combustible à membrane échangeuse de protons PEMFC avec une géométrie des canaux droits est présenté dans ce travail, pour étudier les phénomènes de transfert de masse dans les différentes parties de la cellule. Les équations, de continuité, de conservation de quantité de mouvement et des espèces ont été résolues à l'aide d'un programme, en Fortran, basé sur la méthode des volumes finis. Les effets de, la vitesse d'écoulement, la largeur des canaux, l'installation d'une chicane, ou d'un obstacle, dans les canaux d'écoulement sur le transport et la consommation des réactifs dans une PEMFC sont étudiés.

ملخص

في هذا العمل تم إعداد نموذج انتقالي (بدلالة الزمن), ثلاثي الأبعاد, ذو حرارة ثابتة, وذلك من أجل دراسة ظاهرة انتقال المادة في مختلف أجزاء خلية وقودية ذات غشاء ناقل للبروتونات (PEMFC). لحل المعادلات الخاصة بهذه الظاهرة تم انجاز برنامج (FORTRAN) يعتمد على نظرية الأحجام المتناهية. باستعمال هذا النموذج تمت دراسة تأثير كل من سرعة الغازات داخل القناة, عرض القناة, تثبيت حاجز داخل القناة, على انتقال المتفاعلات وكذا استهلاكها.

Abstract

To study the mass transfer phenomena in the different parts of the proton exchange membrane fuel cell, a three-dimensional, non-isothermal, single-phase and unsteady model of a PEMFC with straight flow field channels has developed in this work. The governing equations are resolved with a program, in FORTRAN, based on finite volume method. The effects of, the velocity, the channel width, the baffle plate, or obstacle, installation in the canal flow on the reactants transport and consumption in a PEMFC are studied.
