RÉPUBLIQUE ALGERIENNE DÉMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTÈRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPÉRIEUR
ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE
UNIVERSITÉ DE BATNA
FACULTÉ DES SCIENCES
DÉPARTEMENT DES SCIENCES DE LA MATIÈRE

LABORATOIRE DE PHYSIQUE ÉNERGÉTIQUE APPLIQUÉE
ÉCOLE DOCTORALE DES ÉNERGIES RENOUVELABLES

MÉMOIRE

Présenté

Pour obtenir le diplôme de Magister

En PhysiqueÉnergétique

Option: Énergies Renouvelables

PAR

Ali MEHIRA

Étude numérique bidimensionnelle des champs thermiquesdans le plan parallèle à l'écoulement des gaz d'une pile à combustible SOFC planaire

---

Soutenu le : 28/01/2013

Pr. BEN MOUSSA	Hocine	Prof	Président	UHL Batna
Pr. ZITOUNI	Bariza	Prof	Rapporteur	UHL Batna
Dr. MOUMMI	Nour Eddine	Prof	Examinateur	Université de Biskra
Dr. AKSAS	Mounir	MCA	Examinateur	UHL Batna

Année Académique 2012-2013

À mon très cher père ***Salah***

À ma très chère mère ***Fatima***

À mon épouse et mes à enfants

À tous mes frères, sœurs et amis

Le temps sera le maître de
celui qui n'a pas
de maître

Remerciements

الحمد لله ربِّ العالمين

En préambule à ce mémoire, je souhaite adresser mes remerciements les plus sincères aux personnes qui m'ont apporté leur aide et qui ont contribué à l'élaboration et à la réussite de ce modeste travail.

Je tiens à remercier sincèrement mon encadreur Pr. ZITOUNI Bariza, qui, en tant que rapporteur de mémoire, s'est toujours montré à l'écoute et très disponible tout au long de la réalisation de ce mémoire, ainsi que pour l'inspiration, l'aide et le temps qu'il a bien voulu me consacrer.

Mes remerciements s'adressent également à Monsieur Dr. ZEROUAL Mostafa **(رحمه الله وغفر له)** *ex-responsable de l'école doctorale, pour sa générosité et la grande patience dont il a su faire preuve malgré ses charges académiques et professionnelles ainsi qu'à tout le personnel de l'école doctorale, les énergies renouvelables, qui a très gentiment collaboré à la réalisation de cette tâche.*

J'exprime ma gratitude à tous les consultants et enseignants rencontré lors des recherches effectuées et qui ont accepté de répondre à mes questions avec une grande compréhension et générosité particulièrement M^elle ABDENEBI Hafsia.

Je n'oublie pas mes parents et mon épouse pour leur contribution, leur soutien et leur patience. Je tiens à exprimer ma reconnaissance envers M^onsieur le Pr .BENMOUSSA Hocine qui a eu la gentillesse de lire et corriger ce travail.

Enfin, j'adresse mes plus sincères remerciements à tous mes proches et amis, qui m'ont toujours soutenu et encouragé au cours de la réalisation de ce mémoire.

Merci à tous et à toutes.

Table des matières

Introduction Générale 01

Chapitre I Paramètres physiques décrivant une cellule de la pile à combustible du type SOFC: Etude bibliographique

I.1 Introduction 04
I.2 Principe de fonctionnement d'une pile SOFC 05
I.3 Matériaux et Paramètres physiques des composants du SOFC 06
I.3.1 Electrolyte 06
I.3.2 Cathode et Anode 07
I.3.3 Paramètres physiques 08
I.3.4 Paramètres physiques et dimensions typiques de SOFC 08
I.4 Dimension et paramètres de la cellule 11
I.4.1Spécification du SOFC 11
I.4.2Paramètres modèles d'entrée pour le calcul standard 12
I.4.3Schéma du modèle 3D 14
I.4.4Géométrie d'une cellule SOFC 16
I.5 La conductivité 17
I.5.1Expressions de la conductivité 17
I.5.2Comparaison des conductivités 19
I.6Pile IT- SOFC 20
I.7Variation des pertes ohmiques avec l'épaisseur 21
I.8Effet de la température d'air et de taux d'écoulement de carburant sur la tension de cellule 22
I.9Influence de l'épaisseur sur le rendement et la densité de puissance 25
I.10Pile FT-SOFC anode supporté 26
I.11Caractéristiques thermoélectriques de la pile SOFC 28
I.12Equation d'énergie 29

Chapitre II Modélisation numérique du champ thermique dans une cellule de pile à combustible SOFC le long de l'écoulement des gaz

II.1 Introduction 32
II.2 Modèle physique 33
II.3 Modèle Mathématique 34
II.3.1 Equations gouvernantes 36
II.3.1.1Equation d'énergie 36
II.3.1.2 Equations de conservation d'espèces 37
II.3.2Résolution Numérique 39
II.3.3 Discrétisation de l'équation de transport 39

II.3.4 Les conditions aux limites 42
II.3.5 La forme matricielle du problème 43
II.3.6La méthode SOR 45
II.3.7 Propriétés et paramètres utilisés dans les calculs 47

Chapitre III Résultats et interprétations

III.1Introduction 50
III.2 Tableaux récapitulatifs des résultats obtenus 52
III.3 Champ thermique en absence de sources de chaleur SOFC A/S 53
III.4 Champ thermique sous l'effet de la source d'activation SOFC A/S 55
III.5 Champ thermique sous l'effet de la source Ohmique SOFC A/S 58
III.6 Champ thermique sous l'effet de la source Totale SOFC A/S 62
III.7 Champ thermique sous l'effet de la source Ohmique SOFC E/S 63
III.8 Perte d'activation en fonction de la densité de courant (I) 67
III.9 Perte d'activation en fonction de la température (T) 68
Conclusion générale 69

Référencesbibliographiques

Liste des Figures

Fig. I.1	Schéma de principe de fonctionnement d'une pile à combustible du type SOFC	06
Fig. I.2	Schémas des modèles de cellules de pile SOFC planaire. (Ecoulement Co-courant ; Ecoulement Contre-courant ; Ecoulement croisé)	15
Fig. I.3	Schéma d'une unité de cellules de SOFC	16
Fig. I.4	La géométrie d'une cellule unitaire de pile SOFC de type planaire	17
Fig. I.5	Conductivité d'électrolyte de zirconium (S/m) en fonction de la température	19
Fig. I.6	Conductivité électrique des composites	19
Fig. I.7	Les comparaisons des conductivités d'électrolyte de YSZ et de CGO	20
Fig. I.8	Variation des pertes ohmiques avec l'épaisseur d'électrolyte	21
Fig. I.9 (a)	Effet de la température d'entrée d'air sur la tension de cellule U_f	22
Fig. I.9 (b)	Effet de la température d'entrée d'air sur la température moyenne et le rendement	22
Fig. I.10 (a)	Effet de rapport de taux d'écoulement de carburant sur la tension de cellule	23
Fig. I.10 (b)	Effet de rapport de taux d'écoulement de carburant sur la température moyenne et le rendement	23
Fig. I.11	Effet de l'épaisseur de l'anode sur le rendement et sur la densité de puissance à l'entrée de cathode T air est de 650°C	26
Fig. I.12	Effet d'épaisseur de l'anode sur le rendement et sur la densité de puissance pour une opération de cellule dans des conditions isothermes	26
Fig. I.13 (a)	Schéma du FT-SOFC anode-supportée	27
Fig. I.13 (b)	Modèle informatique du FT-SOFC anode-supporté	27
Fig. II.1	Schéma du Modèle physique	33
Fig. II.2	Représentation d'une cellule planaire	34
Fig. II.3	Schéma des différences finies	40
Fig. III.1	Champs thermiques en absence de la source d'Activation d'une cellule SOFC-P à A/S. (a) : $T_{H2}=T_{air}$ =873 K, (b) : $T_{H2}= T_{air}$ =1273 K.	52
Fig. III.2	Champs thermiques en absence de la source d'Activation d'une cellule SOFC-P à A/S. (a) : $T_{H2} > T_{air}$; TH2 =973 K ; T_{air} =873K , (b) : $T_{H2} < T_{air}$; T_{H2} =873 K ; T_{air} =973K en utilisant les valeurs de la densité référence I0,an , I0,ca	53
Fig. III.3	Champs thermiques sous l'effet de la source d'Activation. (a): $T_{air} = T_{H2}$=873K I=12000A/m²; (b): $T_{air} = T_{H2}$=873K I=20000A/ m²	54
Fig. III.4	Champs thermiques sous l'effet de la source d'Activation $T_{H2}= T_{air}$ =873 K I=40000A/ m²	55
Fig. III.5	Champs thermiques sous l'effet de la source Ohmique d'une cellule. (a) : $T_{H2}= T_{air}$ =973 K I= 12000 A/ m². (b) : T_{gaz} = 1273, I=12000 A/ m² en utilisant les expressions de conductivités	56
Fig. III.6	Champs thermiques sous l'effet de la source chaleur Ohmique $T_{H2}= T_{air}$ =873 K ; I= 12000 A/ m²	57
Fig. III.7	Champs thermiques sous l'effet de la source de chaleur Ohmique à A/S à T_{air} =873K = T_{air} ; I= 20000 A/ m²	58
Fig. III.8	Champs thermiques sous l'effet de la source de chaleur Ohmique d'une cellule SOFC T_{H2}=873 K= T_{air} ; I=40000	59

Fig.. III.9	Champs thermiques sous l'effet de la source de chaleur Totale d'une cellule SOFC T_{H2}=873 K= T_{air} I=12000	60
Fig. III.10	Champs thermiques sous l'effet de la source de chaleur Totale d'une cellule SOFC T_{H2}=1273 K= T_{air} I=20000	61
Fig. III.11	Champs thermiques sous l'effet de la source Ohmique pour cellule SOFC E/S (Electrolyte supporté $e_{éle}$=150 µm, e_{an}= 50 µm et e_{ca}= 50 µm et L=10 cm). (a): T_{H2}= T_{air} =873 K et I=12000A/ m^2 , (b): T_{H2}= T_{air} =873 K et I=20000 A/ m^2	62
Fig. III.12	Champ thermique sous l'effet de la source Totale. (a): T_{H2} = T_{air} = 873K, I = 12000 A/ m^2; (b): T_{H2} = 873 K= T_{air}, I = 20000 A/ m^2	63
Fig. III.13	Champ thermique sous l'effet de la source Totale. (a): T_{H2} = T_{air} = 973K, I = 12000 A/ m^2; (b): T_{H2} = 1273 K= T_{air}, I = 12000 A/ m^2	64
Fig. III.14	Pertes d'activation en fonction de la densité de courant $\eta_{act} = f(I)$	65
Fig. III.15	Courbes de pertes d'activation $\eta_{act} = f(T)$ $\eta_{act} = f(I)$	66

Liste des tableaux

Tableau I. 1	*Propriétés physiques du SOFC*	09
Tableau I. 2	*Conditions de fonctionnement et les propriétés électrochimiques et de transport de la pile à combustible SOFC à 1000°C*	09
Tableau I. 3	*Les conditions de fonctionnement et les propriétés électrochimiques et de transport de l'électrolyte-YSZ et de l'électrolyte-CGO de la pile à combustible SOFC à 800°C*	10
Tableau I. 4	*Les conditions de fonctionnement et les propriétés électrochimiques et de transport de l'électrolyte-YSZ et de l'électrolyte-CGO de la pile à combustible SOFC à 600 et 500°C.*	10
Tableau I. 5	*Paramètres matériels*	11
Tableau I. 6	*Résistivités des composants du SOFC*	11
Tableau I. 7	*Spécification du SOFC*	12
Tableau I. 8	*Paramètres physiques*	12
Tableau I. 9	*Paramètres modèles d'entrée pour le calcul standard*	13
Tableau I. 10	*Paramètres de base, géométriques et matériels pour une cellule SOFC planaire utilisant l'hydrogène comme carburant et l'air comme oxydant*	15
Tableau I. 11	*Propriétés matérielles des composants de la cellule*	16
Tableau I. 12	*Propriétés physiques des matériaux dans SOFC*	17
Tableau I. 13	*Paramètres de modélisation*	18
Tableau I. 14	*Épaisseur et conductivité des composants du SOFC*	20
Tableau I. 15	*Dimensions physiques d'une cellule SOFC*	21
Tableau I. 16	*Conditions aux limites de fonctionnement*	21
Tableau I. 17	*Propriétés physiques du SOFC*	24
Tableau I. 18	*Propriétés physiques des composants de cellules*	28
Tableau I. 19	*Paramètres communs à tous les cas*	28
Tableau I. 20	*Propriétés de paramètres des composants de la cellule SOFC*	28
Tableau I. 21	*Les paramètres informatiques calculés dans un système de H2-H2O pour un écoulement Co-écoulement*	29
Tableau II. 1	*Dimensions de la cellule*	47
Tableau II. 2	*Propriétés matérielles de la cellule*	48
Tableau III. 1	*Élévation de la température en présence de chaque type de source de chaleur et des différentes valeurs des températures de gaz. Pour I = 12000 A/m²*	50
Tableau III. 2	*Élévation de la température en présence de source de chaleur et des différentes valeurs des températures de gaz. Pour I = 12000 A/m² , I = 20000 A/m² et I = 40000 A/m²*	51
Tableau III. 3	*Élévation de la température en présence de la source de chaleur Ohmique et Totale aux différentes valeurs des températures de gaz. Pour I = 12000 A/m² et I = 20000 A/m².*	51

Nomenclatures

Paramètres	***Significations***	***Unit***
Cp	*Chaleur spécifique*	J /kg.K
D_{eff}	*Coefficient de diffusion effectif*	m^2/s
e	*Épaisseur*	μm
E^0	*Potentiel réversible standard*	V
E	*Potentiel idéal d'une cellule*	V
E_{nernst}	*Potentiel de Nernst*	V
E_{an}	*Énergie d'activation anodique*	J /mole
E_{ca}	*Énergie d'activation cathodique*	J /mole
F	*Constante de Faraday*	C /mole
i_0	*Densité de courant d'échange*	A/m^2
I	*Densité de courant*	A/m^2
i_l	*Densité de courant limite*	A/m^3
ε	*Perméabilité*	m^2
n	*Nombre des électrons*	/
P	*Pression*	Pa
P^0	*Pression de référence*	Pa
P_k	*Pression partielle de l'espèce k*	Pa
R	*Constante universel du gaz*	J /mole.K
$S_{T,k}$	*Source thermique Totale dans l'élément k*	W/m^3
$S_{act,k}$	*Source d'activation dans l'élément k*	W/m^3
$S_{con,k}$	*Source de concentration dans l'élément k*	W/m^3
$S_{Ohm,k}$	*Source d'activation dans l'élément k*	W/m^3
T	*Température*	K
U_{cell}	*Tension de cellule*	V
u	*Vitesse suivant la longueur des canaux*	m/s
V	*Vitesse suivant l'épaisseur de la cellule*	m/s
$X_{,k}$	*Fraction massique dans l'élément k*	/
ΔG	*Variation de l'énergie de Gibbs*	J /mole
ΔH	*Variation d'entalpie*	J /mole
ΔS	*Variation d'entropie*	J /mole.K

Lettres grecs

Paramètres	*Significations*	*Unité*
Δ	*Variation*	/
α	*Coefficient de transfert de charge*	/
η	*Surtension*	V
λ_{eff}	*Conductivité thermique effective*	W / m.K
σ	*Conductivité électrique*	*S/m*
ρ	*Masse volumique*	kg / m^3
μ	*Viscosité*	kg / m.s
ε	*Porosité*	*%*

Indices et exposants

Indices	*Exposant*
0	*Condition standard*
act	*Activation*
ohm	*Ohmique*
con	*Concentration*
chim	*Chimique*
ca	*Cathodique*
an	*Anodique*
éle	*Électrolyte*
eff	*Effectif*
k	*Composante (élément)*
TPB	*Point de contact triple*
f	*Fuel*
a	*Air*
A/E	*Anode/Électrolyte*
E/C	*Électrolyte/Cathode*
H_2	*Hydrogène*
H_2O	*Vapeur d'eau*
O_2	*Oxygène*
l	*Limite*

Introduction générale

Les piles à combustible (SOFCs) à hautes températures sont les dispositifs les plus efficaces pour la conversion électrochimique de l'énergie chimique en énergie électrique et chaleur et avaient gagné l'attention croissante ces dernières années pour la production et la distribution propre et efficace de l'électricité. La praticabilité technique et la fiabilité de ces cellules, dans la configuration planaire, a été démontrée par l'opération très réussie des systèmes de 100 kW de production combinée de chaleur et d'électricité sans toute dégradation de performance pendant plus de deux années. Actuellement le but primaire est la réduction des frais financiers des systèmes d'alimentation SOFC pour concurrencer effectivement d'autres technologies de production d'électricité.

Vers cette extrémité, plusieurs différentes conceptions de cellules sont étudiées et beaucoup de nouvelles collaborations de programmes sont lancées aux Etats-Unis, en l'Europe, et au Japon. Le placement pour le développement de pile SOFC dans le monde entier a monté nettement et cette tendance est prévue de continuer pour au moins la décennie suivante. En plus la réduction des coûts et ces programmes de développement des investigations sont également appliqués dans le résidentiel, le transport et les secteurs militaires, rendus possibles principalement en raison de la flexibilité de carburant de ces cellules. Leur application en générateur auxiliaire de bord utilisant l'essence ou diesel comme carburant promet d'introduire les piles SOFCs dans le marché des véhicules à moteur.

Quoique la technologie avance à un rythme très rapide, l'information contenue dans la plupart des chapitres est assez fondamentale pour que cette thèse soit utile même pendant qu'un texte pour la technologie de la pile SOFC au

niveau gradué. Les structures tubulaires, planaires, et monolithiques sont les structures primaires de SOFC.

Comme dans n'importe quel article écrit par les auteurs multiples, il peut y avoir une certaine duplication d'information ou même une contradiction mineure dans l'interprétation de divers phénomènes et résultats de chapitre au chapitre. En outre, dans l'intérêt de rendre ce travail disponible dans un temps raisonnable, il n'a pas été possible de fournir l'uniformité dans la nomenclature et les symboles du chapitre au chapitre : nous faisons des excuses pour cela.Outre cette introduction générale et les principales parties obtenues au cours de ce travail, ce manuscrit est organisé selon trois parties majeures, figurant en trois différents chapitres.

Dans un premier temps, en chapitre. I, une synthèse bibliographique a permis de définir notre principal cadre d'étude qui est l'estimation des paramètres physiques (tels que la conductivité thermique, électrique et ionique, les dimensions de la cellule et ses composants, les températures des gaz, etc.).Le chapitre II est le cœur de ce travail de thèse il expose les modèles utilisés dans le simulateur numérique. Ce chapitre développe des notions et des équations liées à l'énergie produite puis il détaille la modélisation mathématique et la solution numérique des équations gouvernant le système de pile à combustible suivi d'un programme en langage Matlab. Des conditions aux limites ont ainsi pu être exprimées pour borner notre étude. Le lecteur pourra notamment y constater les difficultés rencontrées lors de l'implémentation des modèles dans l'environnement de simulation.

Enfin, le chapitre III présente l'ensemble des résultats de simulation obtenus au cours de cette étude. Le calcul des coefficients de corrélation et des différentes températures et paramètres que nous utiliserons pour la comparaison des résultats est préalablement précisé , suivi d'une interprétation des expressions graphiques et des différents courbes .

Chapitre I

Paramètres physiques d'une cellule SOFC

Etude bibliographique

I.Étude et Synthèse Bibliographique

I.1. Introduction

La matière principale d'électrolyte employée dans les SOFCs est actuellement YSZ. Bien que beaucoup d'autres matériaux d'oxyde conduisent les ions un peu certain et meilleur que la zircone, or ce matériau a un nombre d'attributs significatifs qui lui font l'idéal pour cette application, y compris l'abondance, la stabilité, la non-toxicité. Par ailleurs on peut mentionner plusieurs inconvénients comme le coefficient élevé de dilatation thermique et les problèmes de joindre et de sceller le matériau.

L'Yttrium est le stabilisateur principal utilisé actuellement pour la zircone, bien que tous les deux plus chers matériaux le scandium et le ytterbium donnent une meilleure conductivité ionique. Typiquement, l'yttrium est ajouté à 13-16% en poids (8-10.5 mol %) pour donner un matériau cubique entièrement stabilisé.

Des détails de ces matériaux sont fournis dans l'offre de ce chapitre. Les SOFCs fonctionnent à des températures élevées à partir de 600 à 1000°C pour assurer la conductivité suffisante des ions par leurs électrolytes qui sont non-conducteurs aux électrons.

L'électrolyte doit répondre à plusieurs critères pour le bon fonctionnement :

- Il doit être dense et étanche.
- Il doit avoir la composition correcte pour donner la bonne conduction ionique aux températures de fonctionnement.
- Il doit être mince pour réduire la résistance ionique.
- Il doit être prolongé dans le secteur pour maximiser la capacité courante.
- Il devrait résister à des chocs thermiques.
- Il doit être économiquement traitable.

Ces conditions ne sont pas facilement regroupées.

Après avoir produire la membrane d'électrolyte de YSZ, il est alors nécessaire d'appliquer des électrodes à la surface de contact de carburant (anode) et au côté d'oxydant (cathode).

Ces électrodes sont habituellement faites à partir des matériaux particulaires qui sont partiellement aggloméré pour former des couches de conduites poreuses.

Le nickel est la matière principale d'anode employée dans les anodes de SOFC depuis 1964, en grande partie en raison de son exécution et sciences économiques connues. Malheureusement, le métal de nickel n'adhère pas fortement à YSZ sauf qu'il soit mélangé à la zircone.

L'échauffement lent des conceptions planaires existantes est une conséquence du coefficient de dilatation thermique et de la fragilité élevés de YSZ. Si la pile planaire est chauffée à 800°C trop rapidement, alors elle peut fendre, entraînant l'échec catastrophique. N'importe quelle grande structure de YSZ souffrira le même problème que des gradients thermiques sont installé par la céramique. Il est important d'utiliser de plus petits plats ou tubes pour résister au choc thermique. Un générateur de 100 kW a pu alors être construit de 1152 cellules.

I.2. Principes de fonctionnement du SOFC

Dans les piles SOFCs l'ion d'oxygène est l'ion mobile transféré à travers l'électrolyte solide dans la demi-cellule, suivant les réactions dans la cathode et l'anode respectivement :

$$\frac{1}{2}O_2 + 2e^- \leftrightarrow O^{2-} \qquad \text{(I.1)}$$

$$H_2 + O^{2-} \leftrightarrow H_2O + 2e^- \qquad \text{(I.2)}$$

Donc il s'agit d'une oxydoréduction électrochimique d'hydrogène et d'oxygène, avec production simultanée d'électricité, d'eau et de chaleur, selon la réaction chimique globale universellement connue :

$$H_2 + \frac{1}{2}O_2 \leftrightarrow H_2O \qquad \text{(I.3)}$$

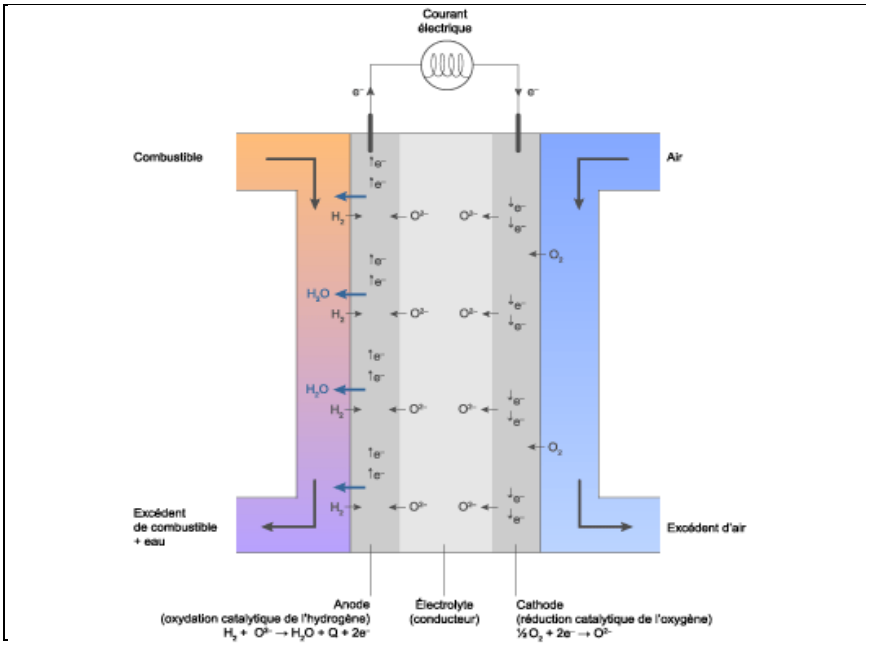


Fig.. I.1. Schéma de principe de fonctionnement d'une pile à combustible du type SOFC-P.

I.3. Matériaux et Paramètres physiques des composants du SOFC

Dans ce chapitre nous allons procéder à la synthèse de plusieurs articles et documents pour bien éclaircir les valeurs des paramètres physiques (la conductivité électrique, ionique, thermique, les dimensions des composants de la pile, densité de courant électrique et les températures des gaz) utilisés dans la plus part des recherches récentes sur les piles à combustible de type SOFC.

I.3.1.Électrolyte

a) Électrolyte à base de Cérium, dans l'article d'**AshokV. Joshi, James J.Steppan, Dalem Taylor et S.Elangovan [1]**.Ont utilisés un électrolyte plein à base d'oxyde de cérium, avec des dopants supplémentaires pour augmenter le transport d'ion et la possibilité de traitement des membranes. Le dispositif doit être actionné aux températures minimales d'environ 600°C pour réaliser la conductivité suffisante des ions d'oxygène dans l'électrolyte. A ces températures, le cérium montre un avantage significatif d'exécution par rapport aux matériaux à base de zircone. La conductivité de cérium dopé en Gd à 800°C est environ 0 .1 S/cm, et approximativement supérieure à celle du YSZ.

b) Électrolyte à base pérovskite, les réactions d'oxydation et de réduction sont

favorisées en employant les électrodes de pérovskite bi-fonctionnelles et poreuses, ainsi que l'électrolyte, qui forment une cellule électrochimique. Les électrodes sont spécifiquement choisies pour leur conductivité ionique et électronique et activité catalytique.

c) Électrolyte à base de cobaltite strontium de lanthane où la conductivité ionique de cérium dopé en métaux de cette poudre de terre-rare est de **0.059S/cm** supérieure à celle du cérium dopé en Sr qui est de **0.044 S/cm**.

d) Les performances des matériaux obtenus restent, cependant, en-dessous de celle de la zircone stabilisée à l'yttrium qui a des conductivités ioniques d'oxygène élevées pour des températures de (800-1000◦C).

La température de fonctionnement de SOFC dépend essentiellement du matériau d'électrolyte. Les matériaux d'électrolyte tels que le cérium montrent la conductivité ionique supérieure à celle du YSZ. Le Sr et $LaGaO_3$ dopé par magnésium (LSGM) a montré une conductivité ionique à 800◦C équivalent à celle de YSZ à 1000◦C.

La dégradation des cellules en LSGM est principalement située à l'interface d'anode-électrolyte. La formation d'une phase isolante, $LaNiO_3$, à l'interface d'électrolyte d'anode est la cause probable de la dégradation.

I.3.2.Cathode et Anode

L'anode (composite de céramique en métal Ni/ZrO_2 (cermet)), cathode (manganite dopé à lanthane ($LaMnO_3$)) et l'électrolyte (ZrO_2 stabilisé à l'yttrium (8 mol% $Y2O_3$)) sont modelés en tant que milieux poreux.

Toshio Suzuki, Masanobu Awano, Piotr Jasiski, Vladimir Petrovsky et **Harlan U.Anderson [3]** ont pris (La, Sr)MnO_3(LSM)-Y dopant ZrO_2 (YSZ) comme composite qu'on a préparé en utilisant des polymères de YSZ et LSM en substrats denses à la température de 800°C. Les résultats issus du test pour le composite symétrique LSM-YSZ ont montré que la résistance spécifique est de **0.14 Ω.cm²** pour la surface de polarisation à 800°C, ce qui indique que le LSM-YSZ pourrait être un candidat potentiel pour la cathode dans les SOFCs. L'exécution de la cellule avec les composites LSM-YSZ à la cathode et Ni-YSZ à l'anode ont été étudiés où on a obtenu la densité de puissance à environ $0.26Wcm^{-2}$ pour 850°C en utilisant l'hydrogène comme carburant.

Dans cette étude, un nouveau type de cathode composite a été préparé en utilisant (La, Sr) MnO_3 (LSM) le polymère Y est un dopant du polymère ZrO_2 (YSZ) à 800°C. Le composite LSM-YSZ a été examiné pour l'exécution comme cathode de SOFC.

La zircone dopée à l'yttrium a été employé couramment comme matériau d'électrolyte pour les piles à combustible (SOFC) **[9]**. Les 8 mol% de Y_2O_3ont stabilisé la couche de ZrO_2.La conductivité électrique de YSZ dopé à basse pression est **0.043 S/cm** à 1000°C, généralement pour ces matériaux la conductivité électrique allant de **0.00068 S/cm** jusqu'à **0.038 S/cm.**

Les avantages d'une cellule SOFC sont la facilité de fabrication et la densité de courant élevée.

I.3.3.Paramètres physiques

Les modèles numériques de CFD (Computational Fluid Dynamics) donnent la distribution de la température au-dessus de la surface des différentes cellules, ou le long du canal simple d'air.

Conductivité thermique des interconnexions = **12** (W m^{-1} K^{-1})

Conductivité thermique d'air = **0.073** (W $m^{-1}K^{-1}$).

- Le flux de chaleur total de la réaction électrochimique Q_r est donné par :

$$Q_r = \left(\frac{T\,\Delta S}{2F} + \eta \right) i \qquad \text{(I.4)}$$

- Le flux de chaleur de joule dans l'électrolyte est :

$$Q_j = \frac{e_{ele} i^2}{\sigma_{ele}} \qquad \text{(I.5)}$$

- La densité de courant sera :

$$i = \left(\frac{T\,\Delta S}{2F} + \eta \right) \frac{e_{ele}}{\sigma_{ele}} \qquad \text{(I.6)}$$

On prend $\boldsymbol{\sigma}_{éle}$ = **0.25 S/m** (conductivité de YSZ à 600°C de l'électrolyte),

$\boldsymbol{e}_{éle}$ = 10^{-5} m (épaisseur de l'électrolyte) on obtient le courant caractéristique de référence est de :

$$I^* = 1.4 \times 10^4 \ Am^{-2}.$$

I.3.4.Paramètres physiques et dimensions typiques de SOFC

Propriétés physiques	***Valeurs***
Pression d'entrée à l'anode [Pa]	*102325*
Pression d'entrée à la cathode [Pa]	*101325*
Fraction molaire de H_2 à l'entrée	*0.9*
Fraction molaire de H_2Oà l'entrée (anode)	*0.1*
Fraction molaire d'O2à l'entrée	*0.7*
Fraction molaire de H_2Oà l'entrée (cathode)	*0.3*
Densité de courant d'échange à l'anode [$A.m^{-2}$]	*1.67×10^8*
Densité de courant d'échange à la cathode [$A.m^{-2}$]	*1.67×10^8*
Porosité des électrodes	*0.375*
Coefficient de diffusion anodique [$m^2 .s^{-1}$]	*3.5×10^{-5}*
Coefficient de diffusion cathodique [$m^2 .s^{-1}$]	*7.3×10^{-6}*

Tableau I.1. *Propriétés physiques du SOFC. [18]*

Description	***Unité***	***Valeur***
Pression d'entrée anode	*atm*	*1.0*
Pression d'entrée cathode	*atm*	*1.0*
Température de cellule	*°C*	*1000*
Fraction molaire d'entrée H_2		*0.9*
Fraction molaire d'entrée de vapeur d'eau		*0.1*
Fraction molaire d'entrée O_2		*0.7*
Fraction molaire d'entrée de vapeur d'eau		*0.3*
Densité de courant d'échange de référence	*A/m^2*	*1.67×10^8*
Densité de courant d'échange de référence	*A/m^2*	*5.51×10^9*
Porosité de l'électrode anode		*0.375*
Porosité de l'électrode cathode		*0.375*
Conductivité de l'électrolyte YSZ	*S/m*	$(85\,x10^3)exp\left(\frac{-11\,x10^3}{T}\right)$
Conductivité de l'interconnexion	*S/m*	$\frac{(9.3\,x10^6)}{T}exp\left(\frac{-1.1\,x10^3}{T}\right)$
D_{an}^{eff}	*m^2/s*	*3.5×10^{-5}*
D_{ca}^{eff}	*m^2/s*	*7.3×10^{-6}*

Tableau I.2. *Conditions de fonctionnement et les propriétés électrochimiques et de transport de la pile à combustible SOFC à 1000°C. [18]*

Description	***Unité***	***Valeur***
Température de cellule	*°C*	*800*
Fraction molaire d'entrée H_2	*%*	*0.95*
Fraction molaire d'entrée de vapeur	*%*	*0.05*

d'eau anode		
Fraction molaire d'entrée O_2	*%*	*0.21*
Fraction molaire d'entrée N_2	*%*	*0.79*
Densité de courant d'échange anode	A/m^2	*5300*
Densité de courant d'échange cathode	A/m^2	*2000*
Porosité d'anode et de cathode	*%*	*0.375*
Tortuosité d'anode et de cathode	*--*	*2.75*
$D_{H_2-H_2O}$	m^2/s	$7.68x\ 10^{-4}$
$D_{O_2-N_2}$	m^2/s	$1.83\ x\ 10^{-4}$
Conductivité d'électrolyte CGO	S/m	$(2.706\ x\ 10^6)\frac{exp\left(-\frac{0.64}{8.6173\ x\ 10^{-5}\ T}\right)}{T}$

Tableau I.3.*Les conditions de fonctionnement et les propriétés électrochimiques et de transport de l'électrolyte-YSZ et de l'électrolyte-CGO de la pile à combustible SOFC à 800°C. [18]*

Description	***Unité***	***600°C***	***500°C***
Fraction molaire d'entrée H_2		*0.97*	*0.97*
Fraction molaire d'entrée d'eau anode		*0.03*	*0.03*
Fraction molaire d'entrée O_2		*0.21*	*0.21*
Fraction molaire d'entrée d'eau cathode		*0.79*	*0.79*
Densité de courant d'échange de référence anode	A/m^2	$3.2\ x\ 10^{13}$	$3.2\ x\ 10^{13}$
Densité de courant d'échange de référence cathode	A/m^2	$7.0\ x\ 10^{11}$	$7.0\ x\ 10^{11}$
$D_{H_2-H_2O}$	m^2/s	$5.38\ x\ 10^{-4}$	$4.36\ x\ 10^{-4}$
$D_{O_2-N_2}$	m^2/s	$1.27\ x\ 10^{-4}$	$1.03\ x\ 10^{-4}$

Tableau I.4.*Les conditions de fonctionnement et les propriétés électrochimiques et de transport de l'électrolyte-YSZ et de l'électrolyte-CGO de la pile à combustible SOFC à 600 et 500°C. [18]*

Masse volumique de Ni90%-ZrO_2(Ni-YSZ)	$5970\ \ kg.m^{-3}$
Conductivité thermique de Ni90%-ZrO_2	$3\ \ W.m^{-1}.K^{-1}$
Coefficient de dilatation (900°C) de Ni90%-ZrO_2	$1{,}164\ x10^{-5}\ \ K^{-1}$
Chaleur spécifique de Ni90%-ZrO_2	$300\ \ J.kg^{-1}K^{-1}$

Masse volumique de Sr-LaMnO₃(LSM)	*6570 kg.m^{-3}*
Conductivité thermique de Sr-LaMnO₃	*3 W.m^{-1}.K^{-1}*
Coefficient de dilatation (900°C) de Sr-LaMnO₃	*1,23 x10^{-5} K^{-1}*
Chaleur spécifique de Sr-LaMnO₃	*573 J.kg^{-1}K^{-1}*
Masse volumique d'électrolyte	*5000 kg.m^{-3}*
Conductivité thermique d'électrolyte	*5 W.m^{-1}.K^{-1}*
Chaleur spécifique d'électrolyte	*871 J.kg^{-1} .K^{-1}*
Porosité d'électrodes anode et cathode	*35 %*
Résistance visqueuse de l'anode et de la cathode	*10^{13} m^{-2}*

Tableau I.5. *Paramètres matériels. [22]*

Résistivité de la cathode (Ω cm)	*0.013*
Résistivité de l'anode (Ω cm)	*0.001*
Résistivité de l'électrolyte (Ω cm)	*10*
Résistivité de l'interconnexion (Ω cm)	*0.6*

Tableau I.6. *Résistivités des composants du SOFC.[10]*

I.4. Dimensions et paramètres de la cellule

I.4.1.Spécification du SOFC

Dans le travail de **Y.Inui, N.Ito, T.Nakajima et A. Urata [2]** ont pris les matériaux de la cellule d'une SOFC: YSZ, Ni/YSZ et LSM ($La_{0.8}Sr_{0.2}MnO_3$) et LCM ($LaCr_{0.9}Mg_{0.1}O_3$) pour l'électrolyte, anode, cathode et les interconnexions respectivement et les caractéristiques de la cellule comme le montre Tableau I.7.

Dimensions de la cellule	
Longueur de cellule (m)	*0.1*
Largeur de cellule (m)	*0.1*
Épaisseur de l'anode (m)	*500 x 10^{-6}*
Épaisseur de la cathode (m)	*50 x 10^{-6}*
Épaisseur de l'électrolyte (m)	*20 x 10^{-6}*
Épaisseur de l'interconnexion (m)	*500 x 10^{-6}*
Hauteur du canal de fuel (m)	*1.0 x 10^{-3}*
Hauteur du canal d'air (m)	*1.0 x 10^{-3}*
Propriétés matérielles de la cellule	

Conductivité électrique de l'anode (Ω^{-1} m^{-1})	*8×10^4*
Conductivité électrique de la cathode (Ω^{-1} m^{-1})	*8×10^3*
Conductivité ionique de l'électrolyte (Ω^{-1} m^{-1})	*$3.34 \times 10^4 \exp(-10300/T)$*
Masse volumique de PEN (kg m^{-3})	*5900*
Chaleur spécifique de PEN (J $kg^{-1}K^{-1}$)	*500*
Conductivité thermique de PEN ($Wm^{-1}K^{-1}$)	*2*
Masse volumique d'interconnexion (kg m^{-3})	*8000*
Chaleur spécifique d'interconnexion (J $kg^{-1}K^{-1}$)	*500*
Conductivité thermique d'interconnexion ($Wm^{-1}K^{-1}$)	*25*
Energie d'activation de l'anode (J mol^{-1})	*140000*
Energie d'activation de la cathode (J mol^{-1})	*137000*
Coefficient pré-exponentiel pour anode (Am^{-2})	*8.0×10^{10}*
Coefficient pré-exponentiel pour cathode (Am^{-2})	*1.5×10^{10}*
Densité de courant limitative (Am^{-2})	*12000*

Tableau I.7.*Spécification du SOFC. [2], [17], [18]*

Température d'air à l'entrée T_a^0 (K)	*600 + 273*
Température standard T_{298} (K)	*298*
Épaisseur de l'interconnexion h_p (m)	*10^{-3}*
Longueur caractéristique pour l'échange de chaleur h_c (m)	*10^{-3}*
Longueur du canal L (m)	*0.1*
Conductivité thermique de l'interconnexion λ_p ($Wm^{-1}K^{-1}$)	*12*
Conductivité thermique de l'air λ_a ($Wm^{-1}K^{-1}$)	*0.073*
Variation d'entropie dans la réaction hydrogène-oxygène à 1000 K ΔS (J mol^{-1} K^{-1})	*54.8*
Chaleur spécifique de l'air à 700°C Cp_a (J kg^{-1} K^{-1})	*1160*
Masse volumique de l'air à 700°C ρ_a (kg m^{-3})	*0.32*
Vitesse de l'écoulement dans le canal cathodique v_{ca}^0 (ms^{-})	*10*
Densité de courant caractéristique J_{ref} (Am^{-2})	*10^4*
Pente de Tafel b (V)	*0.15*
Nombre de Nusselt dans le canal d'air	*4*

Tableau I.8. *Paramètres physiques. [5]*

I.4.2.Paramètres modèles d'entrée pour le calcul standard

Yan J i, Yuan de Kun, J.N. Chung et Yens-Cho Chen [14]. Un modèle de fluide-thermo-électrochimique tridimensionnel a été développé par les auteurs cités ci-dessus pour étudier le processus du transport de chaleur/masse et la performance d'une pile SOFC. Les objectifs principaux sont d'examiner les effets de la taille de canal de transport et d'évaluer le potentiel d'un film mince du

SOFC. L'étude paramétrique a été réalisée pour évaluer les effets des formes de canaux sur la température, la concentration d'espèces, la densité de courant locale et la densité de puissance. Les résultats démontrent que la diminution de la taille des canaux d'écoulement peut abaisser la température moyenne et améliorer l'efficacité des cellules. Cependant, cette amélioration est plutôt limitée pour les plus petits canaux. On opte pour la pile SOFC conventionnée qui est le SOFC miniaturisée avec une couche mince d'électrolyte qui a les avantages d'une plus basse température de fonctionnement et d'une meilleure performance. Basé sur nos résultats de simulation la densité de puissance du SOFC miniaturisé a pu atteindre jusqu'à 5.461 Wcm^{-3} .Le gradient de température d'une cellule avec une largeur de nervure plus épaisse aurait un rendement plus élevé et une plus basse température moyenne.

Paramètres et conditions	***Valeurs***
La température de prise de carburant (K)	*1100*
La température d'entrée d'air (K)	*1100*
Pression d'entrée (Pa)	*1.01×10^{5}*
Vitesse de prise de carburant (ms^{-1})	*0.6*
Vitesse d'entrée d'air (ms^{-1})	*2.5*
Longueur de cellule, L (m)	*0.05*
Largeur de cellule, W (m)	*3.2×10^{-3}*
Largeur de nervure, Wr (m)	*0.4×10^{-3}*
Taille de la manche, H (m)	*1.0×10^{-3}*
Largeur de la manche (m)	*2.4×10^{-3}*
Épaisseur de l'anode (m)	*5×10^{-5}*
Épaisseur de la cathode (m)	*5×10^{-5}*
Épaisseur de l'électrolyte (m)	*150×10^{-3}*
Résistivité électrique de l'électrolyte (Ω.m)	*$2.94 \times 10^{-5} \exp(10350/T)$*
Résistivité ionique pour anode (Ω.m)	*$2.98 \times 10^{-5} \exp(-1392/T)$*
Résistivité ionique pour cathode (Ω.m)	*$8.114 \times 10^{-5} \exp(500/T)$*
Résistivité de l'interconnexion (Ω.m)	*1×10^{-3}*
Résistance de contact (Ω.m)	*1×10^{-6}*
Densité des électrodes/électrolyte ($kg.m^{-3}$)	*4400*
Densité de l'interconnexion ($kg.m^{-3}$)	*5700*
Conductivité thermique pour anode/cathode	*12*
Conductivité thermique pour l'interconnexion (Wm^{-1}	*11*
Conductivité thermique pour l'électrolyte ($Wm^{-1} K^{-1}$)	*2.7*
Porosité (%)	*50*
Tortuosité	*3*
Densité de courant d'échange de l'anode (Am^{-2})	*6300*
Densité de courant d'échange de la cathode (Am^{-2})	*3000*
Perméabilité de l'anode et de la cathode (m^2)	*1.7×10^{-10}*
Rayon moyen de pore (m)	*1×10^{-6}*

Tableau I.9. *Paramètres modèles d'entrée pour le calcul standard.*

Des paramètres géométriques, tels que la largeur de nervure et l'épaisseur d'électrolyte, ont également des grands effets sur la performance d'une pile à combustible. En conséquence, la performance d'une pile SOFC est sensiblement affectée par le champ de température. Par exemple la résistivité de l'électrolyte à 1200 K, a pu être un ou deux ordres de grandeur plus petits que celle à 900 K dans le présent modèle. Puisque les cellules d'électrolyte supporté sont toujours conçues pour fonctionner à plus de 1100 K pour éviter une grande résistance ohmique en dedans de l'électrolyte, le carburant d'entrée et la température de l'air sont choisis à 1100 K dans le modèle actuel.

La température de fonctionnement d'une pile SOFC doit d'être maintenue à un niveau élevé, qui est essentiel à la conductibilité des ions dans l'électrolyte et à une cinétique élevée pour la réaction électrochimique, d'autre part, les températures élevées peuvent causer de plus grandes contraintes thermiques pour les électrodes. Habituellement on doit choisir la température d'une SOFC dans une marge raisonnable.

I.4.3.Schéma de paramètres du modèle physique 3D

La pile à combustible SOFC est composée d'une répétition de cellule à combustibles individuelles connectées en série. En plus la partie centrale d'un MEA (Membrane–Electrode Assembly) avec Anode poreuse, Électrolyte dense et couches de Cathode poreuse. La Figure (Fig. I.2) montre le schéma d'une cellule SOFC planaire en écoulement Co-Courant, écoulement Contre-courant et écoulement croisé.

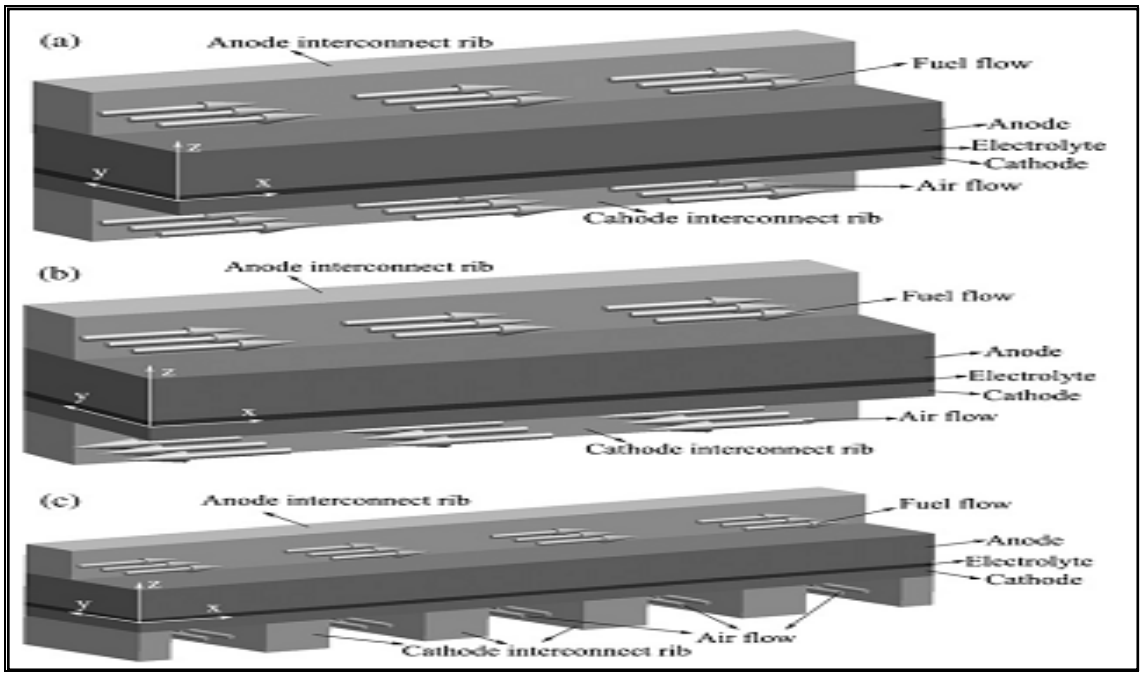


Fig. I.2.*Schémas des modèles de cellules de pile SOFC planaire. (a) : Ecoulement Co-courant ; (b) : Ecoulement Contre-courant ; (c) : Ecoulement croisé.[15]*

Paramètres	***Valeurs***
Épaisseur de l'anode (µm)	*750*
Épaisseur de la cathode (µm)	*50*
Épaisseur de l'électrolyte (µm)	*10*
taille de cellules actives (lx × ly , cm × cm)	*10 x 10*
Porosité de l'anode	*0.38*
Tortuosité de l'anode	*3*
Diamètre moyen de particules d'anode (µm)	*1*
Porosité de la cathode	*0.3*
Tortuosité de la cathode	*3*
Diamètre moyen de particule de cathode (µm)	*1*
La température de cellule (°C)	*700*
Conductivité d'anode de ($S.m^{-1}$)	*$3.356 \times 10^4 exp\ (1392/T)$*
Conductivité de la cathode ($S.m^{-1}$)	*$1.223 \times 10^4 exp\ (-600/T)$*
Conductivité de l'électrolyte ($S.m^{-1}$)	*$3.34 \times 10^4 exp\ (-10300/T)$*
Volume de diffusion de H_2 ($m^3\ mol^{-1}$)	*7.07×10^{-6}*
Volume de diffusion de H_2O ($m^3\ mol^{-1}$)	*12.7×10^{-6}*
Volume de diffusion d'O_2 ($m^3\ mol^{-1}$)	*16.6×10^{-6}*
Volume de diffusion de N_2 ($m^3\ mol^{-1}$)	*17.9×10^{-6}*
Perméabilité de l'anode (m^2)	*$7.93\ x10^{-16}$*
Perméabilité de la cathode (m^2)	*3.06×10^{-16}*
Pression d'entrée de fuel/air, P_{atm} (Pa)	*1.013×10^5*
Fraction molaire d'hydrogène dans le carburant	*0.97*
Tension de sortie de cellules (v)	*0.7*

Tableau I.10. *Paramètres de base, géométriques et matériels pour une cellule SOFC planaire utilisant l'hydrogène comme carburant et l'air comme oxydant.*

Composant	*ρ(Kg.m^{-3})*	*k(W.m^{-1}.K^{-1})*	*C_p(j.Kg^{-1}.K^{-1})*
Anode (Ni-YSZ dopé)	*3030*	*5.84*	*595*
Cathode (LSM)	*3310*	*1.86*	*573*
Électrolyte (YSZ)	*5160*	*2.16*	*606*
Collecteur de courant	*8030*	*20.0*	*502*
Canal d'air	*0.58*	*0.047*	*1051*
Canal de fuel	*0.2*	*0.2*	*5000*

Tableau I.11. *Propriétés matérielles des composants de la cellule.*

I.4.4. Géométrie d'une cellule

Les figures Fig. (I.3) et Fig. (I.4) montrent le schéma géométrique d'une unité de cellules de SOFC de type planaire qui représente toutes les dimensions utiles.

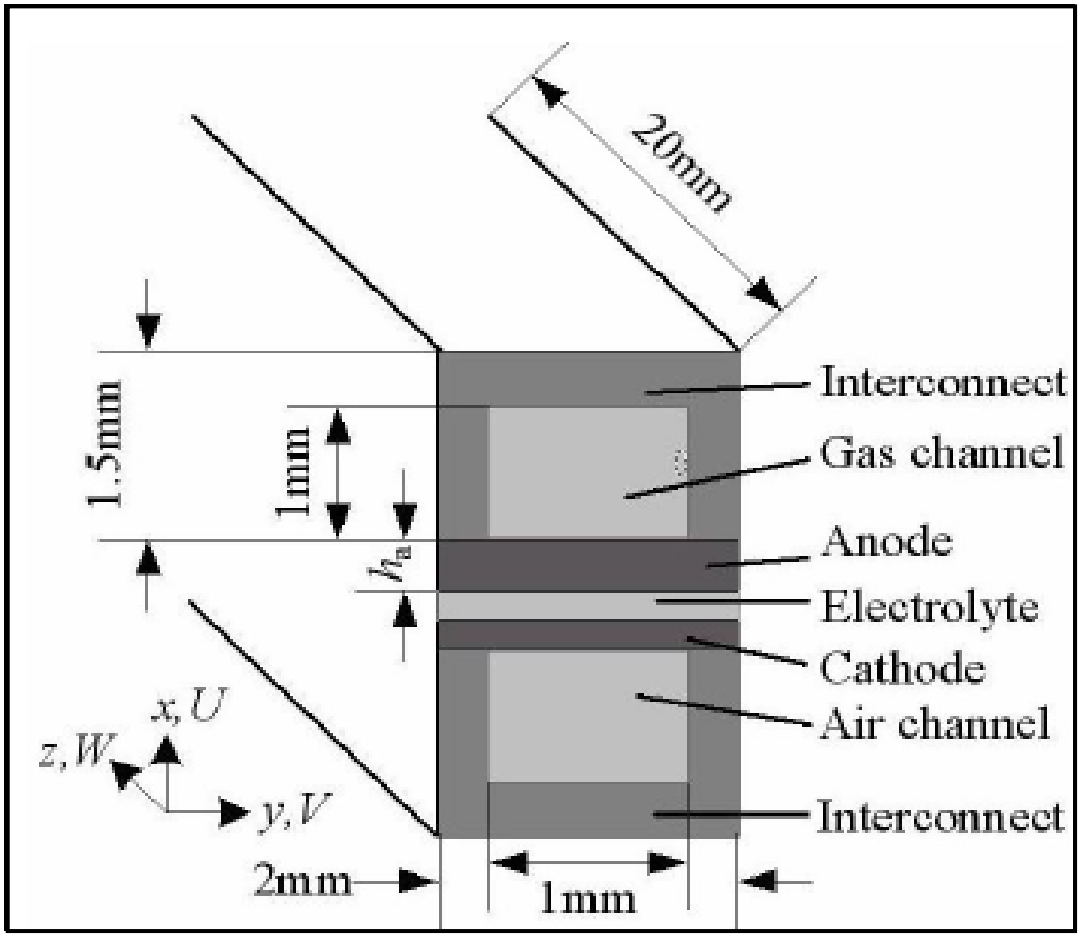


Fig. I.3*. Schéma d'une unité de cellules de SOFC. [21]*

- **Géométrie d'une cellule SOFC-P**

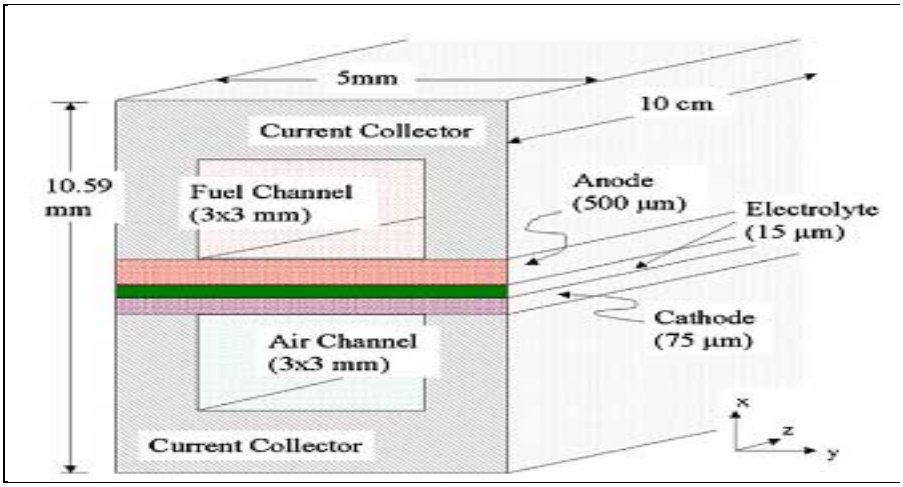


Fig. I.4. *La géométrie d'une cellule unitaire de pile SOFC de type planaire.[16]*

I.5. La conductivité

I.5.1. Les expressions de la conductivité

Y. Lin, S.B. Beale [4] et **Thameur Aloui**, **Kamel Halouani [7]**, ces auteurs ont procédé à un modèle dont les propriétés physiques sont présentées dans le Tableau I.12 :

Composant	*Épaisseur (mm)*	*Conductivité*	*Conductivité thermique*
Anode	*0.1*	*10^5*	*11*
Électrolyte	*0.1*	*Fig.I.5*	*2.7*
Cathode	*1.0*	*7690*	*2*
Interconnexion	*1.143*	*200*	*2*

Tableau I.12. *Propriétés physiques des matériaux dans SOFC. [4]*

Les conductivités thermiques sont calculées sur la base des valeurs effectives. La conductivité électrique de l'électrolyte dépend fortement de la température. Ceci est calculé, en utilisant la corrélation de Nagata comme suit :

$$\sigma = \beta_1 \exp\left(-\beta_2 / T\right) \qquad \text{(I.7)}$$

Où :

$$\beta_1 = 3.34\, x10^4 \text{ S/cm} \quad \text{et} \quad \beta_2 = 1.03\, x10^4 K\ .$$

Où la polarisation ohmique est due à la résistance à l'écoulement des ions dans l'électrolyte et l'écoulement d'électrons à travers les électrodes. Il vari

directement avec le courant. La conductivité ionique de l'électrolyte (YSZ) est exprimé par :

$$\sigma_{éle} = 3.34 \times 10^{4} \exp(-10300/T) \quad (I.8)$$

Alors que la conductivité électronique de l'anode (Ni-YSZ) et la cathode ($La_{1-x}Sr_xMnO_3$) sont respectivement exprimées par [7]:

$$\sigma_{an} = (95 \times 10^{6}/T)\exp(-1150/T) \quad (I.9)$$

$$\sigma_{ca} = (42 \times 10^{6}/T)\exp(-1200/T) \quad (I.10)$$

Coefficient de conductivité d'électrolyte (β_1)	*3,34 x $10^4 \Omega$ m*
Coefficient de conductivité d'électrolyte (β_2)	*1.03 x 10^4 K*
Densité de courant d'échange de référence ($i_{ex,an}$)	*5,5 x 10^4 A/cm²*
Densité de courant d'échange de référence ($i_{ex,ca}$)	*3,2 x 10^4 A/cm²*
Energie d'activation Anode	*1,1 x 10^5 J/mol*
Energie d'activation Cathode	*1,2 x 10^5 J/mol*

Tableau I.13. *Paramètres de modélisation. [22]*

On constate que la conductivité électrique de l'électrolyte est en fonction de la température. La conductivité électrique de toutes autres couches est constante. La valeur de la température maximale augmente au fur et à mesure que la densité de courant moyenne augmente d'une façon non-linéaire ainsi que la chaleur due à l'activation augmente avec la densité de courant, réciproquement la conductivité électrique de l'électrolyte augmente avec l'augmentation de la température.

La figure (Fig. I.5) décrivant la variation de la conductivité électrique d'électrolyte de zircone en fonction de la température dans l'intervalle de 600 à 1000°C.

Et la figure (Fig. I.6) décrit la variation de la conductivité électrique des composants (an, éle, ca) en fonction de la température.

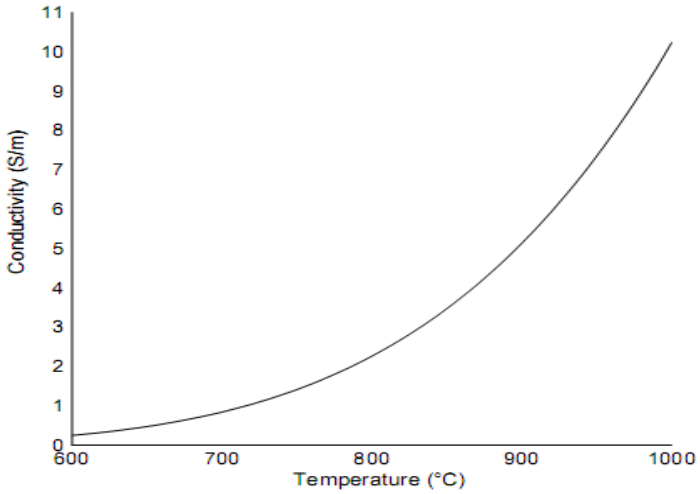


Fig. I.5.*Conductivité d'électrolyte de zircone (S/m) en fonction de la température.*

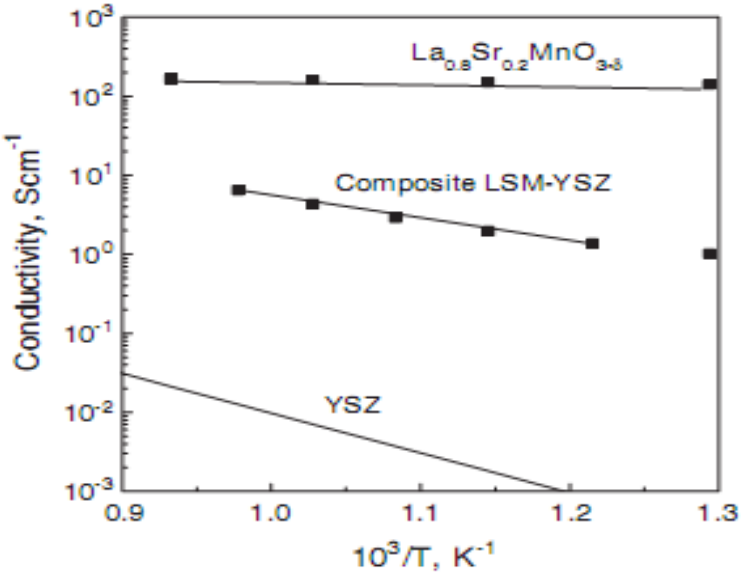


Fig. I.6.*Conductivité électrique des composites. [3]*

I.5.2.Comparaison des conductivités

On compare les conductivités électroniques et ioniques de CGO et YSZ indiquées ci-dessus la conductivité électronique sur le côté de l'anode est plus grande que la conductivité ionique sur le côté de la cathode pour les températures supérieure à 500°C. Les SOFCs à électrolyte de CGO et anode-supporté utilisent les conditions montrées dans le tableau(I.4) qui sont modelées à 500°C pour étudier les performances de la pile SOFC aux températures plus basses. La densité de puissance du SOFC à électrolyte-supporté par CGO atteint la valeur la plus élevée qui est de **293,44W/m²**, quand la densité de courant est de 700 A/m² et la tension réelle est de**0.4891V**. La densité de puissance du CGO pour une pile

SOFC à anode-a supporté a la valeur élevée de **2705,61 W/m²**, quand la densité de courant est 7300 A/m² et la tension réelle est **0,3758 V**.

Il peut voir que la réduction de performance avec la température décroissante n'est pas proportionnelle à la réduction de conductivité.

La figure (Fig.I.7) montre une comparaison graphique des conductivités d'électrolyte à différents matériaux pour YSZ et CGO, en fonction de la température variant dans l'intervalle de 500 à 1150°C.

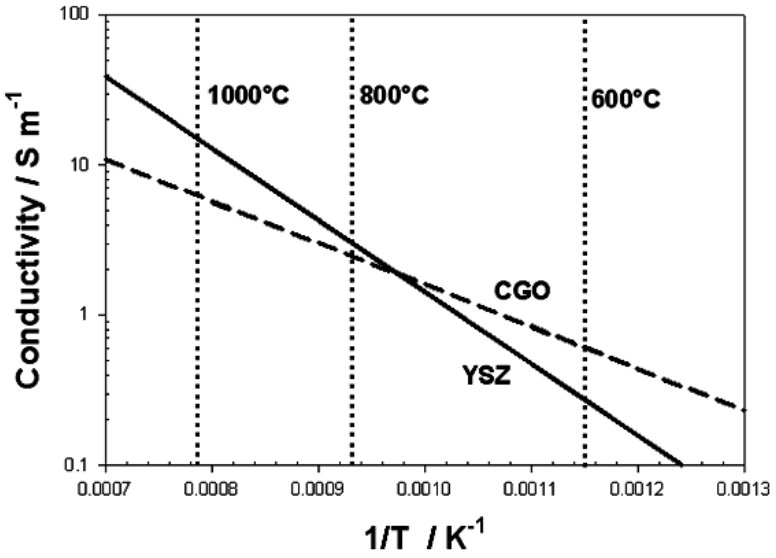


Fig. I.7.*Les comparaisons des conductivités d'électrolyte de YSZ et de CGO. [18]*

Composant	*Épaisseur [µm]*	*Conductivité [S/cm]*
Anode	*50*	*304*
Électrolyte	*10*	*129*
Cathode	*50*	*6.11×10^{-2}*
Interconnexion	*10*	*22×10^{3}*

Tableau I.14.*Épaisseur et conductivité des composants du SOFC. [30]*

I.6. Pile IT SOFC

Chan-Yeup Chung et Yong-Chae Chung [11] ont évalué avec succès par la simulation numérique basée sur la macro modélisation de la température intermédiaire de fonctionnement de la pile à combustible (IT-SOFC) dans cellule. Le système d'électrodes est composé et placé sur l'électrolyte à base de cérium. La courbe de polarisation est obtenue par la série de processus de calcul pour des

paramètres structuraux tels que la distance entre l'anode et la cathode et l'épaisseur de l'électrolyte.

Longueur de l'électrolyte (µm)	*1000*
Largeur de l'électrolyte (µm)	*160*
Épaisseur de l'électrolyte (µm)	*20*
Longueur de l'anode (µm)	*900*
Largeur de l'anode (µm)	*20*
Épaisseur de l'anode (µm)	*20*
Longueur de la cathode (µm)	*900*
Largeur de la cathode (µm)	*20*
Épaisseur de la cathode (µm)	*20*
Hauteur du canal de gaz	*200*

Tableau I.15. *Dimensions physiques d'une cellule SOFC.[11]*

Température d'entrée de l'anode et cathode	*1173*	*K*
Fraction molaire d'entrée Anode (H_2)	*97*	*%*
Fraction molaire d'entrée Anode (H_2O)	*3*	*%*
Pression de sortie pour Cathode et Anode	*1*	*bar*
Vitesse d'entrée d'écoulement d'air	*0,4*	*m/s*

Tableau I.16. *Conditions aux limites de fonctionnement. [11]*

I.7. Variation des pertes ohmiques avec l'épaisseur

Le comportement des pertes ohmiques selon la variation de l'épaisseur de l'électrolyte est montré sur la Figure suivante :

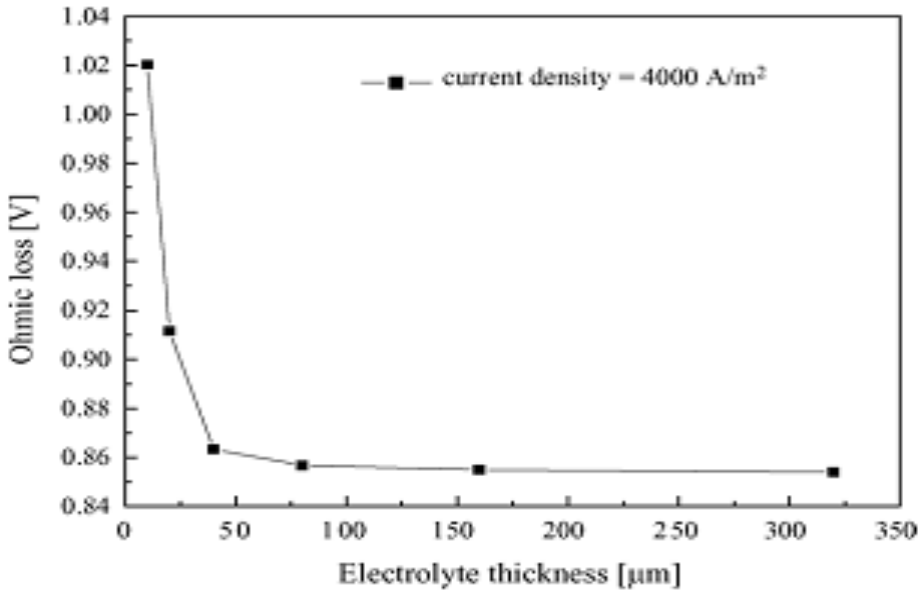


Fig. I.8. *Variation des pertes ohmiques avec l'épaisseur d'électrolyte.*

Ces pertes augmentent dans l'intervalle de l'épaisseur moins de 80 µm et converge aux épaisseurs au-dessus de cette valeur. Il peut donc, raisonnablement conclure que dans l'étape de fabrication d'une cellule SOFC, un électrolyte plus épais peut être utilisé sans détériorer les caractéristiques de fonctionnement.

La diffusivité de O_2 dans la cathode est beaucoup inférieur à celle de H_2 et H_2O dans l'anode, et en conséquence, la migration de l'oxygène dans la cathode est sensiblement retardée. En revanche, quand une quantité de gaz est injectée dans le côté de la cathode, la vitesse du gaz dedans est plus grande que celle dans l'anode. Cette hausse de vitesse fait augmenter la diffusion convective de l'oxygène dans la cathode et, par la suite abaisse les pertes de concentration. D'autre part, quand la direction de gaz injecté est parallèle à l'axe d'électrode, la densité de puissance prévue est sensiblement abaissée parce que la différence de concentration des espèces de gaz entre l'entrée et les régions de sortie du système de SOFC est étendue. Ceci provient du fait que la longueur des deux électrodes est 45 fois plus grande que la largeur.

I.8. Effet de la température d'entrée d'air et de taux d'écoulement de carburant sur la tension de cellule [13]

La température moyenne de pile est ajustée et maintenue à **1173** K, **1223** et **1273** K en changeant les taux de débit de masse d'air dans l'ordre de valider la comparaison avec les données expérimentales. La composition en carburant pour cette comparaison est 89% H_2, 11% H_2O, avec l'utilisation de carburant de 85%.

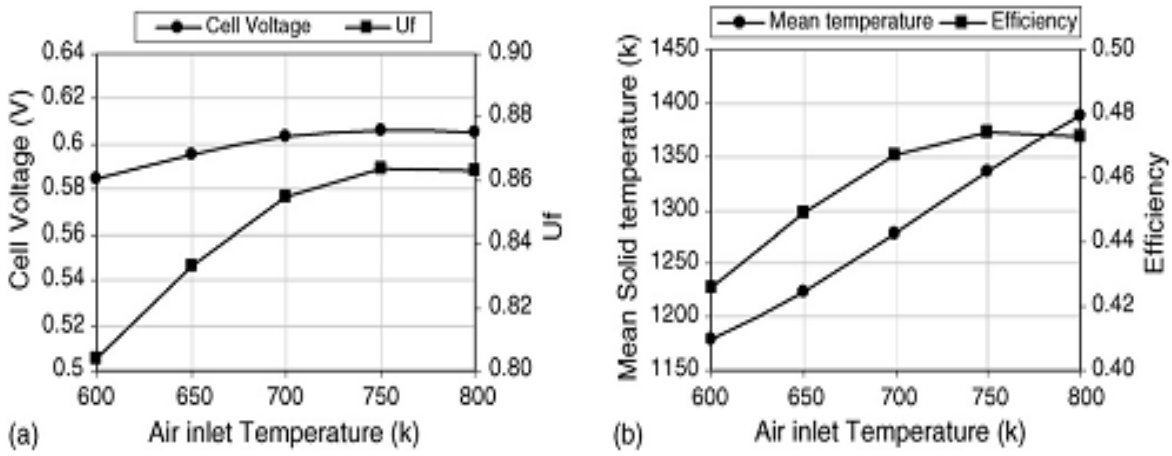


Fig. I.9.*Effet de la température d'entrée d'air sur*

(a) : la tension de cellule U_f ;(b) : la température moyenne et le rendement.

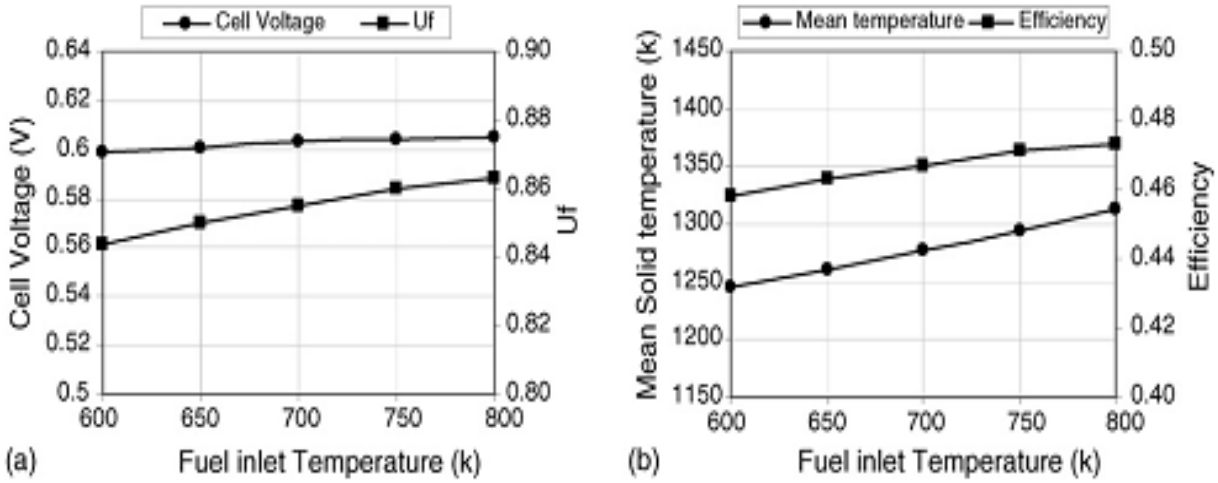


Fig. I.10.*Effet de rapport de taux d'écoulement de carburant sur*

(a) : la tension de cellule U_f ; (b) : la température moyenne et le rendement.

La température d'entrée d'air est variée et tous les autres paramètres d'entrée sont maintenus constants. La température moyenne augmente de 1180 à 1390 K quand la température d'entrée de l'air d'échauffement augmente de 600 à 800 K. La réduction des pertes irréversibles pendant le fonctionnement à haute température conduit à une meilleure performance en termes de tension de cellules U_f et en rendement.

Shixue Liu, Wei Kong et Zixing Lin [15].Dans cet article on décrit l'étude tridimensionnelle (3D) de l'écoulement Co-courant et courant croisé d'une cellule de pile à combustible SOFC planaire. Dans ce modèle on considère la conduction électronique dans les électrodes, la conduction ionique dans l'électrolyte, le transport de masse dans les électrodes poreuses et les réactions électrochimiques sur les frontières des trois phases. En se basant sur l'analyse de l'équation de la conductivité ionique pour la couche mince d'électrolyte, on propose une méthode mathématiquement équivalente pour mesurer l'épaisseur d'électrolyte avec le changement correspondant de la conductivité ionique pour modérer l'effet de la couche mince en étape de maillage et pour diminuer tout le nombre de degrés de liberté dans les modèles numériques (3D). Des exemples d'applications sont donnés avec les champs physiques typiques pour illustrer et discuter les caractéristiques de conceptions de l'écoulement Co-courant/croisé. Les modèles 3D sont également employés pour optimiser les largeurs de nervure dans les SOFCs en fonction de la résistance de contact de l'interconnexion- électrode. La

pile à combustible (SOFC) planaire Anode-supporté a une densité de puissance satisfaisante à la température intermédiaire. Les distributions des espèces de courant et de gaz dans une balance de cellules et de densités de puissance globales des piles de SOFC dans des applications pratiques de la macro-modélisation qui visent et prévoient la performance de SOFC au niveau des cellules et de pile ,ceux-ci est très utile pour améliorer des conceptions de géométrie, mais cette macro-modélisation est souvent limitée par les paramètres de modèles expérimentalement déterminés et ne poursuit pas la prévision des performances de pile à combustible avec différentes microstructures d'électrode. La modélisation en principe combine les avantages de la micro-modélisation et de la macro-modélisation. En fait, la plupart des macro-modèles ne sont pas vraiment 3D même si ils semblent d'être. D'ailleurs, ces modèles aussi bien que la plupart des autres modèles ignorent des issues dans la pile tels que les effets des nervures d' interconnexion sur la performance des SOFC planaires .

A.Chaisantikulwat, C.Diaz-Goano et E.S. Meadows [17]. Ont présenté un modèle de transport de chaleur par conduction avec une conductivité thermique effective et un régime instationnaire. La source de chaleur prise est la somme des trois sources de chaleur: Source de chaleur due aux surtensions ohmique (appliquée dans la structure solide entière), source de chaleur due à la surtension d'activation (appliquée aux interfaces électrode/électrolyte) et source de chaleur due à la formation de l'eau (appliquée à l'interface anode/électrolyte). Le matériau de l'anode, de l'électrolyte et de la cathode est Ni–YSZ, **8%**YSZ et LSM respectivement. Les Interconnexions sont des alliages de métal.

Les deux fluides sont l'air et H_2–H_2O–N_2 et la température des gaz est de 1023 K. La vitesse d'entrée de carburant et de comburant est de **1.25 m/s** et **1.87 m/s** respectivement. Les géométries d'une demi-cellule de SOFC et les propriétés physiques sont listées dans le Tableau suivant :

Composant	***ε(%)***	***k(m.Pa^{-1}.s^{-1})***	***C_p (j.Kg^{-1}.K^{-1})***	***λ(W.m^{-1}.K^{-1})***	***ρ(Kg.m^{-3})***
Anode	***30***	***1.7 x 10^{-7}***	***377***	***11.0***	***4760***
Cathode	***30***	***1.7 x 10^{-7}***	***377***	***2.37***	***4640***
Électrolyte	***/***	***/***	***100***	***2.7***	***6000***
Interconne	***/***	***/***	***300***	***2.2***	***Electrode***

Tableau I.17. *Propriétés physiques du SOFC.[17]*

Anchasa Pramuanjaroenkij, Sadik Kakac et Xiang Yang Zhoua [18] ont travaillé sur quelques problèmes en réduisant les coûts de fabrication des piles SOFCs et de matériaux, améliorant leurs performance, et ce pour permettre les commercialiser. Les SOFCs fonctionnent à températures élevées à partir de 600°C à 1000°C pour assurer la conductivité suffisante d'ion par leurs électrolytes qui sont non-conducteurs aux électrons. Les structures tubulaires, planaires, et monolithiques sont les structures primaires de SOFC.

La faiblesse d'un modèle mathématique est qu'il n'y a aucune garantie pour simuler les processus exacts en piles à combustible, particulièrement quand les inconnus devinés et arbitraires de certains sont incorporés au modèle. En raison de la nature approximative des modèles numériques, il y a également quelques erreurs dans des résultats de simulation. Néanmoins, la comparaison soigneuse entre les données numériques et expérimentales peut valider et améliorer le modèle comme outil prédictif.

Aussi ils on a développé un modèle mathématique pour une pile SOFC_P. Dans ce modèle, la cinétique électrochimique, la dynamique des gaz et le transport d'énergie et d'espèces sont couplés. La source de chaleur est la somme des deux sources: source due aux surtensions ohmiques et source de chaleur due au rayonnement. Ce modèle prévoit la courbe de polarisation, les champs de vitesse, de température, de concentration d'espèce et la distribution de courant dans la cellule selon les températures des gaz (500, 600, 800, et 1000°C) et les matériaux d'électrolyte employé sont YSZ et CGO. La SOFC_P à anode supportée avec un électrolyte en YSZ donne une densité de puissance élevée pour une gamme de densité de courant élevée que la SOFC à électrolyte supporté en YSZ à 800°C. La SOFC en YSZ donne une densité de puissance élevée que la SOFC en CGO à 750°C.

I.9. Influence de l'épaisseur de l'anode sur le rendement et sur la densité de puissance

Les Figures (Fig. I.11) et (Fig. I.12) représentent l'influence de l'épaisseur de l'anode sur les paramètres de la cellule notamment le rendement et la densité de puissance.

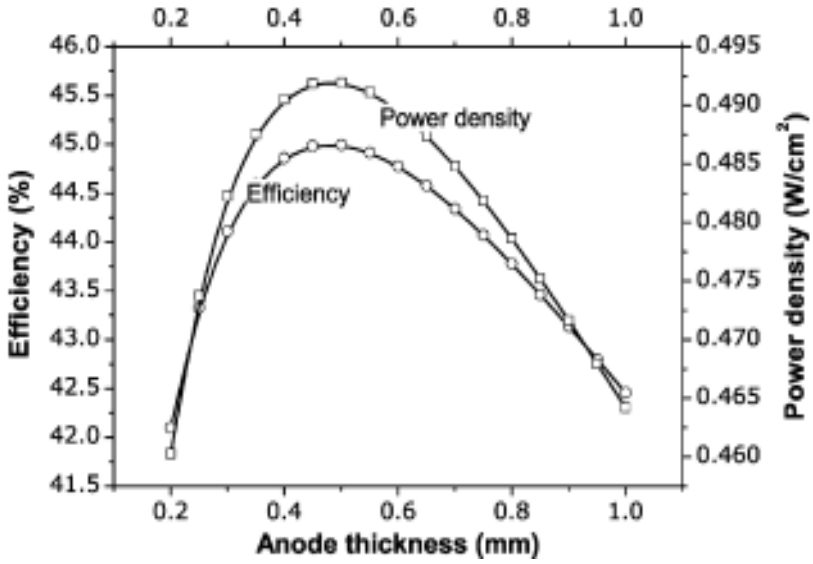


Fig. I.11.*Effet de l'épaisseur de l'anode sur le rendement et sur la densité de puissance à l'entrée de cathode T air est de 650°C.*

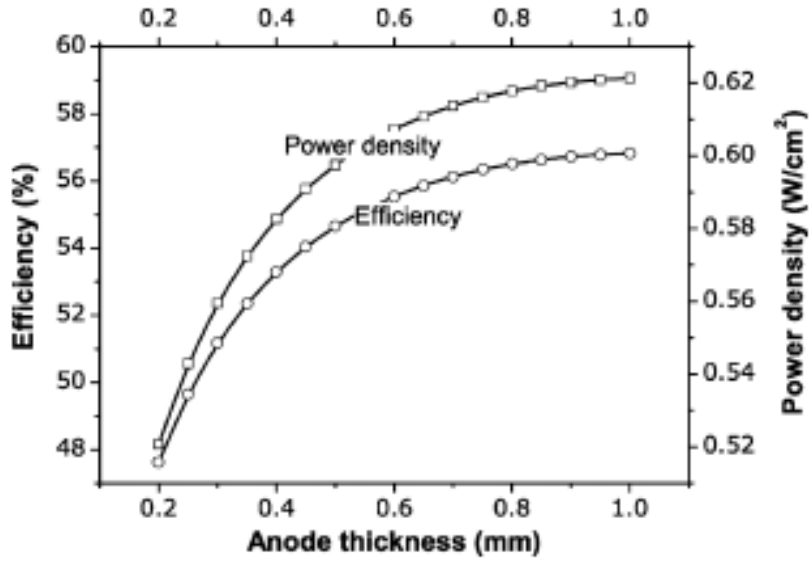


Fig. I.12.*Effet d'épaisseur de l'anode sur le rendement et sur la densité de puissance pour une opération de cellule dans des conditions isothermes.*

I.10. Pile Tube plat FT-SOFC anode supportée

Masayuki Suzuki, Naoki Shikazono, Koji Fukagata et **Nobuhide Kasagi [20]**, ont étudié au moyen de simulation numérique tridimensionnelle, le transfert de chaleur et de masse avec la réaction électrochimique dans une pile à combustible à anode-supportée de tube plat (FT-SOFC). Les distributions des champs de réaction dans le FT-SOFC anode-supportée s'avèrent semblables à ceux dans le SOFC planaire avec l'arrangement Co-écoulement. Cependant, en

comparaison de ce dernier, la concentration et les polarisations d'activation du SOFC-P peuvent être réduites par diffusion additionnelle de réactif par la nervure poreuse du canal de carburant. L'aperçu paramétrique indique que, parce que pour un modèle fixe de polarisation d'activation, la tension de courant et le rendement peuvent être améliorés en augmentant la taille de pore de l'anode, alors que la géométrie en coupe (Fig. I.13) a un effet léger sur la performance de cellules. En se basant sur les résultats de la simulation tridimensionnelle, nous développons également un modèle numérique simplifié de FT-SOFC anode-supporté, qui tient compte des gradients de concentration dans l'anode épaisse de la géométrie en coupe. Le modèle simplifié prévoit la tension de rendement aussi bien que les distributions de la température et de la densité de courant avec le coût informatique très bas. Ainsi, il peut être employé comme outil puissant pour examiner à grand échelle les paramètres de conception anode-supportée de FT-SOFC. La Figure (Fig. I.13) montre le FT-SOFC anode-supporté considéré dans la présente étude. Suivant les indications de la Figure (Fig. I.13(a)), elle a une structure périodique dans la direction (z) dans le sens de la largeur. La cellule d'unité se compose d'électrolyte, de cathode, d'anode avec un canal de carburant, d'interconnexion et de canal d'air entre les couches adjacentes de cellules. L'anode épaisse joue un rôle de soutenir mécaniquement la cellule. Les directions d'écoulement d'air et de carburant sont dans l'arrangement Co-écoulement.

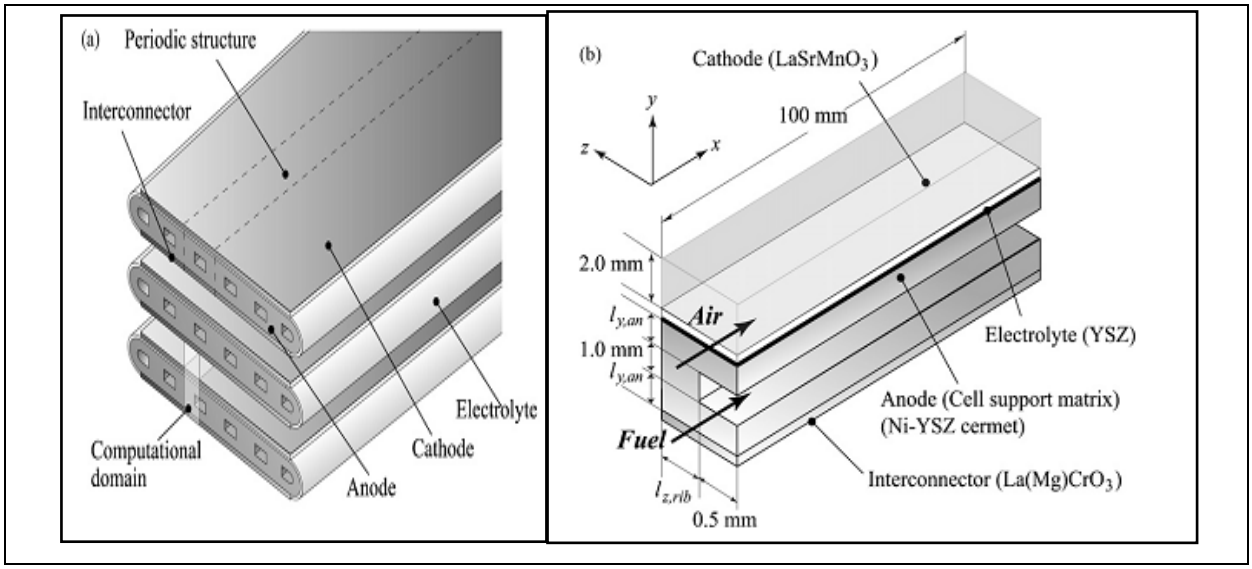


Fig. I.13.*(a) :Schéma du FT-SOFC anode-supportée. (b) : Modèle du FT-SOFC anode-supporté. [20]*

Composant	ρ	C_p	λ	σ	ε	τ	d_p
Électrolyte	-	-	***2.0***	$3.0x10^{-3}exp(10300/T)$	-	-	-
Cathode	$5.62x10^{3}$	***0.45***	***11.0***	$1.2x10^{-2}$	***0.5***	***3.0***	***1.0***
Anode	$7.0x10^{3}$	***0.45***	***10.0***	$2.98x10^{-3}exp(-1392/T)$	***0.5 - 0.6***	***Eq (*)***	***1.0 - 2.0***
Interconnexion	-	-	***6.0***	$5.0x10^{-1}exp(693.14/T)$	-	-	-

Tableau I.18. *Propriétés physiques des composants de cellules.[20]*

τ : tortuosité facteur de l'électrode ; d_p : diamètre de pore de l'électrode(m) ; σ : résistivité (Ω cm).

$\tau_{an} = 5.0 - 4.\varepsilon_{an} = \tau_{ca}$ (*). [20]

Température d'entrée de gaz $T_{gaz,in}$ (°C)	**600**
Pression d'entre $P_{gaz,in}$ (atm)	**1.0**
Taux d'utilisation de O_2	**0.3**
Taux d'utilisation de H_2	**0.85**
Largeur/hauteur du canal de fuel (mm)	**1.0**
Longueur de la cellule (mm)	**100**

Tableau I.19. *Paramètres communs à tous les cas.*

I.11. Les caractéristiques thermoélectriques

Une pile à combustible (SOFC) se compose d'une structure d'interconnexion et d'une région de trois couches composées de deux électrodes en céramique, anode et cathode, séparées par un électrolyte en céramique dense (souvent désigné sous le nom de PEN : Positif-électrode/Électrolyte/Négatif-électrode).Les géométries d'unité de cellules de SOFC sont données comme suit : épaisseur d'anode = 2 mm, épaisseur d'électrolyte = 20 µm et de cathode = 50 µm.

Composants de cellule	***Porosité***	***Tortuosité***	***Perméabilité***	***Conductivité thermique***	***Densité***	***Chaleur spécifique***
Anode	***46***	***4.5***	$1.7x10^{-10}$	***6.2***	***6200***	***0.65***
Cathode	***46***	***3.0***	$1.7x10^{-10}$	***9.6***	***6000***	***0.9***
Électrolyte	--	--	--	***2.7***	***5560***	***0.3***
Interconnexion	--	--	--	***9.6***	***7700***	***0.8***

Tableau I.20. *Propriétés de paramètres des composants de la cellule SOFC.*

Température d'entrée		***Composition d'entrée de carburant (fuel)***		***Composition d'entrée d'oxydant***		***Tension de fonctionnement (V)***
$T_{air}^{in}(K)$	$T_{fuel}^{in}(K)$	$X_{H_2O}^{in}$	$X_{H_2}^{in}$	$X_{O_2}^{in}$	$X_{N_2}^{in}$	
1173	***1173***	***0.4***	***0.6***	***0.21***	***0.79***	***0.60 - 0.80***

Tableau I. 21. Les paramètres informatiques calculés dans un système de H2-H2O pour un écoulement Co-écoulement.

I.12. L'équation d'énergie utilisée

Dans les canaux et les électrodes, l'équation d'énergie utilisée est la suivante:

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\rho\varepsilon C_p T\right) - \varepsilon\frac{\partial p}{\partial t} + \nabla.\left(\rho\varepsilon C_p V T\right) = \nabla.\varepsilon\left(-\lambda_{eff}\nabla T\right) + S_T \qquad \text{(I.11)}$$

L'objectif du travail actuel est de développer un modèle mathématique pour analyser une performance de pile à combustible planaire. L'analyse emploie un programme interne qui peut aider des promoteurs à comprendre tous les paramètres et effets qui affectent les solutions des équations gouvernantes considérées. À cette fin, un modèle de transport du SOFC planaire ajouté à la réaction électrochimique est développé en employant différents matériaux pour des composants à savoir un électrolyte fait à partir du zircone stabilisée à l'yttrium (YSZ) et du cérium dopé en gadolinium (CGO), l'anode faite à partir du cermet de nickel-zircone, la cathode faite à partir du LSM (Manganite de Lanthane dopée au Strontium) et l'interconnexion en céramique faite à partir des chromites de lanthane dopé au strontium.

Numériquement par un programme informatique interne basé sur une méthode de différences finies. En raison des températures de fonctionnement de SOFC à 500, 600, 800°C et 1000°C, l'équation modifiée de Nernst est employée pour obtenir une tension réversible de cellules. La polarisation de concentration est calculée à un point électrochimique.

Pour faciliter une vue globale des limitations de ce travail, les prétentions suivantes sont tenues compte dans l'analyse : on assume que les mélanges de gaz sont des gaz parfaits, les écoulements incompressibles et monophasés avec les propriétés physiques constantes comme la viscosité, la conductivité thermique, et le coefficient de diffusion. Le flux de l'écoulement de fluide est laminaire en plein essai partout. En considérant qu'il est Co-écoulement dans des canaux de gaz. La température de la phase gazeuse à l'intérieur des pores et la température de la matrice pleine s'égalisent instantanément.

Les procédés dynamiques, thermodynamiques, électrochimiques et chimiques de modèle de SOFC doivent correspondre aux composants dans les différents domaines du SOFC. Bien que l'équilibre de l'opération est une bonne prétention de base dans la majorité de la partie d'analyse du modèle.

Chapitre II

Modélisation numérique du champ thermique dans une cellule SOFC le long de l'écoulement des gaz

II.1. Introduction

L'objectif de ce travail est consacré à l'étude bidimensionnelle du champ thermique où on a choisis un modèle physique et mathématique dans les différentes parties de la cellule de pile SOFC (anode, électrolyte et cathode) ; dans notre modèle on s'intéresse à quatre types de sources de chaleur : $S_{réact.chim}$, $S_{perte.ohm}$, $S_{perte.act}$ et $S_{perte.con}$ et également les dimensions de l'anode, de la cathode et de l'électrolyte. Aussi on a les pertes principales (les polarisations ou les surtensions η) dans la pile à combustible sont : polarisation d'activation (η_{act}), polarisation ohmique (η_{ohm}), polarisation de concentration (η_{conc}) et polarisation électrochimique ($\eta_{éle.chim}$). La tension réelle de la cellule est inférieure à la tension de circuit ouvert (OCV).

Dans les canaux d'air et de carburant, généralement, on suppose que la consommation de l'oxygène et de l'hydrogène ne réduira pas considérablement les densités d'air et de carburant, et on assume que la circulation d'air est incompressible, les propriétés liquides sont constantes et la réaction chimique ne se produit pas dans les canaux d'air et de carburant et se produit seulement dans la phase gazeuse.

En plaçant la valeur correcte pour la porosité dans chaque domaine (ε =1 pour les canaux d'écoulement).Les quatre équations de conservation sont valides dans tous les domaines gazeux de transport.

Ces pertes (pertes d'activation, pertes ohmiques, pertes de concentration et pertes électrochimiques) sont présentes dans toutes les conceptions et ne peuvent pas être éliminées mais doivent être intégrées dans le système. En effet, la chaleur est nécessaire pour maintenir la température de fonctionnement des cellules. L'avantage et la concurrence du SOFC au-dessus des autres piles à combustible est la température élevée de la chaleur d'échappement qui rend sa commande et utilisation simples et économiques.

II.2. Modèle physique

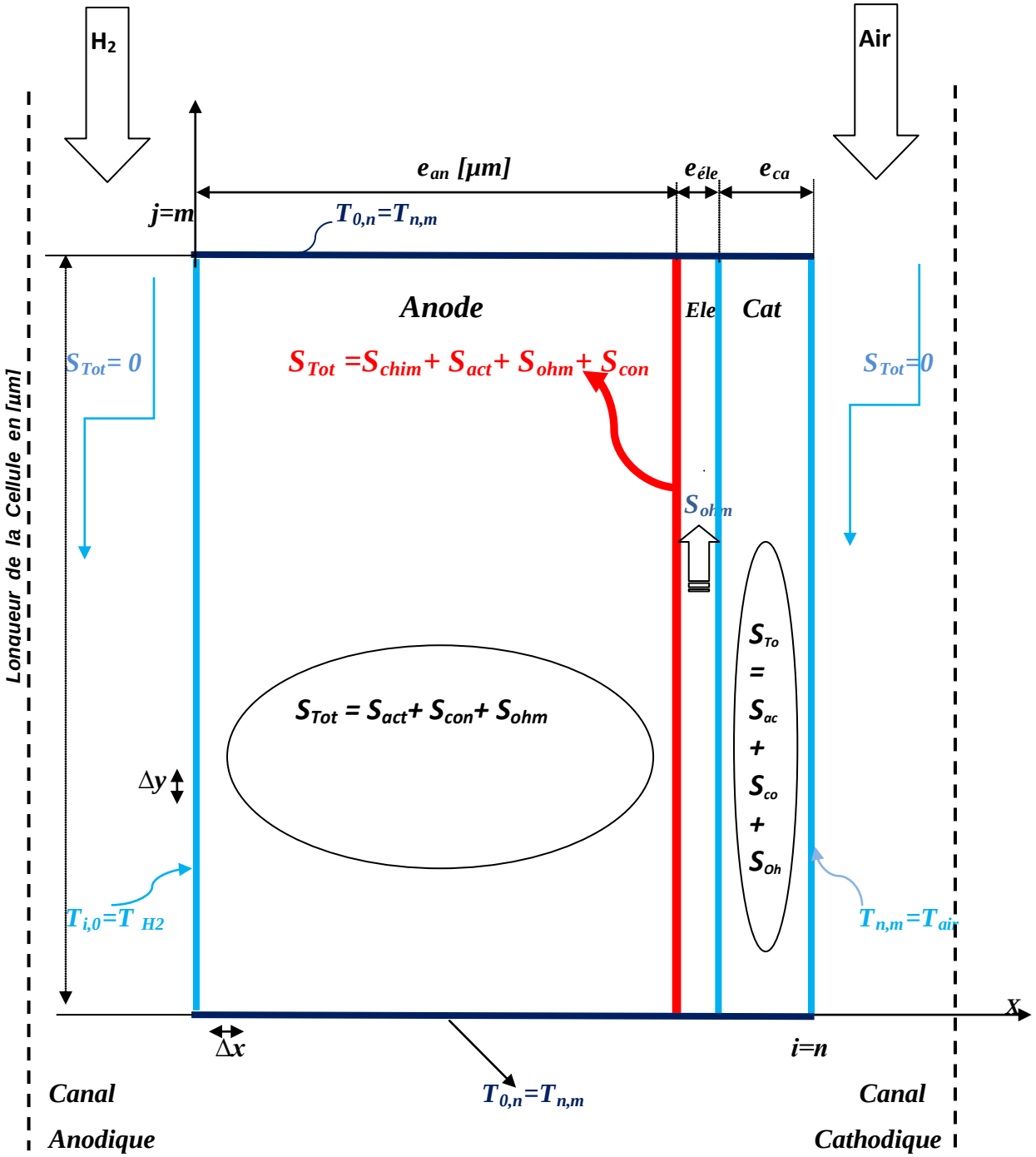


Fig.. II.1.Schéma du modèle physique.

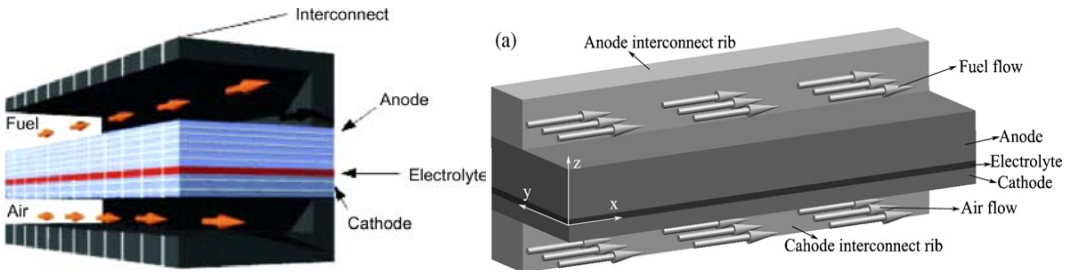


Fig. II.2.*Représentation d'une cellule planaire (écoulement longitudinal).[19], [15]*

II.3. Modèle mathématique

Les modèles mathématiques de SOFC aident à comprendre, examiner et désigner les divers composants et paramètres de fonctionnement de SOFC. Les résultats de modélisation peuvent être employés pour optimiser des conceptions et pour choisir des états optimums de fonctionnement.

Le champ thermique d'une pile à combustible SOFC Planaire est régit par les équations suivantes : équation de conservation de masse, équation de conservation des espèces, équation d'énergie et la loi de Darcy.

- Équation de continuité

$$div\left(\varepsilon\rho u\right)=0 \tag{II.1}$$

- Équation de conservation d'espèces

$$div\left(\varepsilon\rho u X_i\right)=div\left(\rho D_{eff}\, grad\left(X_i\right)\right)+S_{X_i} \tag{II.2}$$

- Équation de conservation d'énergie

$$div\left(\varepsilon\rho C_P u T\right)=div\left(\lambda_{eff}\, grad\left(T\right)\right)+S_T \tag{II.3}$$

- Loi de Darcy (pour quantité de mouvement).[14], [20], [4]

Dans ce modèle, l'ensemble du domaine de calcul est constitué de trois Sous-domaines : poreux (électrodes), solide(interconnexions et l'électrolyte) et les régions fluides purs(écoulements).il a été démontré par des expériences que l'écoulement du fluide dans les milieux poreux a un flux à faible vitesse du gaz avec un nombre de Reynolds beaucoup inférieur à l'unité .par conséquent , ce flux est traité comme laminaire et incompressible et il est également supposé que le milieu poreux est homogène et en équilibre thermodynamique avec le fluide.

Dans la région poreuse l'écoulement est régi par la loi de Darcy, tandis que dans les régions fluides les équations de Navier-Stokes décrivent le comportement de l'écoulement.

$$u = \frac{k}{\varepsilon\mu} gradP \tag{II.4}$$

L'équation de tension de la pile

$$U = E_{id} - Pertes = E_{id} - \left(\eta_{ohm} + \eta_{con} + \eta_{act} + \eta_{chim}\right) \tag{II.5}$$

$$U_{cel} = E_{Nernst} - (\eta_{ohm} + \eta_{act} + \eta_{con} + \eta_{chim}) \tag{II.6}$$

Où : $$E_{id}(T) = E^{0}_{stand}(T) - \frac{RT}{nF}\ln\left(\frac{X_{H_2O}}{X_{H_2} X_{O_2}}\right) \tag{II.7}$$

Le potentiel standard est donné par [14], [25], [27] :

$$E^{0}_{\text{stand}} = 1,2723 - 2.7645\times10^{-4}\times T \tag{II.8}$$

Quelques notations pour la tension de la pile :

$$E_{idéal} = E_{Nernst} = E_{force-électromotrice} = E_{réversible} = E_{OCV}$$

OVC : Tension du Circuit Ouvert (Open Voltage Circuit)

La tension de la pile est notée comme

$$U_{cell} = E_{rév} - \eta_{con,an/ca} - \eta_{ohm} - \eta_{act,an/ca} \tag{II.9}$$

La surtension ohmique est définie comme

$$\eta_{ohm} = i \cdot \sum r_j e_j \qquad j = an/ca/éle \tag{II.10}$$

r : *résistivité* et e : *épaisseur*

Le courant de la cellule d'après l'équation de Butler-Volmer

$$i = i_0 \cdot \left[\exp\left(\alpha \frac{nF}{RT}\eta_{act}\right) - \exp\left(-(1-\alpha)\frac{nF}{RT}\eta_{act}\right)\right] \tag{II.11}$$

α : Coefficient apparent de transfert de charge. Si on l'assume à 0,5 l'équation devient :

$$i = 2i_0 \sinh^{-1}\left(\frac{nF}{2RT}\eta_{act}\right) \quad \text{(II.12)}$$

Des simplifications ont été faites pour faciliter notre étude :

1. Mode de transfert par rayonnement est négligeable.
2. Modèle bidimensionnel et stationnaire.
3. L'air (ou O_2) et H_2 sont incompressibles (supposition).

II.3.1. Équations gouvernantes

La pile à combustible (SOFC) peut être traitée thermodynamiquement en termes d'enthalpie libre de la réaction du carburant avec de l'oxydant. De l'hydrogène et l'oxygène sont employés pour illustrer le calcul du travail réversible à l'équilibre pour la réaction réversible. La chaleur doit également être transférée réversiblement à l'environnement. Lors du fonctionnement d'un SOFC, on décrit deux effets qui interviennent pour réduire le courant électrique fourni par une cellule idéale, le premier est la résistance ohmique qui produit de la chaleur et la seconde est le mélange des gaz qui fait abaisser la tension de courant progressivement pendant l'emploi du carburant dans la réaction.

II.3.1.1. Équation d'énergie

Interconnexion

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(\lambda\frac{\partial T}{\partial x}\right)+\frac{\partial}{\partial y}\left(\lambda\frac{\partial T}{\partial y}\right)=0 \quad \text{(II.13)}$$

$S_{T,intercon} = 0$ (Pas de sources de chaleur à l'interconnexion).

Cathode

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(\varepsilon_{cat}\left(\rho C_p u\right)T\right)+\frac{\partial}{\partial y}\left(\varepsilon_{cat}\left(\rho C_p v\right)T\right)=\frac{\partial}{\partial x}\left(\lambda\frac{\partial T}{\partial x}\right)+\frac{\partial}{\partial y}\left(\lambda\frac{\partial T}{\partial y}\right)+S_{T,cat} \quad \text{(II.14)}$$

La source totale de chaleur dans la cathode est exprimée comme :

$$S_{T,cat} = S_{con,ca} + S_{ohm,ca} + S_{act,ca} = i\,\eta_{con,ca} + \frac{i^2}{\sigma_{ca}} + i\,\eta_{act,ca} \quad \text{(II.15)}$$

Les surtensions dans la cathode sont données :

$$\eta_{con,ca} = \frac{RT}{4F}\ln\left(1-\frac{i}{i_{l,ca}}\right) ; \eta_{con,ca} = \frac{RT}{F}\sinh^{-1}\left(\frac{i}{2i_{0,ca}}\right) \quad \text{(II.16) ;(II.17)}$$

La densité de courant d'échange et limitative sont respectivement :

$$i_{0,ca} = \gamma_{ca}\frac{RT}{2F}\exp\left(-E_{ca}/RT\right) ; i_{l,ca} = \frac{4FP_{O_2}D_{ca}}{\left(\left(P-P_{O_2}\right)/P\right)RTe_{ca}} \quad \text{(II.18) ; (II.19)}$$

II.3.1.2. Équation de conservation d'espèces

Équation de conservation d'espèces pour

O_2 $$\frac{\partial}{\partial x}\left(\varepsilon_{cat}\left(\rho u\right)_{air}X_{O_2}\right)+\frac{\partial}{\partial y}\left(\varepsilon_{cat}\left(\rho v\right)_{air}X_{O_2}\right)=\frac{\partial}{\partial x}\left(\varepsilon_{cat}\rho_{air}D_{eff,O_2}\frac{\partial X_{O_2}}{\partial x}\right)+\frac{\partial}{\partial y}\left(\varepsilon_{cat}\rho_{air}D_{eff}\frac{\partial X_{O_2}}{\partial y}\right)+S_{O_2,cat} \quad \text{(II.20)}$$

$$S_{O_2,cat} = \frac{M_{O_2}}{2F}i \quad \text{(II.21)}$$

Équation de conservation d'espèces pour H_2

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(\varepsilon_{an}\left(\rho u\right)_{H_2}X_{O_2}\right)+\frac{\partial}{\partial y}\left(\varepsilon_{an}\left(\rho v\right)_{H_2}X_{H_2}\right)=\frac{\partial}{\partial x}\left(\varepsilon_{an}\rho_{H_2}D_{eff,H_2}\frac{\partial X_{H_2}}{\partial x}\right)+\frac{\partial}{\partial y}\left(\varepsilon_{an}\rho_{H_2}D_{eff}\frac{\partial X_{H_2}}{\partial y}\right)+S_{H_2,an}$$

$$S_{H_2,an} = \frac{M_{H_2}}{2F}i \quad \text{(II.22) (II.23)}$$

Équation de conservation d'espèces pour H_2O

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(\varepsilon_{an}\left(\rho u\right)_{H_2}X_{H_2O}\right)+\frac{\partial}{\partial y}\left(\varepsilon_{an}\left(\rho v\right)_{H_2}X_{H_2O}\right)=\frac{\partial}{\partial x}\left(\varepsilon_{an}\rho_{H_2}D_{eff,H_2O}\frac{\partial X_{H_2O}}{\partial x}\right)+\frac{\partial}{\partial y}\left(\varepsilon_{an}\rho_{H_2}D_{eff,H_2O}\frac{\partial X_{H_2O}}{\partial y}\right)+S_{H_2O,an} \quad \text{(II.24)}$$

Anode

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(\varepsilon_{cat}\left(\rho C_p u\right)_{H_2}T\right)+\frac{\partial}{\partial y}\left(\varepsilon_{cat}\left(\rho C_p v\right)_{H_2}T\right)=\frac{\partial}{\partial x}\left(\lambda_{eff,an}\frac{\partial T}{\partial x}\right)+\frac{\partial}{\partial y}\left(\lambda_{eff,an}\frac{\partial T}{\partial y}\right)+S_{T,an} \quad \text{(II.25)}$$

La source totale de chaleur dans l'anode est :

$$S_{T,an} = S_{con,an}+S_{ohm,an}+S_{act,an} = i\eta_{con,an}+\frac{i^2}{\sigma_{an}}+i\eta_{act,an} \quad \text{(II.26)}$$

$$= \frac{RT}{4F}\ln\left(1-\frac{i}{i_{l,an}}\right)+\frac{i^2}{\sigma_{an}}+\frac{RT}{F}\sinh^{-1}\left(\frac{i}{2i_{0,ca}}\right) \quad \text{(II.27)}$$

La densité de courant d'échange et limitative sont respectivement :

$$i_{0,an} = \gamma_{an} \frac{RT}{2F} \exp\left(-E_{an}/RT\right) ; \; i_{l,an} = \frac{2FP_{H_2} D_{an}}{RTe_{an}} \qquad \text{(II.28) ; (II.29)}$$

Interface Cathode/Électrolyte

Les sources d'énergie existantes dans l'interface cathode/électrolyte sont :

- Source due aux pertes ohmiques.
- Source due aux pertes de concentration.
- Source due aux pertes d'activation.

$$S_T = S_{ohm} + S_{con} + S_{act} = \frac{i^2}{\sigma_{cat}} + i\eta_{con} + i\eta_{act} \qquad \text{(II.30)}$$

Interface Anode/Électrolyte

On ajoute la 4ème source de chaleur celle dégagée par la formation de l'eau :

$$S_{chim} = \frac{Q_{chim}}{2F} \frac{i}{e} = \frac{T\,\Delta S}{2F} \frac{i}{e} \qquad \text{(II.31)}$$

$$S_T = S_{ohm} + S_{con} + S_{act} + S_{chim} \qquad \text{(II.32)}$$

Électrolyte

La seule source de chaleur dans l'électrolyte est celle de la source ohmique :

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(\lambda_{éle} \frac{\partial T}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\lambda_{éle} \frac{\partial T}{\partial y}\right) + S_{T,éle} = 0 \qquad \text{(II.33)}$$

$$S_{T,éle} = S_{ohm,éle} = \frac{i^2}{\sigma_{éle}} \qquad \text{(II.34)}$$

Où:

La conductivité ionique est donnée par :

$$\sigma_{éle} = 3.34 \times 10^4 \exp\left(-10300/T\right) \qquad \text{(II.35)}$$

II.3.2. Résolution numérique

$$\begin{cases} div\left(\varepsilon\rho u\right)=0 & \text{(II.36)} \\ div\left(\varepsilon\rho u X_i\right)=div\left(\rho D_{eff}\, grad\left(X_i\right)\right)+S_{X_i} & \text{(II.37)} \\ div\left(\varepsilon\rho u C_p T\right)=div\left(\lambda_{eff}\, grad\left(T\right)\right)+S_T & \text{(II.38)} \\ \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\kappa\rho}{\mu}\frac{\partial p}{\partial x}\right)+\frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{\kappa\rho}{\mu}\frac{\partial p}{\partial y}\right)=0 & \text{(II.39)} \end{cases}$$

Les quatre (04) équations précédentes sont celles de conservation de masse, d'espèces et d'énergie et l'équation de Darcy, qui peuvent êtres modélisées par l'équation générale de transport :

$$\underbrace{div\left(\varepsilon\rho u\,\Phi\right)}_{\text{I:}convectif}=\underbrace{div\left(\Gamma_\Phi grad\,\Phi\right)}_{\text{II:}diffusif}+S_T \qquad \text{(II.40)}$$

Φ : Variable générale.

Γ_Φ : Coefficient de diffusion.

- Équation de continuité : $\Phi = 1$; $\Gamma_\Phi = 0$; $S_\Phi = 0$.
- Équation d'énergie : $\Phi = T$; $u, v = u\ C_p$; $\Gamma_\Phi = \lambda_{\substack{an,élé \\ cat,\text{int}}}$; $S_T = S_\Phi$.
- Équation d'espèces : $\Phi = X_i$; $\Gamma_\Phi = \rho D_{eff,i}$.
- Équation de pression : $\Phi = P$; $\Gamma_\Phi = \frac{\kappa\rho}{\mu}$; $S_\Phi = 0$.

II.3.3. Discrétisation de l'équation de transport

Méthode des différences finies (méthode explicite)

$$\frac{\partial\left(\varepsilon\rho u\Phi\right)}{\partial x}+\frac{\partial\left(\varepsilon\rho v\Phi\right)}{\partial y}=\Gamma_\Phi\left(\frac{\partial^2\Phi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\Phi}{\partial y^2}\right)+S_\Phi \qquad \text{(II.41)}$$

1. Terme convectif

Suivant l'axe OX :

$$\frac{\partial(\varepsilon\rho u\Phi)_{(i,j)}}{\partial x}=\frac{(\varepsilon\rho u\Phi)_{(i,j+1)}-(\varepsilon\rho u\Phi)_{(i,j-1)}}{2\Delta x} \qquad \text{(II.42)}$$

Suivant l'axe OY :

$$\frac{\partial(\varepsilon\rho v\Phi)_{(i,j)}}{\partial y}=\frac{(\varepsilon\rho v\Phi)_{(i+1,j)}-(\varepsilon\rho v\Phi)_{(i-1,j)}}{2\Delta y} \qquad \text{(II.43)}$$

2. Terme diffusif

Suivant l'axe OX :

$$\Gamma_{\Phi}\frac{\partial^2\Phi_{(i,j)}}{\partial x^2}=\Gamma_{\Phi}\left(\frac{\Phi_{(i,j-1)}-2\Phi_{(i,j)}+\Phi_{(i,j+1)}}{\Delta x^2}\right) \qquad \text{(II.44)}$$

Suivant l'axe OY :

$$\Gamma_{\Phi}\frac{\partial^2\Phi_{(i,j)}}{\partial y^2}=\Gamma_{\Phi}\left(\frac{\Phi_{(i-1,j)}-2\Phi_{(i,j)}+\Phi_{(i+1,j)}}{\Delta y^2}\right) \qquad \text{(II.45)}$$

- Schéma de D.F

Le point central est : $\Phi_{(i,j)}$

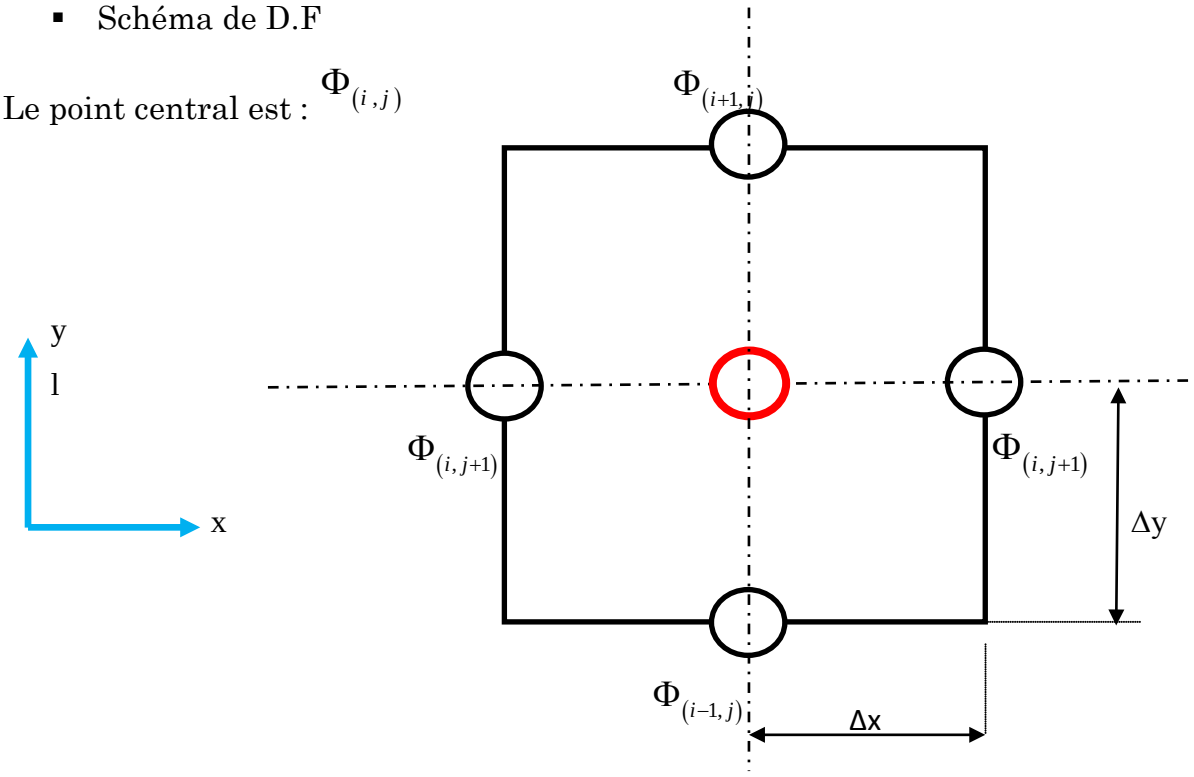


Fig. II.3.*Schéma des différences finies.*

En remplaçant dans l'équation générale de transport on aura :

$$\frac{\left(\varepsilon\rho u\Phi\right)_{(i,j+1)}-\left(\varepsilon\rho u\Phi\right)_{(i,j-1)}}{2\Delta x}+\frac{\left(\varepsilon\rho v\Phi\right)_{(i+1,j)}-\left(\varepsilon\rho v\Phi\right)_{(i-1,j)}}{2\Delta y}=\Gamma_{\Phi}\left(\frac{\Phi_{(i,j-1)}-2\Phi_{(i,j)}+\Phi_{(i,j+1)}}{\Delta x^{2}}+\frac{\Phi_{(i-1,j)}-2\Phi_{(i,j)}+\Phi_{(i+1,j)}}{\Delta y^{2}}\right)+S_{\Phi} \quad \text{(II.46)}$$

$$\underbrace{\left(\frac{\varepsilon\rho u}{2\Delta x}-\frac{\Gamma_{\Phi}}{\Delta x^{2}}\right)}_{-A_1}\Phi_{(i,j+1)}+\underbrace{\left(-\frac{\varepsilon\rho u}{2\Delta x}-\frac{\Gamma_{\Phi}}{\Delta x^{2}}\right)}_{-A_2}\Phi_{(i,j-1)}+\underbrace{\left(\frac{2\Gamma_{\Phi}}{\Delta x^{2}}+\frac{2\Gamma_{\Phi}}{\Delta y^{2}}\right)}_{A_3}\Phi_{(i,j)}+\underbrace{\left(-\frac{\Gamma_{\Phi}}{\Delta y^{2}}+\frac{\varepsilon\rho v}{2\Delta y}\right)}_{-A_4}\Phi_{(i+1,j)}+\underbrace{\left(-\frac{\varepsilon\rho v}{2\Delta y}-\frac{\Gamma_{\Phi}}{\Delta y^{2}}\right)}_{-A_5}\Phi_{(i-1,j)}=S_{(i,j)} \quad \text{(II.47)}$$

$$-A_1\Phi_{(i,j+1)}-A_2\Phi_{(i,j-1)}+A_3\Phi_{(i,j)}-A_4\Phi_{(i+1,j)}-A_5\Phi_{(i-1,j)}+S_{(i,j)}=0 \quad \text{(II.48)}$$

$$A_1\Phi_{(i,j+1)}+A_2\Phi_{(i,j-1)}-A_3\Phi_{(i,j)}+A_4\Phi_{(i+1,j)}+A_5\Phi_{(i-1,j)}=S_{(i,j)} \quad \text{(II.49)}$$

Le point central s'écrit comme :

$$\boxed{\Phi_{(i,j)}=\left(A_1\Phi_{(i,j+1)}+A_2\Phi_{(i,j-1)}+A_4\Phi_{(i+1,j)}+A_5\Phi_{(i-1,j)}-S_{(i,j)}\right)\Big/A_3} \quad \textbf{(II.50)}$$

$$A_1=-\frac{\varepsilon\rho u}{2\Delta x}+\frac{\Gamma_{\Phi}}{\Delta x^{2}} \quad \text{(II.51)} \quad ; \quad A_2=\frac{\varepsilon\rho u}{2\Delta x}+\frac{\Gamma_{\Phi}}{\Delta x^{2}} \quad \text{(II.52)} \quad ; \quad A_3=\frac{2\Gamma_{\Phi}}{\Delta x^{2}}+\frac{2\Gamma_{\Phi}}{\Delta y^{2}} \quad \text{(II.53)}$$

$$A_4=\frac{\Gamma_{\Phi}}{\Delta y^{2}}-\frac{\varepsilon\rho v}{2\Delta y} \quad \text{(II.55)} \quad ; \quad A_5=\frac{\varepsilon\rho v}{2\Delta y}+\frac{\Gamma_{\Phi}}{\Delta y^{2}} \quad \text{(II.56)}$$

La discrétisation de l'équation d'énergie donne la température du point central:

$$T_{(i,j)}=\left(A_1T_{(i,j+1)}+A_2T_{(i,j-1)}+A_4T_{(i+1,j)}+A_5T_{(i-1,j)}-S_{(i,j)}\right)\Big/A_3 \quad \text{(II.57)}$$

Ainsi que les facteurs deviennent :

$$A_1=-\frac{\varepsilon\rho uC_P}{2\Delta x}+\frac{\lambda}{\Delta x^{2}} \quad \text{(II.58)} \quad ; \quad A_2=\frac{\varepsilon\rho uC_P}{2\Delta x}+\frac{\lambda}{\Delta x^{2}} \quad \text{(II.59)} \quad ; \quad A_3=\frac{2\lambda}{\Delta x^{2}}+\frac{2\lambda}{\Delta y^{2}} \quad \text{(II.60)}$$

$$A_4=\frac{\lambda}{\Delta y^{2}}-\frac{\varepsilon\rho vC_P}{2\Delta y} \quad \text{(II.61)} \quad ; \quad A_5=\frac{\varepsilon\rho vC_P}{2\Delta y}+\frac{\lambda}{\Delta y^{2}} \quad \text{(II.62)}$$

II.3.4. Les Conditions Aux Limites C.A.L

Les C.A.L sont type de Dirichlet, aux quatre parois internes d'anode et de cathode et on suppose que (T, X_i, P) = ($\mathbf{T}_{entrée}$, $\mathbf{X_i}_{entrée}$, $\mathbf{P}_{entrée}$).

- Canal cathodique à l'entrée

$$u = u_{entrée}, v = v_{entrée} = 0, p = p_{air}$$

- Canal cathodique à la sortie

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial v}{\partial x} = 0, \frac{\partial p}{\partial x} = 0$$

  - Canal anodique à l'entrée

$$u = u_{ent,H_2}, v = v_{ent,H_2} = 0, p = p_{H_2}$$

  - Canal anodique à la sortie

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial v}{\partial x} = 0, \frac{\partial p}{\partial x} = 0$$

- Interface canal/interconnexion

  - Cathode : $u = 0, v = 0, \frac{\partial p}{\partial y} = 0$
  - Anode : $u = 0, v = 0, \frac{\partial p}{\partial y} = 0$

- Interface cathode/canal cathodique

$$T = T_{air}; X_{O_2} = X_{air,O_2}$$

- Interface cathode/électrolyte

$$u = 0, v = 0, \frac{\partial X_{O_2}}{\partial y} = 0, \frac{\partial p}{\partial y} = 0$$

- Interface anode/électrolyte

$$u = 0, v = 0, \frac{\partial X_{H_2}}{\partial y} = 0, \frac{\partial X_{H_2O}}{\partial y} = 0, \frac{\partial p}{\partial y} = 0$$

- Interface anode/canal anodique

$$T = T_{fuel} = T_{H_2}; X_{H_2} = X_{H_2,fuel}; X_{H_2O} = X_{H_2O,fuel}$$

- Conditions aux extrémités de la partie solide
  - ✓ à l'entrée

$$T = T_{standard} = 873K; \frac{\partial X_{O_2}}{\partial y} = 0; \frac{\partial X_{H_2}}{\partial y} = 0; \frac{\partial X_{H_2O}}{\partial y} = 0$$

  - ✓ à la sortie

$$T = T_{standard} = 873K; \frac{\partial X_{O_2}}{\partial y} = 0; \frac{\partial X_{H_2}}{\partial y} = 0; \frac{\partial X_{H_2O}}{\partial y} = 0$$

La faiblesse d'un modèle mathématique est qu'il n'y a aucune garantie pour simuler les processus exacts en piles à combustible, particulièrement quand des inconnus devinés et arbitraires sont incorporés au modèle. En raison de la nature approximative des modèles numériques, il y a également quelques erreurs dans nos résultats de simulation. Néanmoins, la comparaison soigneuse entre les données numériques et expérimentales peut valider et améliorer le modèle comme outil prédictif.

II.3.5. Forme matricielle du problème

Le problème est considéré stationnaire dans le domaine rectangulaire $[0, L_x] \times [0, Ly]$ où $L_y = (e_{an} + e_{ca} + e_{élé})$, le champ de température vérifie l'équation **(II.50).**Le domaine de calcul est discrétisé en $(N+1) \times (P+1)$ nœuds (x_i, y_j) (i variant de 0 à N et j variant de 0 à P) on supposera que les pas d'espace dans chaque direction Δx et Δy sont constants, la température au nœud (x_i, y_j) est notée $T_{i,j} = T(x_i, y_j)$ .Soit sous forme matricielle, pour N= **4** et P= **6**, on obtient donc **35** nœuds à l'intérieur du domaine et on aura **35** équations à 54 inconnues:

$$\begin{bmatrix} -A_3 & A_4 & 0 & A_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ A_5 & -A_3 & A_4 & 0 & A_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & A_5 & -A_3 & 0 & 0 & A_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ A_2 & 0 & 0 & -A_3 & A_4 & 0 & A_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & A_2 & 0 & A_5 & -A_3 & A_4 & 0 & A_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & A_2 & 0 & A_5 & -A_3 & 0 & 0 & A_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & A_2 & 0 & 0 & -A_3 & A_4 & 0 & A_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & A_2 & 0 & A_5 & -A_3 & A_4 & 0 & A_1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & A_2 & 0 & A_5 & -A_3 & 0 & 0 & A_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & A_2 & 0 & 0 & -A_3 & A_4 & 0 & A_1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & A_2 & 0 & A_5 & -A_3 & A_4 & 0 & A_1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & A_2 & 0 & A_5 & -A_3 & 0 & 0 & A_1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & A_2 & 0 & 0 & -A_3 & A_4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & A_2 & 0 & A_5 & -A_3 & A_4 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & A_2 & 0 & A_5 & -A_3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} T_{1,1} \\ T_{2,1} \\ T_{3,1} \\ T_{1,2} \\ T_{2,2} \\ T_{3,2} \\ T_{1,3} \\ T_{2,3} \\ T_{3,3} \\ T_{1,4} \\ T_{2,4} \\ T_{3,4} \\ T_{1,5} \\ T_{2,5} \\ T_{3,5} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} S_{1,1} - A_2T_{1,0} - A_5T_{0,1} \\ S_{2,1} - A_2T_{2,0} \\ S_{3,1} - A_2T_{3,0} - A_4T_{4,1} \\ S_{1,2} - A_5T_{0,2} \\ S_{2,2} \\ S_{3,2} - A_4T_{4,2} \\ S_{1,3} - A_5T_{0,3} \\ S_{2,3} \\ S_{3,3} - A_4T_{4,3} \\ S_{1,4} - A_5T_{0,4} \\ S_{2,4} \\ S_{3,4} - A_4T_{4,4} \\ S_{1,5} - A_1T_{1,6} - A_5T_{0,5} \\ S_{2,5} - A_1T_{2,6} \\ S_{3,5} - A_1T_{3,6} - A_4T_{4,5} \end{bmatrix}$$

Notons A, B et C des matrices tridiagonales de dimension 3 définies par :

$$A = \begin{bmatrix} -A_3 & A_4 & 0 \\ A_5 & -A_3 & A_4 \\ 0 & A_5 & -A_3 \end{bmatrix}; B = \begin{bmatrix} A_1 & 0 & 0 \\ 0 & A_1 & 0 \\ 0 & 0 & A_1 \end{bmatrix}; C = \begin{bmatrix} A_2 & 0 & 0 \\ 0 & A_2 & 0 \\ 0 & 0 & A_2 \end{bmatrix},$$

Notons T1, T2 , T3 , T4 et T5 les vecteurs à 3 composantes définis par :

$$T_1 = \begin{bmatrix} T_{1,1} \\ T_{2,1} \\ T_{3,1} \end{bmatrix}; T_2 = \begin{bmatrix} T_{1,2} \\ T_{2,2} \\ T_{3,2} \end{bmatrix}; T_3 = \begin{bmatrix} T_{1,3} \\ T_{2,3} \\ T_{3,3} \end{bmatrix}; T_4 = \begin{bmatrix} T_{1,4} \\ T_{2,4} \\ T_{3,4} \end{bmatrix}; T_5 = \begin{bmatrix} T_{1,5} \\ T_{2,5} \\ T_{3,5} \end{bmatrix}$$

Et notons S1, S2 , S3 , S4 et S5 les vecteurs à 3 composantes définis par :

$$S_1 = \begin{bmatrix} S_{1,1} - A_2T_{1,0} - A_5T_{0,1} \\ S_{2,1} - A_2T_{2,0} \\ S_{3,1} - A_2T_{3,0} - A_4T_{4,1} \end{bmatrix}; S_2 = \begin{bmatrix} S_{1,2} - A_5T_{0,2} \\ S_{2,2} \\ S_{3,2} - A_4T_{4,2} \end{bmatrix}; S_3 = \begin{bmatrix} S_{1,3} - A_5T_{0,3} \\ S_{2,3} \\ S_{3,3} - A_4T_{4,3} \end{bmatrix}; S_4 = \begin{bmatrix} S_{1,4} - A_5T_{0,4} \\ S_{2,4} \\ S_{3,4} - A_4T_{4,4} \end{bmatrix}; S_5 = \begin{bmatrix} S_{1,5} - A_1T_{1,6} - A_5T_{0,5} \\ S_{2,5} - A_1T_{2,6} \\ S_{3,5} - A_1T_{3,6} - A_4T_{4,5} \end{bmatrix}$$

Pour notre cas on aura aux limites :

$S_{0,0} = S_{1,0} = S_{2,0} = S_{3,0} = S_{4,0} = 0;\ S_{0,6} = S_{1,6} = S_{2,6} = S_{3,6} = S_{4,6} = 0;$

$S_{0,1} = S_{0,2} = S_{0,3} = S_{0,4} = S_{0,5} = 0;$

$S_{4,1} = S_{4,2} = S_{4,3} = S_{4,4} = S_{4,5} = 0.$

et $T_{0,0} = T_{1,0} = T_{2,0} = T_{3,0} = T_{4,0} = T_{H_2}$; $T_{0,6} = T_{1,6} = T_{2,6} = T_{3,6} = T_{4,6} = T_{air}$;

$T_{0,1} = T_{0,2} = T_{0,3} = T_{0,4} = T_{0,5} = 873K$; $T_{4,1} = T_{4,2} = T_{4,3} = T_{4,4} = T_{4,5} = 873K.$

Le système peut s'écrire sous la forme matricielle bloc suivante :

$$\begin{pmatrix} A & B & 0 & 0 & 0 \\ C & A & B & 0 & 0 \\ 0 & C & A & B & 0 \\ 0 & 0 & C & A & B \\ 0 & 0 & 0 & C & A \end{pmatrix} \begin{pmatrix} T_1 \\ T_2 \\ T_3 \\ T_4 \\ T_5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_1 \\ S_2 \\ S_3 \\ S_4 \\ S_5 \end{pmatrix}$$

La matrice obtenue est tridiagonale et chacun de ses blocs est tridiagonal. La résolution du système peut s'effectuer par une méthode de Thomas matriciel où une méthode itérative matricielle (méthode de SOR).

II.3.6. La méthode SOR

La méthode SOR (Successive Over Relaxation) est la méthode de ***surrelaxation* successive** est une variante de la ***méthode de Gauss-Seidel*** pour résoudre un système d'***équations linéaires***. La convergence de cet algorithme est généralement plus rapide. Une approche similaire peut être appliquée à bon nombre de ***méthodes itératives***.

On considère un système linéaire de n équations avec n inconnues notées x (qui est un vecteur) :

$$Ax = b \text{ Avec } A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix}, x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}, b = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix}.$$

A étant la somme d'une ***matrice diagonale*** notée D et de deux matrices triangulaires (respectivement inférieure et supérieure) notées L et U :

$$A = D + L + U$$

$$\text{Avec : } D = \begin{bmatrix} a_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & a_{22} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix}, L = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \cdots & 0 \\ a_{21} & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & 0 \end{bmatrix}, U = \begin{bmatrix} 0 & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ 0 & 0 & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \end{bmatrix}$$

Le système d'équations linéaires peut être reformulé par :

$$\left(D + wL\right)x = w.b - \left[wU + (w-1)D\right]x \tag{II.63}$$

Généralement $w > 0$.

La méthode de surrelaxation successive est une méthode itérative initialisée par le choix d'un x_0 arbitraire, et où chaque itération consiste à déterminer $x_{(n+1)}$ à l'aide de x_n selon la formule suivante :

$$\left(D + wL\right)x_{n+1} = w.b - \left[wU + (w-1)D\right]x_n \tag{II.64}$$

La matrice de gauche ($D+\omega L$) étant triangulaire, il est aisé de calculer x_{n+1} par :

$$x_i^{(k+1)} = (1-w)x_i^{(k)} + \frac{w}{-A_3}\left(S_i - \sum_{j>i} a_{ij}x_j^{(k)} - \sum_{j<i} a_{ij}x_j^{(k+1)}\right), i = 1,2,...,n. \tag{II.65}$$

Le choix du facteur de relaxation n'est pas trivial et dépend des coefficients de la matrice. Pour une matrice définie positive, on peut démontrer que l'algorithme est convergent pour toute valeur $\omega \in]0,2[$. Toutefois, on veut une convergence aussi rapide que possible.

Pour notre problème on a :

$$T = \begin{bmatrix} T_1 \\ T_2 \\ \vdots \\ T_n \end{bmatrix}, b = \begin{bmatrix} S_1 \\ S_2 \\ \vdots \\ S_n \end{bmatrix}, D = \begin{bmatrix} -A_3 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & -A_3 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & -A_3 \end{bmatrix}$$

$$L = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & 0 & 0 \\ A_5 & 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 & 0 \\ 0 & A_5 & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ A_2 & 0 & 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & A_2 & \ddots & A_5 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & A & 0 & \ddots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & A_2 & 0 & A_5 & 0 \end{bmatrix}, U = \begin{bmatrix} 0 & A_4 & 0 & A_1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & A_4 & 0 & A_1 & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & 0 & A_4 & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 & A_4 & \ddots & A_1 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 & A_4 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$$\left(D + wL\right)T_{n+1} = wS - \left[wU + (w-1)D\right]T_n \tag{II.66}$$

$$T_i^{(k+1)} = (1-w)T_i^{(k)} + \frac{w}{-A_3}\left(S_i - \sum_{j>i} a_{ij} T_j^{(k)} - \sum_{j<i} a_{ij} T_j^{(k+1)} \right), i = 1,2,...,n. \quad \text{(II.67)}$$

$$T_i^{(k+1)} = T_i^{(k)} + \frac{w}{-A_3}\left(S_i - \sum_{j>i} a_{ij} T_j^{(k+1)} - \sum_{j<i} a_{ij} T_j^{(k)} \right) \quad \text{(II. 68)}$$

On assume que w ***=1.85.***

II.3.7. Propriétés et paramètres utilisés dans les calculs

Les paramètres utilisés dans nos calculs sont illustrés dans le Tableau II.1 Selon les valeurs choisis dans le Chapitre I, afin de nous permettre d'obtenir des résultats raisonnables et qui nous favorise à comprendre le phénomène au dedans de la pile à combustible de type planaire, ce phénomène des champs thermique sous influence de différentes type de sources de chaleur.

Longueur de cellule L_x (m)	**0.1**
Épaisseur de l'anode e_{an} (m)	**500 x 10^{-6}**
Épaisseur de la cathode e_{ca} (m)	**50 x 10^{-6}**
Épaisseur de l'électrolyte $e_{éle}$ (m)	**20 x 10^{-6}**
Épaisseur de l'interconnexion e_{in} (m)	**500 x 10^{-6}**

Tableau II.1. *Dimensions de la cellule. [18], [21], [36]*

Conductivité électrique de l'anode σ_{an} (Ω^{-1} m^{-1})	**(9.5x10^7/T) exp (-1150/T)**
Conductivité électrique de la cathode σ_{ca} (Ω^{-1} m^{-1})	**(4.2x10^7/T)exp (-1200/T)**
Conductivité ionique de l'électrolyte $\sigma_{éle}$ (Ω^{-1} m^{-1})	**3.34x10^4exp (-10300/T)**
Masse volumique de PEN ρ (kg m^{-3})	**5900**
Chaleur spécifique de PEN C_p (J $kg^{-1}K^{-1}$)	**500**
Conductivité thermique de PEN λ ($Wm^{-1}K^{-1}$)	**2**
Masse volumique d'interconnexion (kg m^{-3})	**8000**
Chaleur spécifique d'interconnexion (J $kg^{-1}K^{-1}$)	**500**
Conductivité thermique d'interconnexion ($Wm^{-1}K^{-}$	**25**

Pertes d'activation de l'anode S_{ac_an}(W m^{-3})	**$I (RT/F)\ln(I/I_{0,an})$**
Pertes d'activation de la cathode S_{ac_ca} (W m^{-3})	**$I (RT/F)\ln(I/I_{0,ca})$**
Densité de courant d'échange référence Anode	**3.2×10^{13}**
Densité de courant d'échange référence Anode	**7.0×10^{11}**
Densité de courant limitative I_l (Am^{-2})	**40000**
Quantité chaleur due à la réaction chimique Q	**306000**
Vitesse de l'écoulement d'air (m/s)	**2**
Vitesse de l'écoulement de l'hydrogène (m/s)	**2**
Masse volumique hydrogène (kg/m^3)	**0.399**
Masse volumique d'air (kg/m^3)	**0.255**
Porosité des électrodes	**0.50**
Densité de coutante limite (A/m^2)	**40000**

Tableau II.2. *Propriétés matérielles de la cellule. [18], [21], [36]*

Chapitre III

Résultats

et

Interprétations

III.1. Introduction

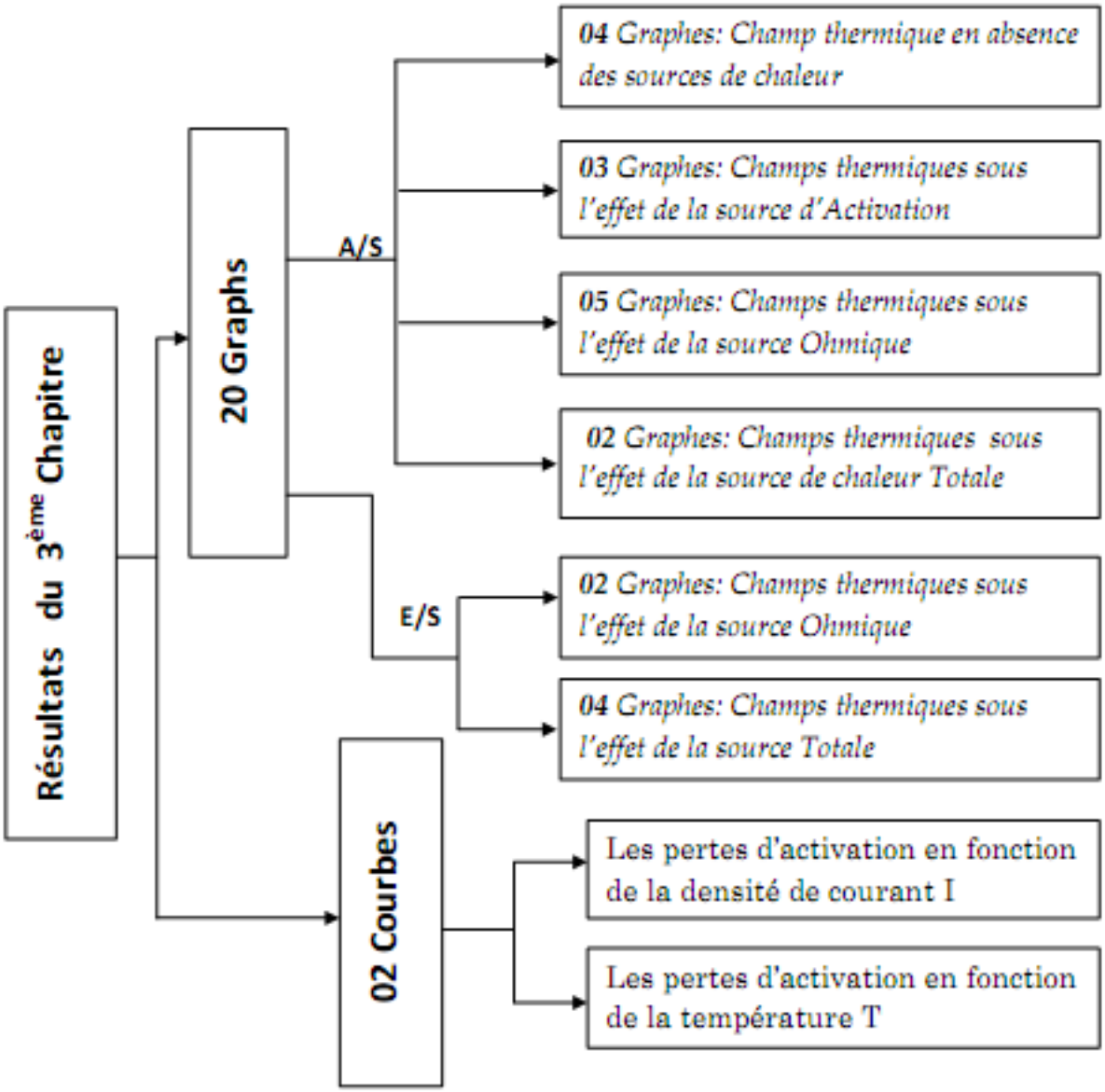
Après avoir écrit des programme de calcul en langage **Matlab 7.9**, basé sur le modèle détaillé dans le précédent chapitre, la totalité des champs ont fait l'objet de notre étude .La visualisation des graphes et l'ensemble des courbes ont été effectués en se servant du même langage.

Alors , le plan du coupe passe par le canal et les résultats du modèle thermique montrent l'effet des quatre types de sources de chaleur , celle par effet Joule (source de chaleur Ohmique), source de chaleur due à la réaction électrochimique, source de chaleur due aux pertes d'activation et celle due à la concentration sur l'élévation de la température dans la partie solide de la cellule SOFC planaire, suivant le plan de calcul : le plan parallèle au sens de l'écoulement des gaz.

La localisation de la température maximale est selon le type de source de chaleur. Elle se localise dans l'interface anode/électrolyte sous l'effet de la chaleur dû à la réaction chimique, dans l'électrolyte sous l'effet Joule et dans l'anode et la cathode sous l'effet de la chaleur dû aux surtensions d'activation.

Dans le cas de la source de chaleur due à l'effet Joule, la température maximale est toujours située dans l'électrolyte. C'est là où la conductivité électrique est faible.

Contenu du chapitre III.



III.2. Tableaux récapitulatifs des résultats obtenus

Type de source de chaleur	**T_{H2}**	**T_{air}**	**ΔT**
Absence de la source de chaleur	**873**	**873**	**0.119**
	1273	**1273**	**0.119**
	873	**973**	**0.131**
	973	**873**	**0.108**
Effet de la source Activation	**873**	**873**	**2.396**
	973	**973**	**2.516**
	1273	**1273**	**2.109**
Effet de la source Ohmique	**873**	**873**	**1.179**
	973	**973**	**0.326**
	1273	**1273**	**0.013**
Effet de la source Total	**873**	**873**	**17.73**

Tableau III.1.*Élévation de la température en présence de chaque type de source de chaleur et des différentes valeurs des températures de gaz. Pour* ***I = 12000 A/m².***

Effet de la source Ohmique SOFC-P A/S			
Densités de courant	**T_{H2} [K]**	**T_{air} [K]**	**ΔT [K]**
I = 12000 A/m^2	**873**	**873**	**1.179**
I = 20000 A/m^2	**873**	**873**	**3.338**
I = 40000 A/m^2	**873**	**873**	**13.458**
Effet de la source Activation SOFC-P A/S			
I = 12000 A/m^2	**873**	**873**	**2.396**
I = 20000 A/m^2	**873**	**873**	**3.176**
I = 40000 A/m^2	**873**	**873**	**5.730**
Sous effet de la source Totale SOFC-P A/S			
I = 12000 A/m^2	**873**	**873**	**1.662**
I = 20000 A/m^2	**1273**	**1273**	**1.415**

Tableau III.2.*Élévation de la température en présence de source de chaleur et des différentes valeurs de températures de gaz.*

Pour I = ***12000*** *A/m² , I =* ***20000*** *A/m² et I =* ***40000*** *A/m².*

Cellule SOFC_P E/S			**Effet source Ohmique**	**Effet source Totale**
Densités de courant	**T_{H2} [K]**	**T_{air} [K]**	**ΔT [K]**	**ΔT [K]**
I = 12000 A/m^2	**873**	**873**	**13.191**	**17.73**
I = 12000 A/m^2	**973**	**973**	**3.169**	**6.63**
I = 12000 A/m^2	**1273**	**1273**	**2.059**	**2.73**
I = 20000 A/m^2	**873**	**873**	**40.64**	**44.51**

Tableau III.3.*Élévation de la température en présence de la source de chaleur Ohmique et Totale aux différentes valeurs de températures de gaz.*

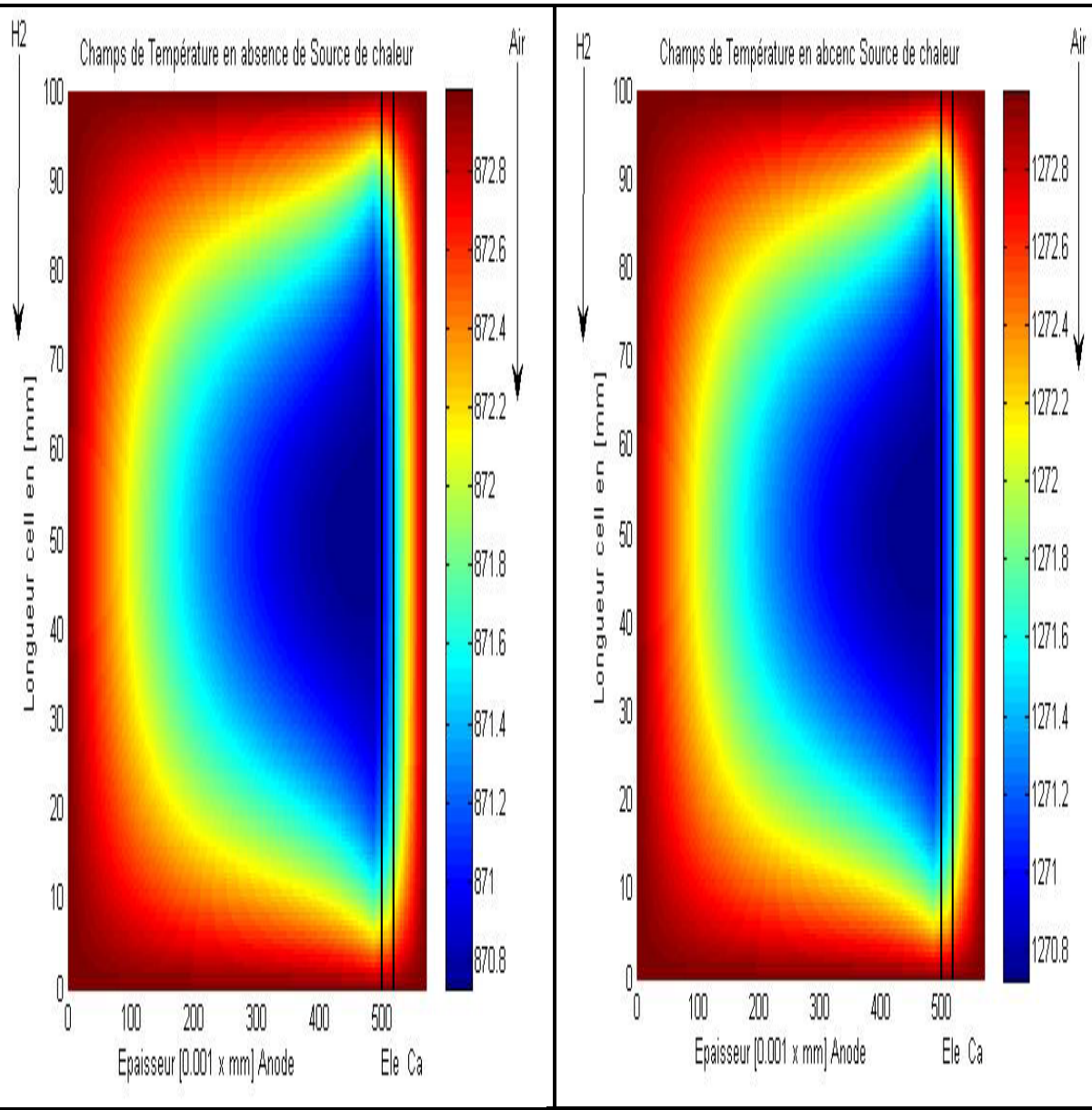
*Pour I = **12000** A/m^2 et I = **20000** A/m^2.*

III.1. Champs thermiques en absence de sources de chaleur SOFC-P à A/S

Sources de chaleur due aux gaz

Les gaz dans les canaux anodiques et cathodiques aux mêmes températures (Fig. III.1) ou aux températures différentes (Fig. III.2) sont considérés comme une source de chaleur pour la pile, et quelque soient les valeurs de température attribuées aux gaz, l'allure de la distribution de température demeure la même, donc aucun changement d'évolution n'est enregistré.

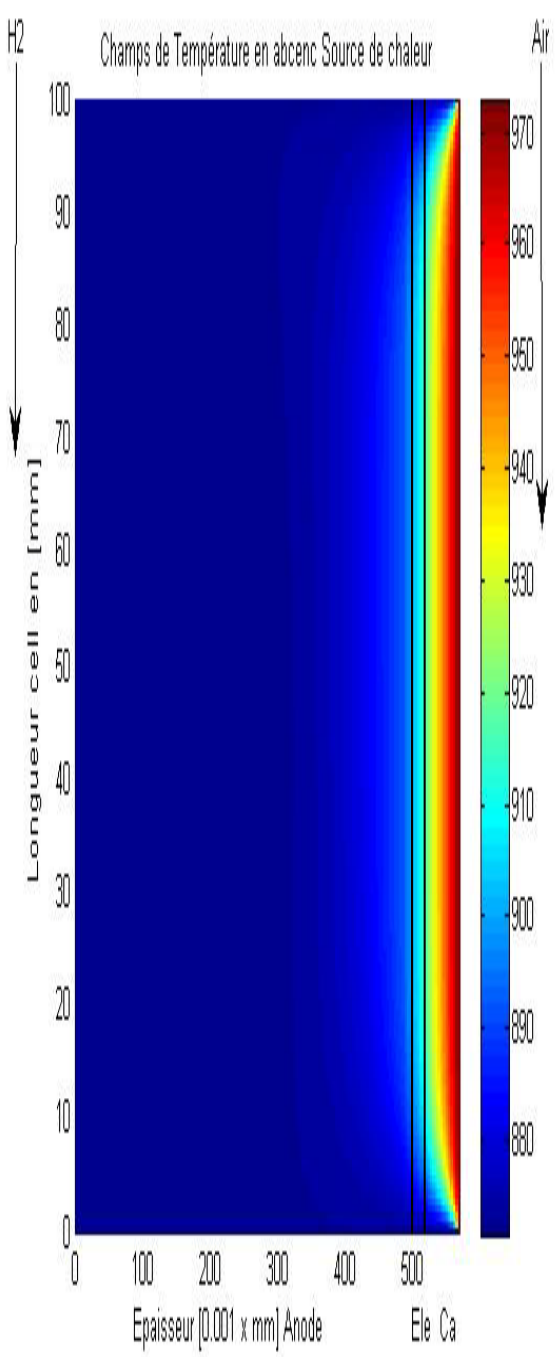
Dans la figure (Fig.III.1) et pour $T_{H2} = T_{air} = 873K$ et $T_{H2} = 1273\ K = T_{air}$



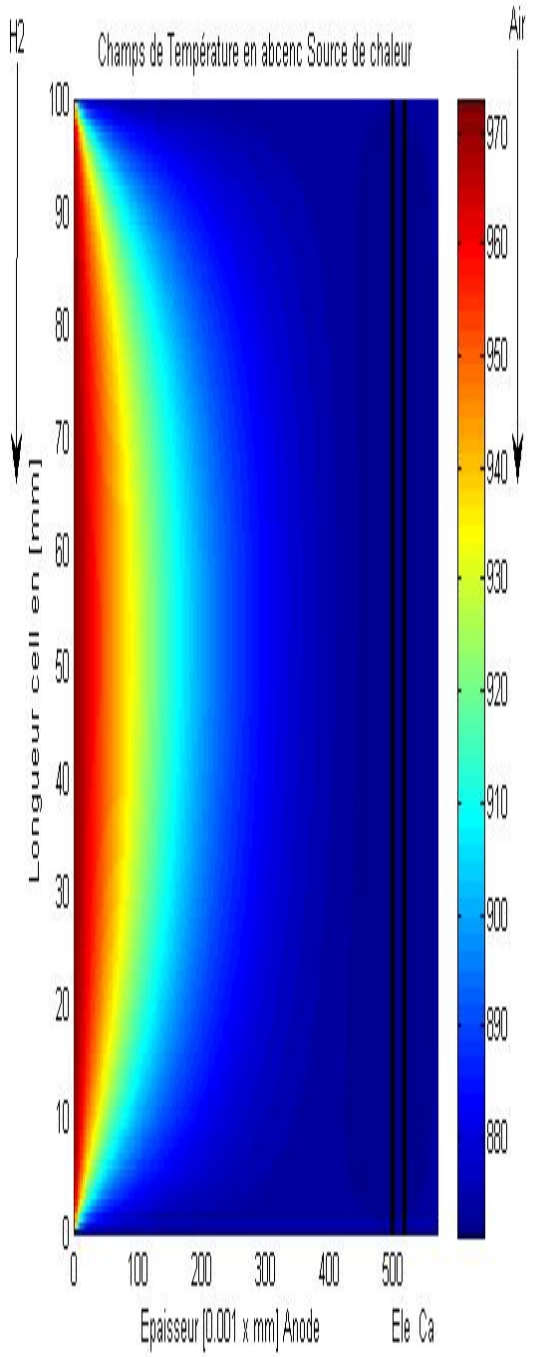
(a): $T_{H2} = T_{air} = 873K$ ***(b): $T_{H2} = 1273\ K = T_{air}$***

Fig. III.1*. Champ thermique en absence des sources de chaleurs.*

Dans la figure(Fig.III.2) on a pris pour le cas a) $T_{H2} < T_{air}$ et le cas b) $T_{H2} > T_{air}$ pour bien illustrer l'influence de la source des gaz sur le profil des températures à l'intérieure de la cellule SOFC_P et on remarque que l'allure de la distribution de température est toujours la même.



(a): T_{H2} = 873K; T_{air} =973K



(b): T_{H2} = 973K; T_{air} =873K

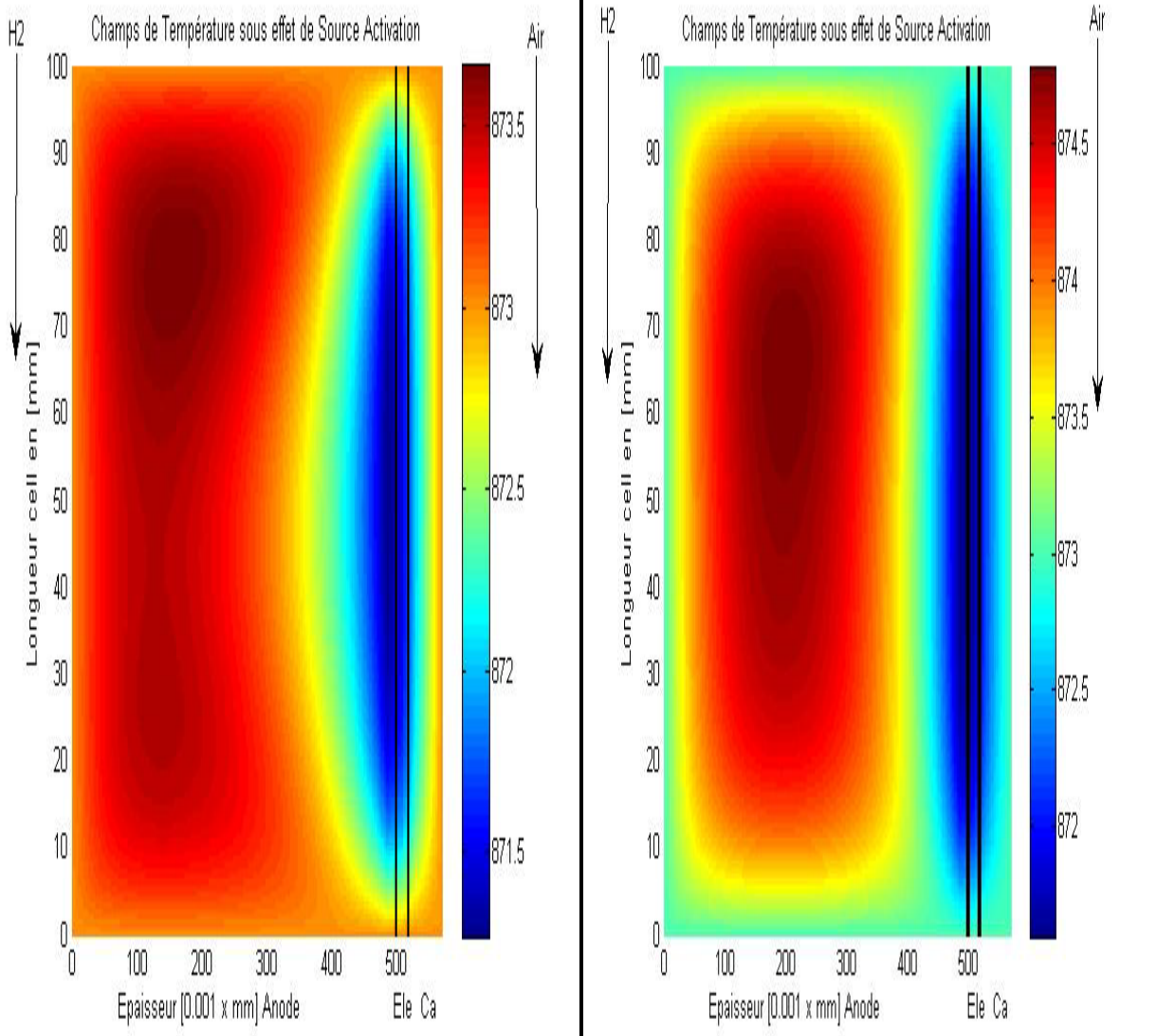
Fig. III.2. *Champ thermique en absence des sources de chaleurs.*

III.2. Champs thermiques sous l'effet de la source d'Activation SOFC-P à A/S

Les profils de températures (Fig. III.3) et (Fig. III.4) sont obtenus en appliquant l'expression de Tafel pour calculer les pertes d'activation aux valeurs

$\mathbf{I_{0,an}= 3.2x10^{13}}$ et $\mathbf{I_{0,ca} = 7.0x10^{11}}$ les densités de référence de courant d'échange [18] et ce pour T=600°C . L'élévation de la température est concentrée au cœur de l'anode en diminuant vers les parties : interface A/E et électrolyte.

L'évolution du champ en changeant les valeurs de la densité du courant aux températures des gaz fixe. Ce qui est illustré au cœur de l'anode que l'élévation de température s'est localisée.



(a): $T_{H2} = T_{air} = 873K$, I = 12000 A/m²	***(b): $T_{H2} = 873$ K= T_{air}, I = 20000 A/m²***

Fig. III.3. *Champ thermique sous l'effet de la source d'Activation.*

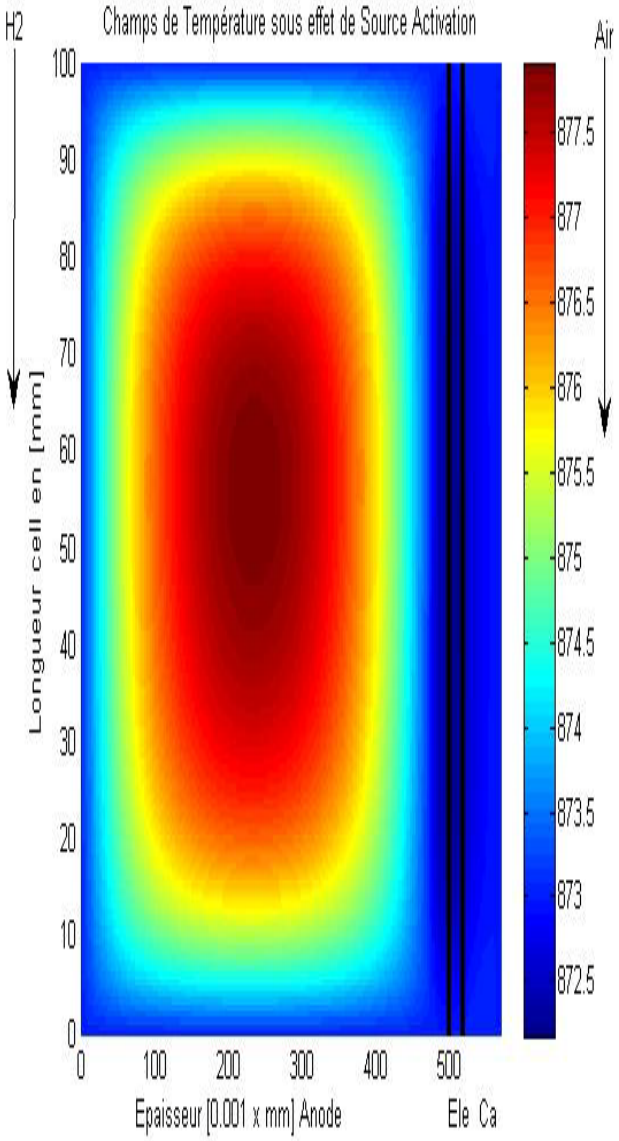


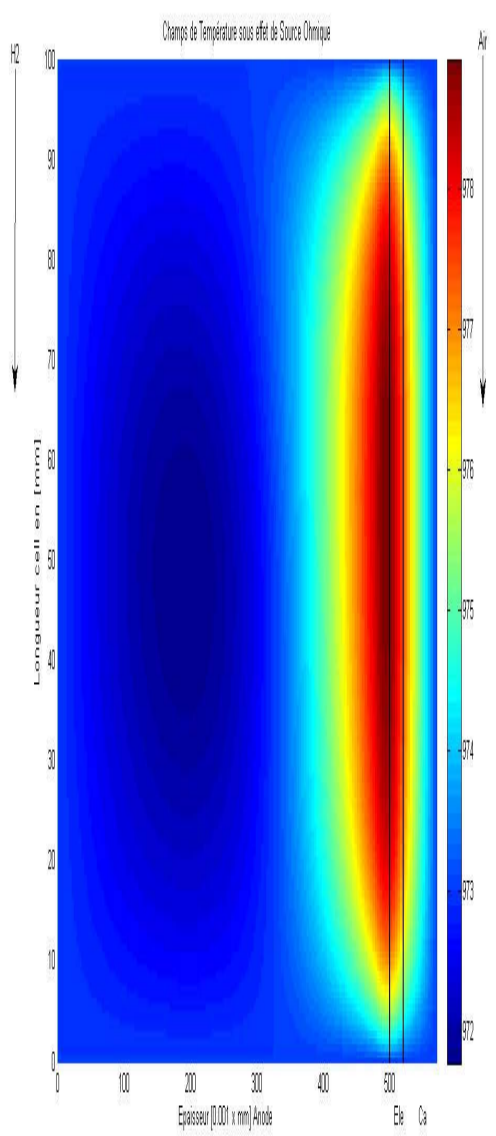
Fig. III.4. *Champ thermique sous l'effet de la source d'Activation.* $T_{H2} = T_{air} = 873$ **K;** $I = 40000$ **A/m²**

Aussi pour les profils de températures à T_{gaz} = **1273** K en appliquant l'expression de **Tafel** pour calculer les pertes d'activation aux valeurs $\mathbf{I_{0,an}=1.67x10^8}$ et $\mathbf{I_{0,ca}=5.51x10^9}$ les densités de courant d'échange de référence [18] . L'élévation de la température reste toujours concentrée au cœur de l'anode et en diminuant vers les parties : interface A/E et électrolyte.

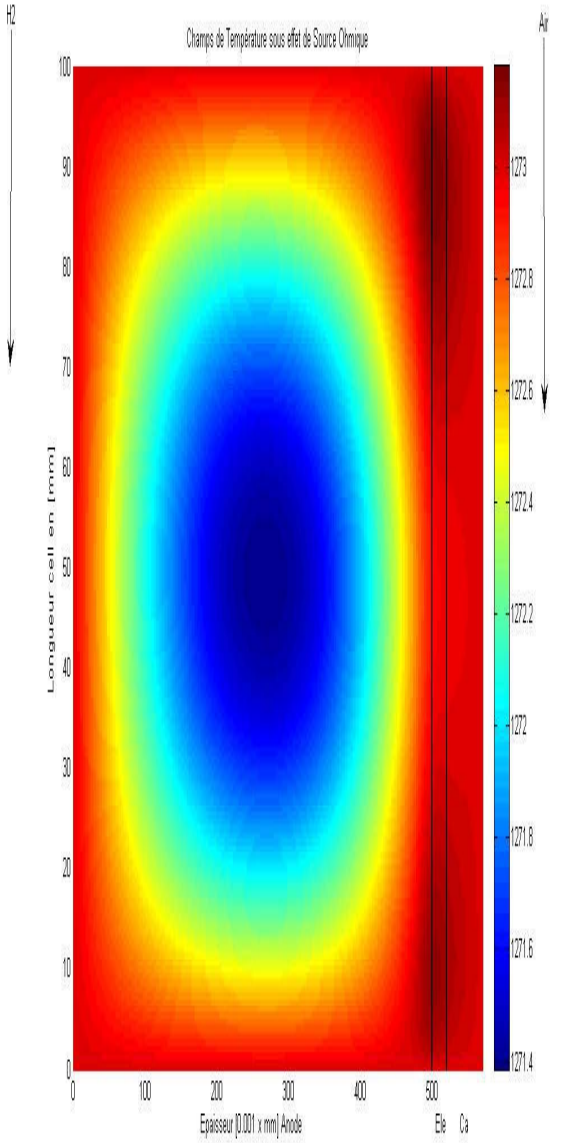
Pour différentes valeurs de densités de courant l'élévation de température varie proportionnellement avec la densité de courant I.

I.1. Champs thermiques sous l'effet de la source Ohmique SOFC-P à A/S

La figure (Fig. III.5) montre le champ thermique sous l'effet de la source Ohmique (à I = **12000** A/m²) pour (a): $T_{H2} = T_{air}$ = **973** K où ΔT = **0.326K** et pour (b) T_{H2} = **1273** K= T_{air} où ΔT = **0.013K**, on remarque que l'élévation de température diminue au fur et à mesure que la température augmente.



(a): TH2 = Tair = 973K; I = 12000 A/m²



(b): TH2 = 1273 K= Tair ; I = 12000 A/m²

Fig. III.5. *Champ thermique sous l'effet de la source Ohmique.*

Dans la figure (Fig. III.6) un agrandissement de la zone située au cœur de l'interface A/E pour montrer le profil de la température à $T_{H2} = T_{air} =$**873**K et I = **12000** A/m² où on a obtenu une élévation de ΔT=**1.179 K**.

Alors on localise l'élévation de températures et on trouve qu'elle est concentrée à l'interface anode/électrolyte.

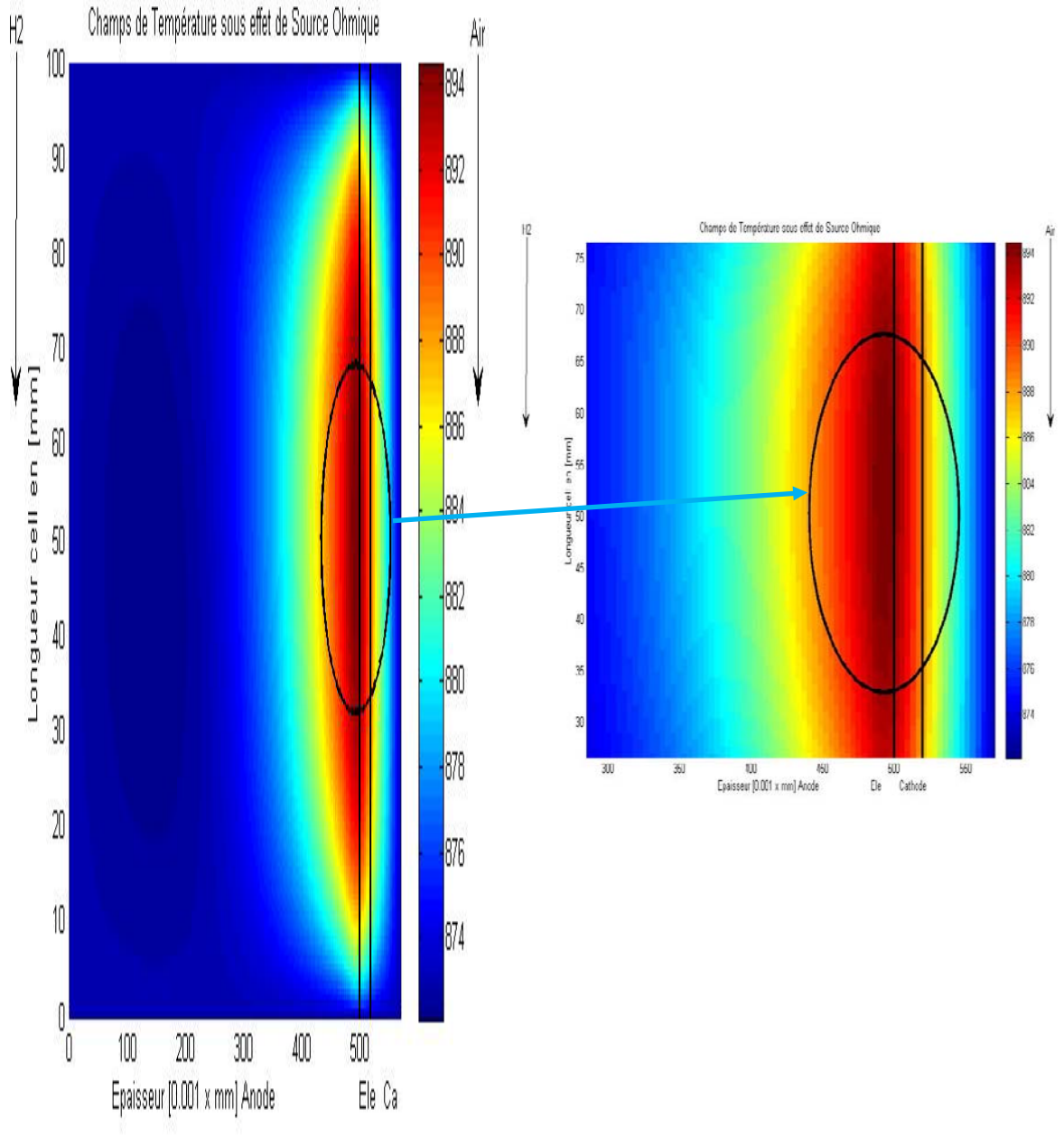


Fig. III.6. *Champ thermique sous l'effet de la source Ohmique.*

$T_{H2}=T_{air}$ =873 K ; I= 12000 A/m².

De même dans la figure (Fig. III.7) un agrandissement de la zone située au Cœur de l'interface A/E pour montrer le profil de la température à $T_{H2} = T_{air}$ =**873** K et I = **20000** A/m² où on a obtenu une élévation de ΔT= **3.338 K** , on constate que l'élévation de température varie proportionnellement avec l'élévation de la densité de courant I.

De même si on localise l'élévation de températures et on trouve qu'elle est concentrée à l'interface anode/électrolyte.

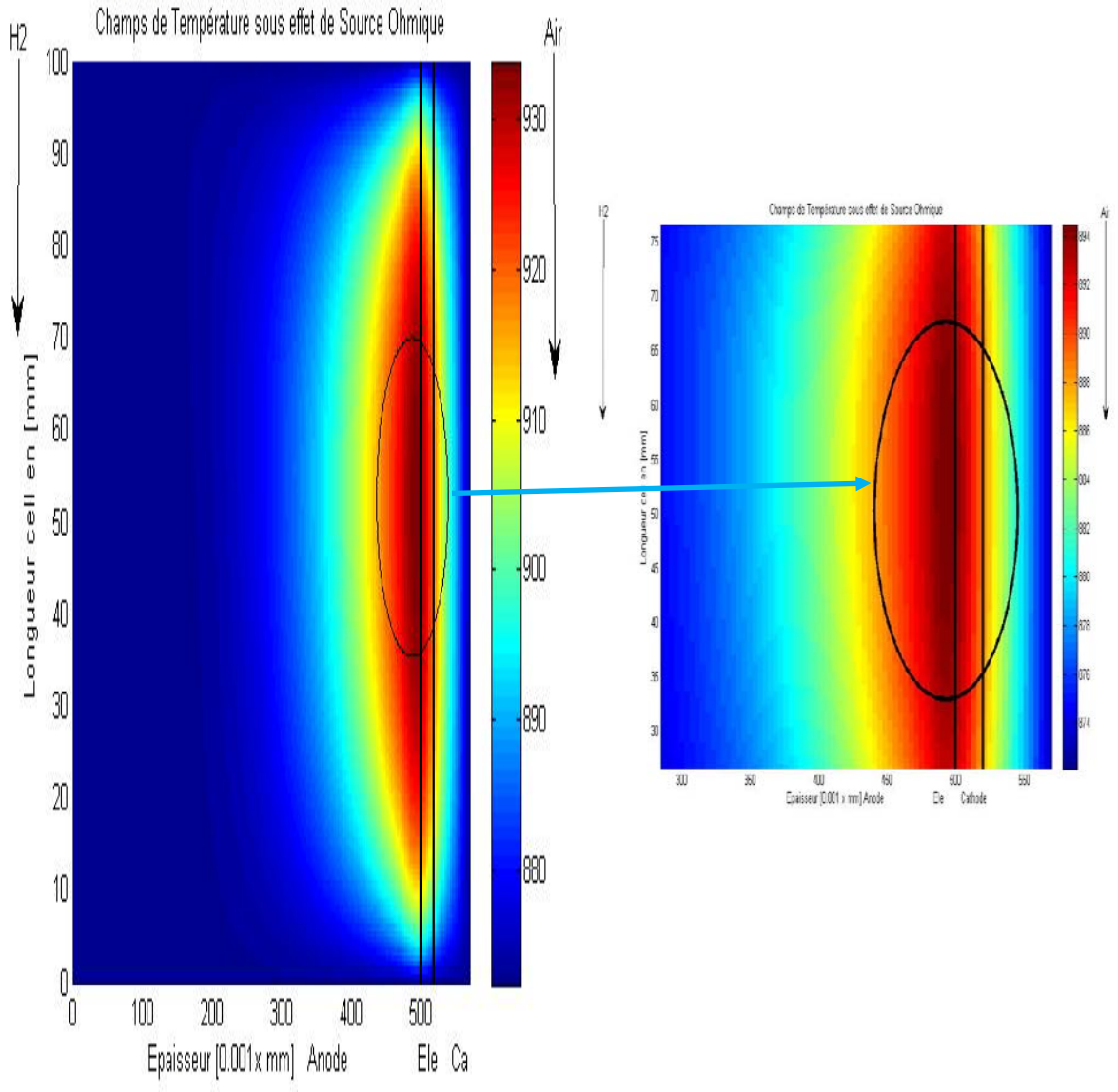


Fig. III.7.*Champ thermique sous l'effet de la source Ohmique.*

$T_{H2} = T_{air}$ =873K; I = 20000 A/m²

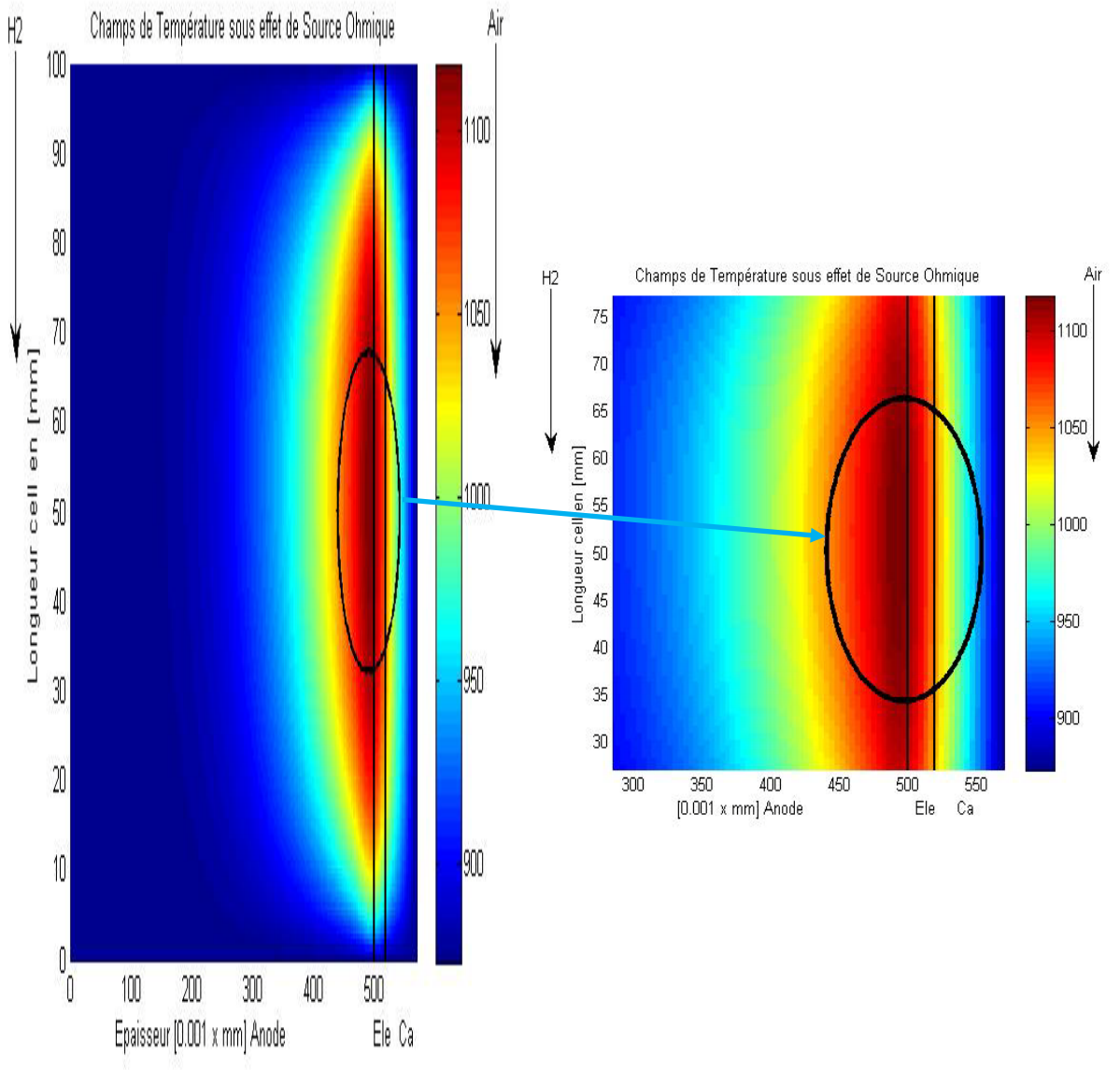


Fig. III.8. *Champ thermique sous l'effet de la source Ohmique.*

T_{H2} = T_{air} =873K; I = 40000 A/m²

Aussi dans la figure (Fig. III.8) un agrandissement de la zone située au cœur de l'interface A/E pour montrer le profil de la température à $T_{H2} = T_{air}$ =**873**K et I = **40000** A/m² où on a obtenu une élévation de ΔT= **13.458**K, l'élévation de température varie proportionnellement avec l'élévation de la densité de courant I.

I.2. Champs thermiques sous l'effet de source de chaleur Totale SOFC-P à A/S

On fait intervenir les quatre type de sources de chaleur dans nos calculs pour obtenir le champ thermique sous l'effet de la source de chaleur Totale (Fig. III.9) à $T_{H2} = T_{air} =$**873**K; I = **12000** A/m² où $\Delta T =$ **1.662K** ; la zone la plus chaude est celle situé à l'interface A/E.

Et pour le Champ thermique sous l'effet de la source de chaleur Totale dans la figure (Fig.III.10) à $T_{H2} = T_{air} =$**1273**K; et I = **20000** A/m² où $\Delta T =$ **1.415K**, ceci confirme l'élévation de la température en fonction de la densité de courant I.

Si on localise l'élévation de températures on remarque qu'elle est concentrée à l'interface anode/électrolyte.

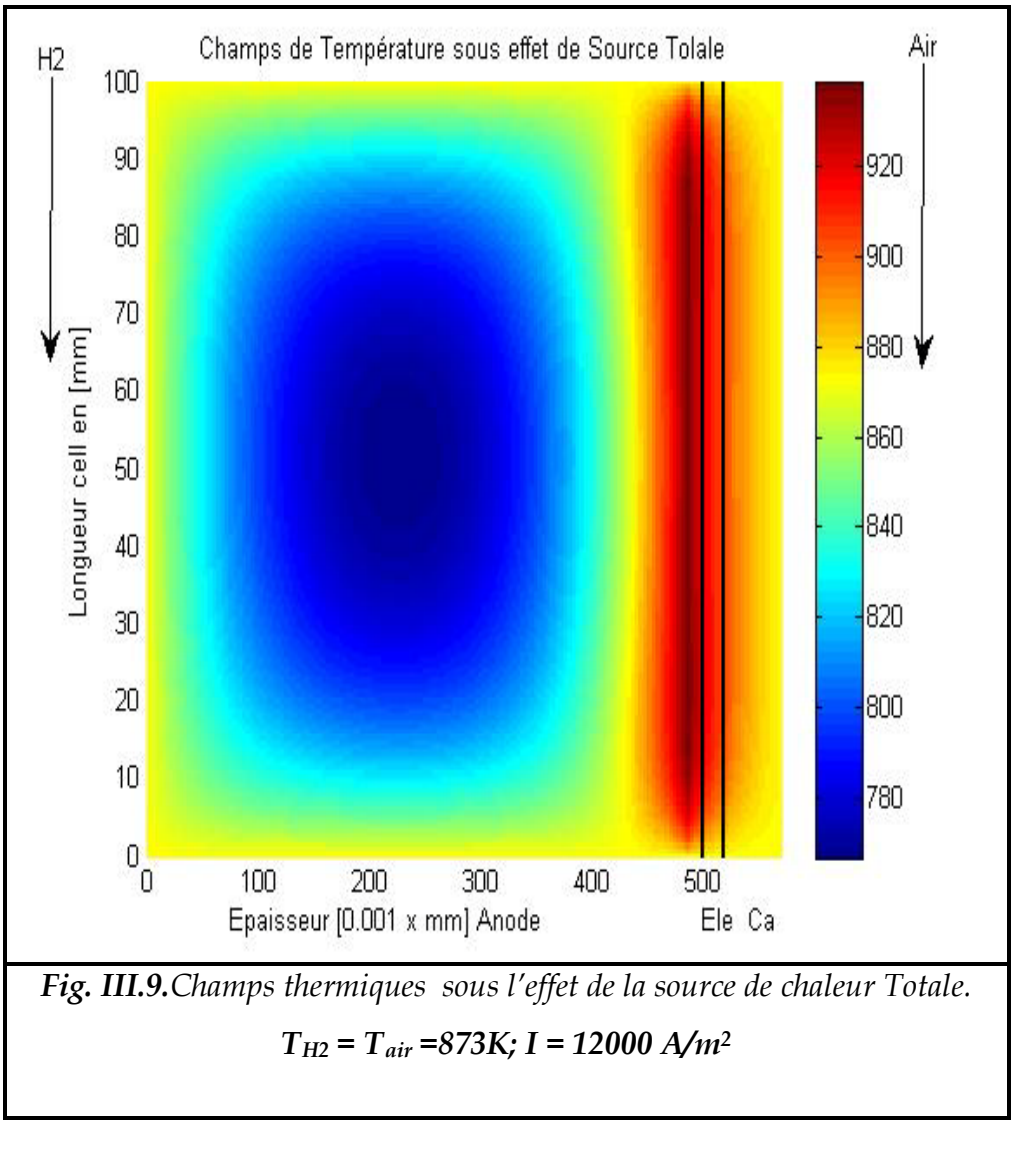


Fig. III.9.*Champs thermiques sous l'effet de la source de chaleur Totale.*

$T_{H2} = T_{air}$ =873K; I = 12000 A/m²

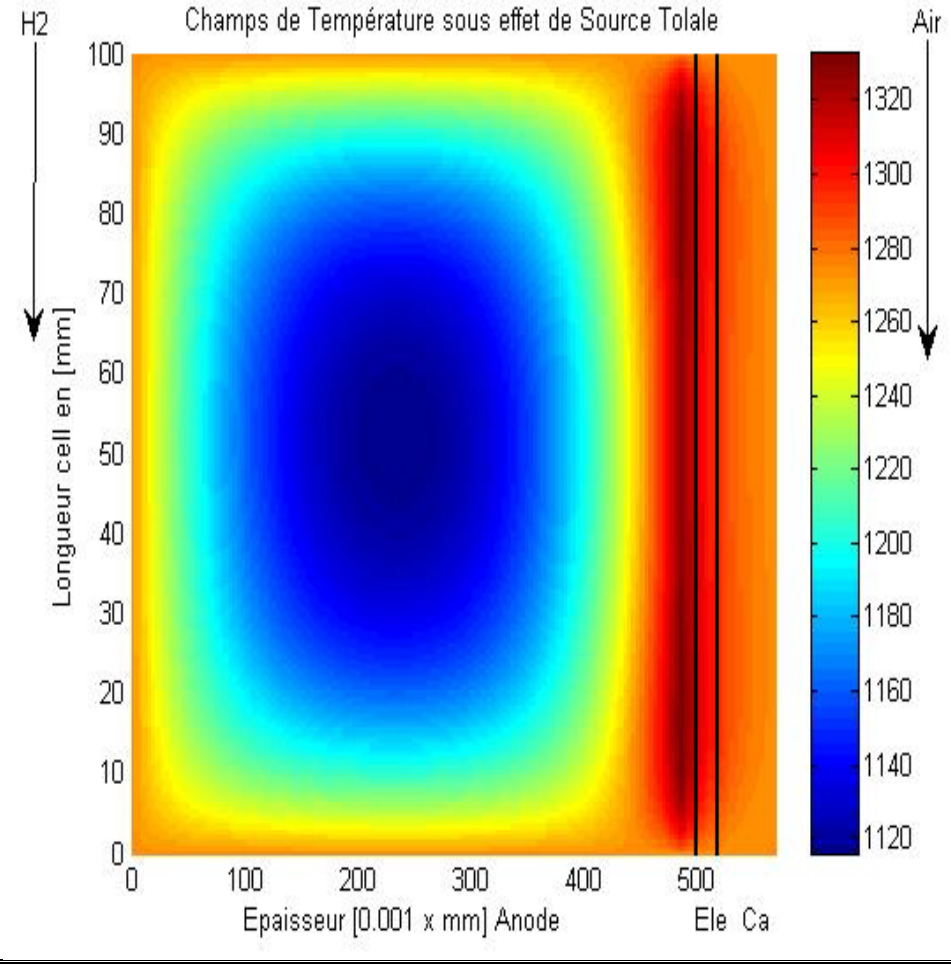


Fig. III.10.*Champs thermiques sous l'effet de la source de chaleur Totale.*

T_{H2} = T_{air} =1273K; I = 20000 A/m²

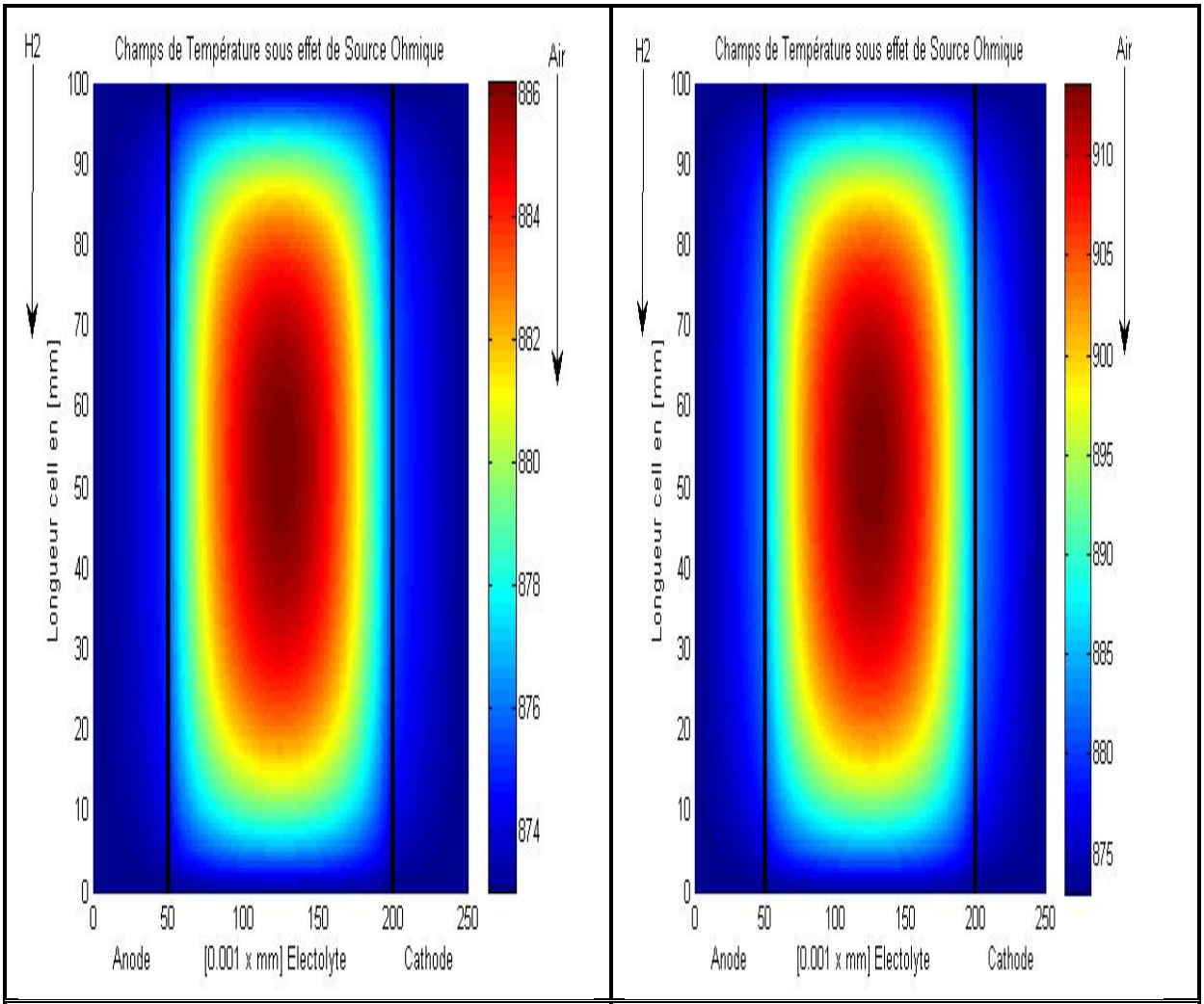
I.3. Champs thermiques sous l'effet de la source Ohmique SOFC-P à E/S

<u>Électrolyte supporté</u> (épaisseur Électrolyte = 150 µm, épaisseur Anode = 50 µm épaisseur Cathode = 50 µm)

L'évolution des champs de température pour trois cas :

1) Une densité de courant I = **12000** A/m² et aux températures (air et gaz) T_{H2} = T_{air} = **873**K, on aura la même allure, et avec une élévation de température de ΔT = **13.191 K**.

2) Une densité de courant I = **12000** A/m² et aux températures (air et gaz) $T_{H2} = T_{air} =$ **973** K, on aura la même allure, et avec une élévation de température de $\Delta T =$ **3.169 K**.

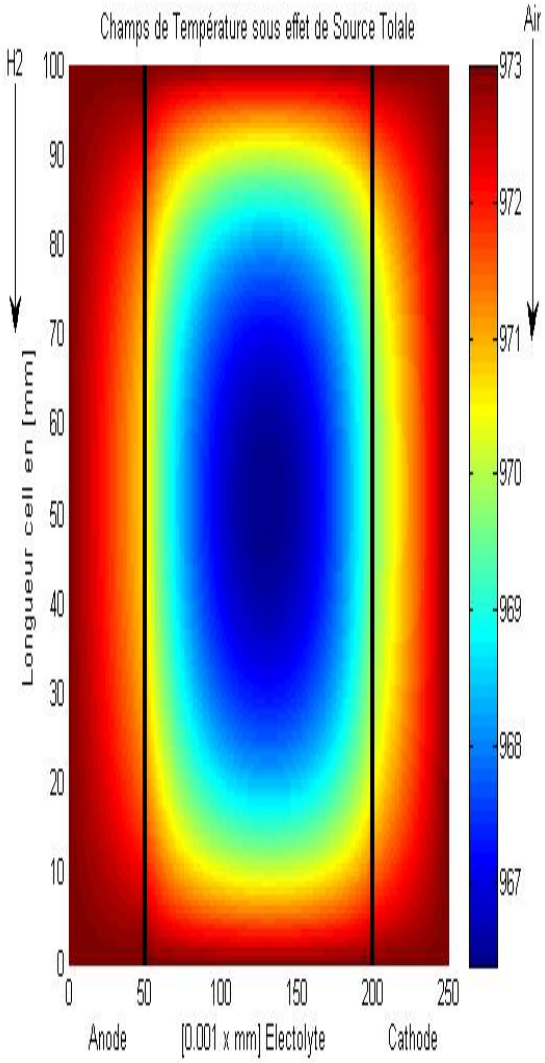


(a): T_{H2} = Tair = 873K , I = 12000 A/m² ***(b): T_{H2} = 873 K= Tair , I = 20000 A/m²***

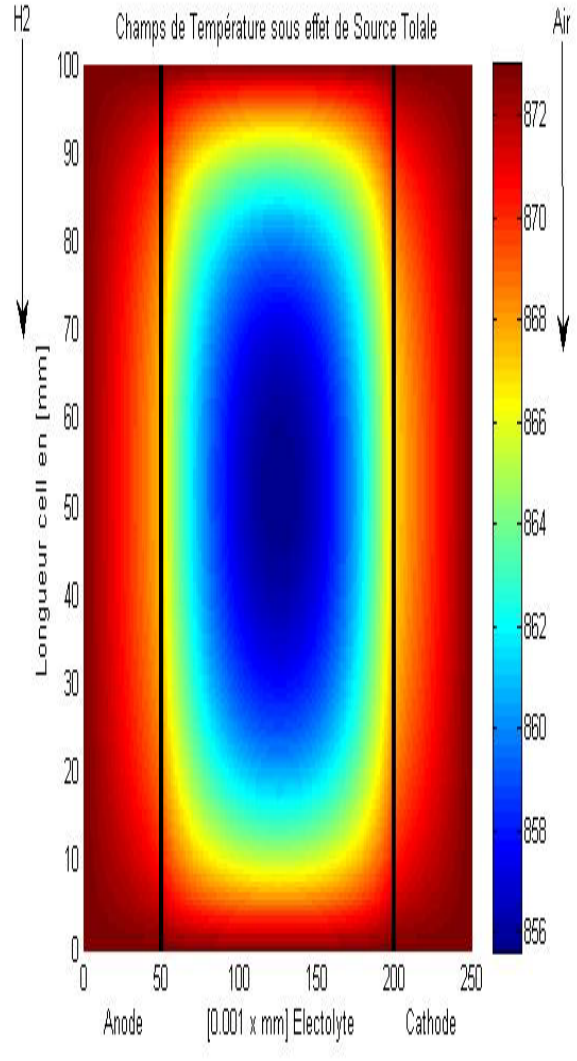
Fig. III.11.*Champ thermique sous l'effet de la source Ohmique.*

3) Une densité de courant I = **12000** A/m² et aux températures (air et gaz) $T_{H2} = T_{air} =$ **1273** K, on aura la même allure, et avec une élévation de température de $\Delta T =$**2.059 K**.

Si on localise l'élévation de températures et on trouve qu'elle est concentrée dans l'électrolyte et l'élévation ΔT diminue au fur et à mesure que la température de fonctionnement augmente.



(a): $T_{H2} = T_{air} = 873K$, $I = 12000\ A/m^2$



(b): $T_{H2} = 873\ K = T_{air}$, $I = 20000\ A/m^2$

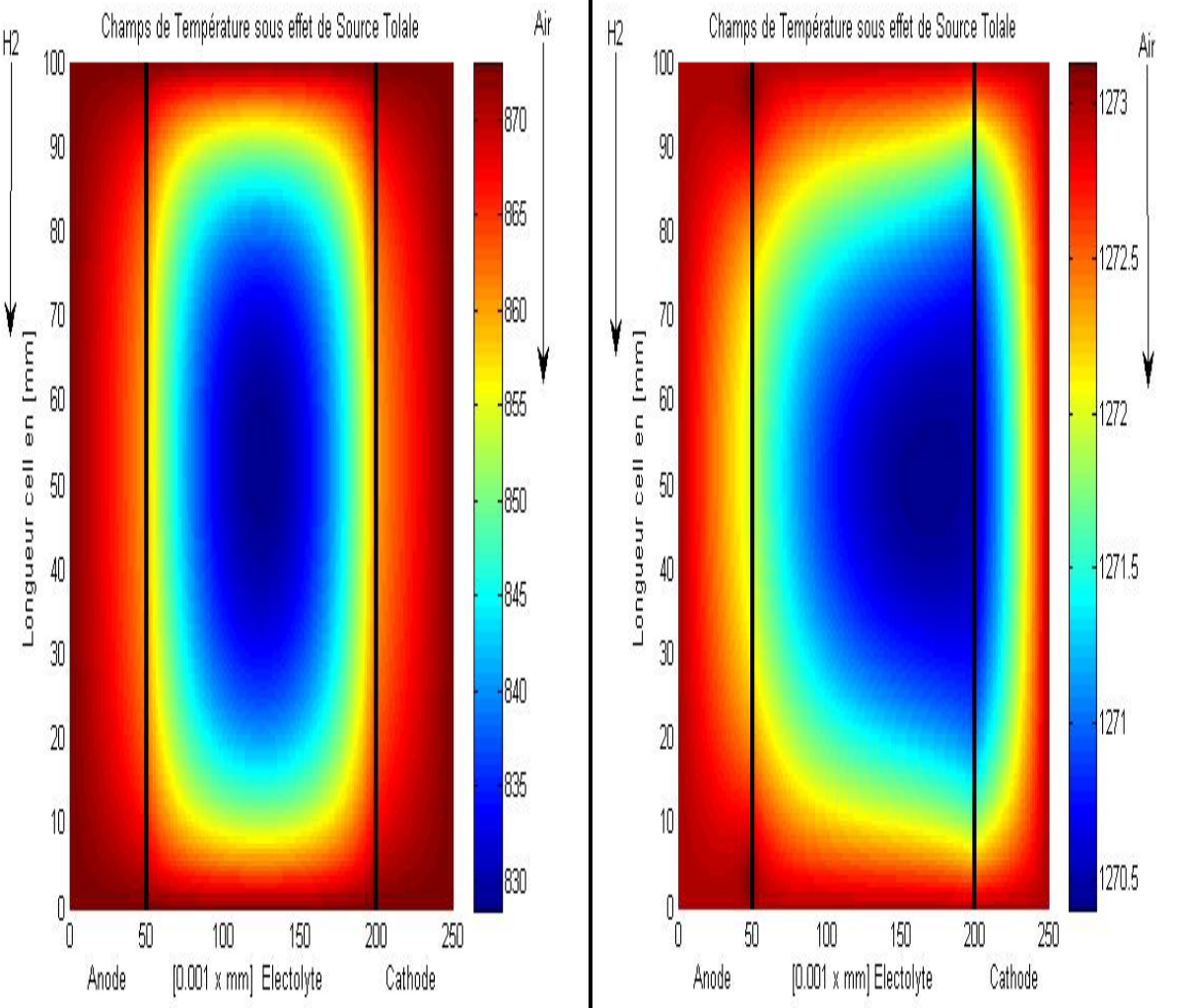
Fig. III.12. *Champ thermique sous l'effet de la source Totale.*

La figure (Fig. III.12) montre que sous l'effet de la source Totale dans une cellule SOFC_P à E/S, l'élévation de la température se localise et se concentre dans les électrodes (Anode et cathode) et pour bien éclaircir on distingue deux cas :

1) Pour la densité de courant I = **12000** A/m² et aux températures (air/gaz) $T_{H2} = T_{air} =$ **873** K, on aura la même allure et avec une élévation de température $\Delta T =$ **17.73 K**.

2) Pour la densité de courant I = **20000** A/m² et aux températures (air/gaz) $T_{H2} = T_{air} =$ **873** K, on aura la même allure et avec une élévation de température $\Delta T =$ **44.51K**.

Et si on localise l'élévation de températures, on trouve qu'elle est concentrée dans les parties en dehors de l'électrolyte et l'élévation ΔT augmente au fur et à mesure que la densité de courant augmente



(a): $T_{H2} = T_{air} = 873K$, I = 12000 A/m² | ***(b): $T_{H2} = 1273$ K= T_{air} , I = 12000 A/m²***

Fig. III.13.*Champ thermique sous l'effet de la source Totale.*

La figure (Fig. III.13) montre que sous l'effet de la source Totale dans une cellule SOFC_P à E/S, l'élévation de la température se localise toujours dans les électrodes (Anode et cathode) comme le montre les deux cas :

1) Pour la densité de courant I = **12000** A/m² et aux valeurs de températures (air/gaz) $T_{H2} = T_{air} =$ **973** K on aura la même allure et avec une élévation de température $\Delta T =$ **6.63 K**.

2) Pour la densité de courant I = **20000** A/m² et aux valeurs de températures (air/gaz) $T_{H2} = T_{air} =$ **1273** K on aura la même allure et avec une élévation de température $\Delta T =$ **2.73K**.

On remarque que l'abaissement de températures est concentré dans l'électrolyte et l'élévation ΔT diminue au fur et à mesure que la température de fonctionnement et la densité de courant augmentent en même temps.

I.4. Pertes d'activation en fonction de la densité de courant (I)

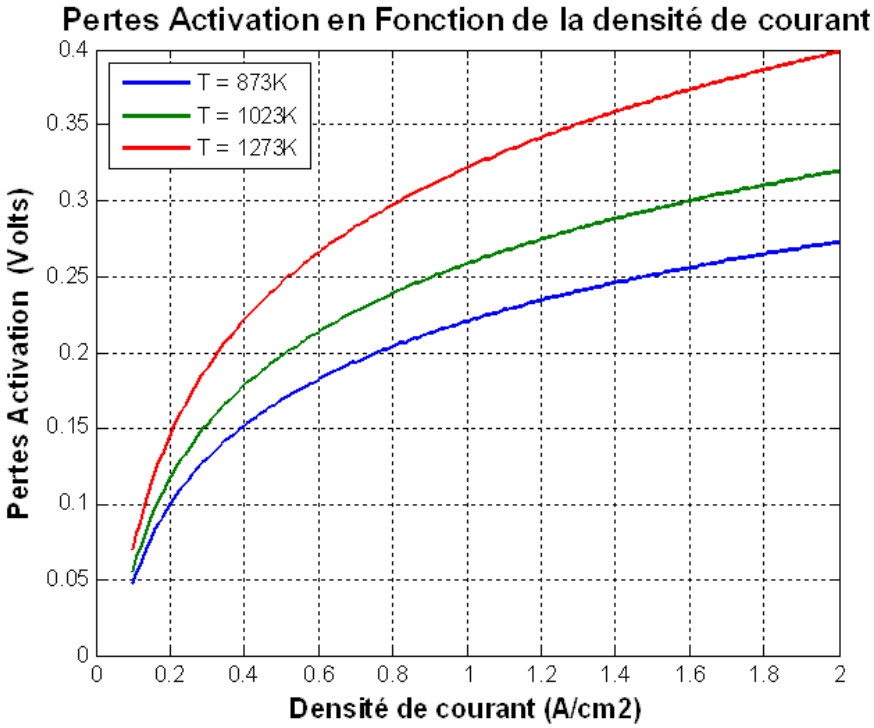


Fig. III.14. *Pertes d'activation en fonction de la densité de courant* $\eta_{act} = f(I)$

Densité de courant du SOFC suivant les pertes d'activation

Dans la figure (Fig. III.14), l'effet de la variation de densité de courant sur les pertes d'activation, dans la cellule SOFC à anode supportée. Pour trois valeurs de températures 873 K ,1023K et 1273 K, on remarque que les pertes varient

proportionnellement avec la densité de courant.

La cellule SOFC à anode supporté présente l'intervalle de densité de courant I (**0** à **2** A/cm²).

I.5. Pertes d'activation en fonction de la température (T)

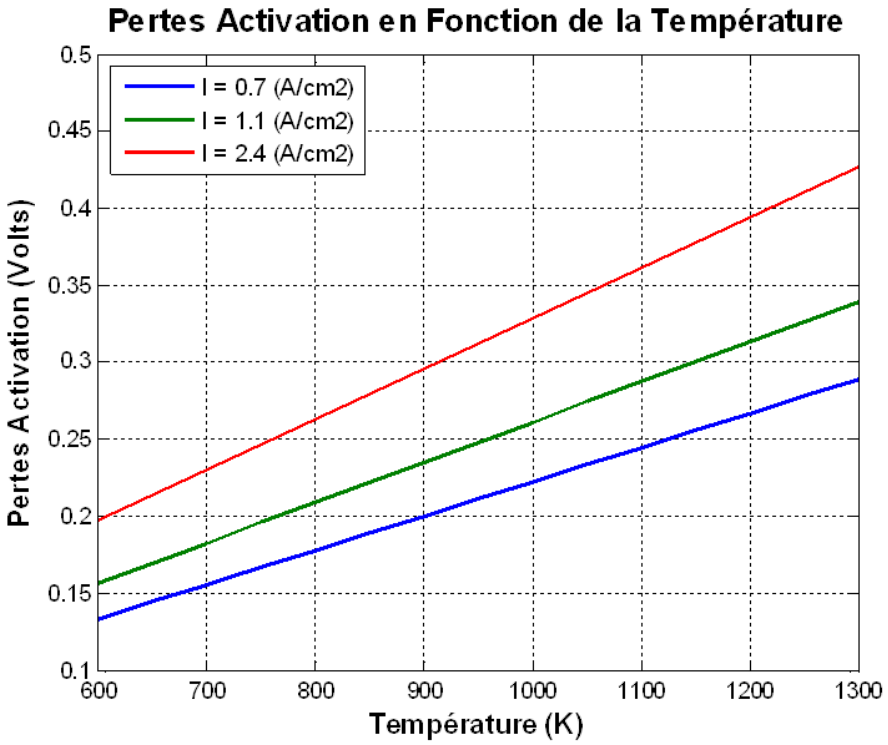


Fig. III.15. *Courbes de pertes d'activation* $\eta_{act} = f(T)$ $\eta_{act} = f(I)$

Température du SOFC suivant les pertes d'activation

Dans la figure (Fig. III.15), l'effet de la variation de température sur les pertes d'activation, dans la cellule SOFC à anode supportée. Pour trois valeurs de densité de courant 0,7 A/cm², 1,1 A/cm² et 2,4 A/cm² on remarque que les pertes varient proportionnellement avec la température.

La cellule SOFC à anode supporté présente l'intervalle de températures T (600 à 1300 K). Lorsque la température passe de 600 à 1300 K, les pertes d'activation varient de 0.1 à 0.2 Volt dans le cas des piles à anode supportée.

Conclusion générale

L'analyse mathématique qu'on a développée en utilisant la méthode des différences finies et les données expérimentales de la littérature pour la résolution numérique des équations gouvernant le système de la pile à combustible (SOFC) avec les conditions ayant des propriétés de matériaux différents. Cette étude montre que les transports de la température dans les domaines d'électrodes sont différents; la distribution est parfois concave et parfois presque une droite dans la direction longitude. La performance dansle plan parallèle au sens de l'écoulement des gaz du SOFC planaire à anode supportée, est meilleure que celle d'uneSOFC planaire à électrolyte supporté pour le même matériau utilisé et les mêmes conditions d'exploitation. De cette étude, les densités de courant sont disponibles pour chaque type de pile SOFC (électrolyte et anode supportés) avec des matériaux différents et d'épaisseurs différentespour les composantes. . En outre, les effets du matériau d'électrolyte et les températures de fonctionnement jouent un rôle important dans la performance de la pile SOFC obtenue par l'utilisation des mêmes matériaux d'électrode. Dans le 1er chapitre de ce travail l'électrolyte (YSZ) montre que la densité de puissance est plus élevée que celle de l'électrolyte (CGO) aux températures plus élevées que 750°C. Aussi il indique que Les valeurs de conductivité électrique de matériaux d'électrolyte et d'électrode peuvent contribuer à améliorer la performance globale de la SOFC adaptée avec les températures de fonctionnement.

En se basant sur ce modèle, l'exécution de SOFC à l'équilibre a été analysée en employant le code **Matlab**. Les résultats de cette étude sont accentués comme suit :

- Les profils thermiques dans les différentes parties de la pile.
- L'élévation de température ΔT lors de chaque évolution et changement de paramètres.
- Le profil de température en absence de sources thermiques.
- Introduire les pertes de polarisation (Ohmique, Activation, Concentration et Totale) des trois parties(anode/cathode/électrolyte)dans le calcul des résultats et interpréter les graphs y afférents.

Remarquons que l'augmentation de la température et le gradient de température jouent un rôle défavorable pour avoir une meilleure performance de pile donc la tension de courant de fonctionnement doit être convenablement choisi selon les conditions de l'utilisation en raison d'améliorer le fonctionnement de la cellule SOFC.

Cette modélisation numérique 2-D des phénomènes de transfert de chaleur abordée pour une cellule de la pile SOFC type planaire à Co-courant dans le plan parallèle au sens du l'écoulement de l'air et de l'hydrogène en fonctionnant aux températures allant de 600°C à 1000°C, a une importance sur la compréhension des phénomènes électrochimiques et thermiques intervenant dans le bon fonctionnement de la pile SOFC.

Nos résultats trouvés par ce modèle de calcul adaptés confrontent ceux trouvés par les auteurs indiqués dans les références. Comme perspective à cette étude, on souhaite refaire l'étude tridimensionnelle.

Références bibliographiques

[1] *Ashok V. Joshi, james J. Steppan, Dale M. Taylor & S. Elangovan.* ***Solid Electrolyte Materials, Devices, and Applications****. Journal of Electroceramics13(2004)619–625.*

[2] *Y. Inui, N. Ito, T. Nakajima, A. Urata .****Analytical investigation on celltemperature control method of planar solid oxide fuel cell****. Energy Conversion and Management 47 (2006) 2319–2328.*

[3] *Toshio Suzuki, Masanobu Awano, PiotrJasinski, Vladimir Petrovsky, Harlan U. Anderson .****Composite (La, Sr)MnO3–YSZ cathode for SOFC. Solid State Ionics****. Solid State Ionics 177 (2006) 2071 – 2074.*

[4] *Y. Lin, S.B. Beale,* ***Performance predictions in solid oxide fuel cells****. Applied Mathematical Modeling 30 (2006) 1485–1496.*

[5] *A.A. Kulikovsky .****A simple equation for temperature gradient in a planar SOFCstack****. International journal of hydrogen energy 35 (2010) 308–312.*

[6] *P.A. Ramakrishna, Shi Yang, C.H. Sohn.****Innovative design to improve the powerdensity of a solid oxide fuel cell****. Journal of Power Sources 158 (2006) 378–384.*

[7] *ThameurAloui, KamelHalouani.* ***Analytical modeling of polarizations in a solid oxide fuel cell using biomass syngas product as fuel.*** *Applied Thermal Engineering 27 (2007) 731–737.*

[8] *Rajendra N. Basu. Materials for Solid Oxide Fuel Cells. Central Glass and Ceramic Research Institute700- 032.*

[9] *C. Zhang, H.-L. Liao, W.-Y. Li, G. Zhang, C. Coddet, C.-J. Li, C.-X. Li and X.-J. Ning.* ***Characterization of YSZ Solid Oxide Fuel Cells Electrolyte Deposited byAtmospheric Plasma Spraying and Low Pressure Plasma Spraying.****15(2006)598-603*

[10] *Yixin Lu, Laura Schaefer .****Numerical study of a flat-tube high power density solidoxide fuel cell Part II: Cell performance and stack optimization****. Journal of Power Sources 153 (2006) 68–75.*

[11] *Chan-Yeup Chung, Yong-Chae Chung.* ***Performance characteristics of microsingle-chamber solid oxide fuel cell: Computational analysis****. Journal of Power Sources 154 (2006) 35–41.*

[12] *H. Apfel, M. Rzepka, H. Tu, U.* ***Stimming. Thermal start-up behavior and thermalmanagement of SOFC's****. Journal of Power Sources 154 (2006) 370–378.*

[13] *Wei Jiang , Ruixian Fang , Jamil A. Khan, Roger A. Dougal .****Parameter settingand analysis of a dynamic tubular SOFC model****. Journal of Power Sources 162 (2006) 316–326.*

[14] *Yan Ji, Kun Yuan, J.N. Chung, Yen-Cho Chen.* ***Effects of transport scale onheat/mass transfer and performance optimization for solid oxide fuel cells****. Journal of Power Sources 161 (2006) 380–391.*

[15] *Shixue Liu, Wei Kong, Zijing Lin.* ***Three-dimensional modeling of planar solidoxide fuel cells and the rib design Optimization****. Journal of Power Sources 194(2009) 854–863.*

[16] *David L. Damm, Andrei G. Fedorov .**Reduced-order transient thermal modelingfor SOFC heating and cooling**. Journal of P. S 956–967.*

[17] *A. Chaisantikulwat, C. Diaz-Goano , E.S. Meadows. **Dynamic modeling andcontrol of planar anode-supported solid oxide fuel cell**. Computers and Chemical Engineering 32 (2008) 2365–2381.*

[18] *AnchasaPramuanjaroenkij, Sadik Kaka, Xiang Yang Zhou. **Mathematicalanalysis of planar solid oxide fuel cells**. INTERNATIONALJOURNALOFHYDROGENENERGY 33 (2008) 2547– 2565.*

[19] *Vinod M. Janardhanan, Vincent Heuveline, Olaf Deutschmann .**Performanceanalysis of a SOFC under direct internal reforming conditions**.Journal of Power Sources 172 (2007) 296–307.*

[20] *Masayuki Suzuki, NaokiShikazono, Koji Fukagata, Nobuhide Kasagi.**Numerical analysis of coupled transport and reaction phenomena in an anode-supported flat-tube solid oxide fuel cell**.Journal of P. S 180 (2008) 29–40.*

[21] *Qiusheng Wang, Lijun Li, Cheng Wang.**Numerical Study of Thermoelectric Characteristics of a Planar Solid Oxide Fuel Cell with Direct Internal Reforming ofMethane**.Journal of Power Sources 7-10-2008.*

[22] *Stefano Cordiner; Alessandro Mariani; Vincenzo Mulone.**AN INTEGRATED CFD-APPROACH TO DESIGN MICRO-TUBULAR SOLID OXIDE FUEL CELLS**.Thermal Issues in Emerging Technologies.*

[23] *Y. Chen, S. Omar, A.K. Keshri, K. Balani, K. Babu, J.C. Nino,S. Seal and A.Agarwal. **Ionic conductivity of plasma-sprayed nanocrystallineyttria-stabilized zirconia electrolytefor solid oxide fuel cells**.ScriptaMaterialia 60 (2009) 1023–1026.*

[24] *Subhash C Singhal et Kevin Kendall. **High Temperature Solid Oxide Fuel Cells: Fundamentals, Design and Applications**.*ISBN 1856173879.

[25] *Ying-Wei Kanga,∗, Jun Li , Guang-Yi Cao, Heng-Yong Tu, Jian Li, Jie Yang .**A reduced1D dynamic model of a planar direct internal reforming solid oxide fuel cell for systemresearch**.*Journal of Power Sources 188 (2009) 170–176 .

[26] *AnchasaPramuanjaroenkij,Sadik Kaka, Xiang Yang Zhou.**Mathematical analysis of planar solid oxide fuel cells.**Internationaljournalofhydrogenenergy 33 (2008) 2547–2565*

[27] PilarLisbona , Alessandro Corradetti, Roberto Bove, PieroLunghi.**Analysis of a solid oxide fuel cell system for combined heat and power applications under non-nominal conditions.***ElectrochimicaActa 53 (2007) 1920–1930.*

[28] Changbo Lee, JoongmyeonBae.**Fabrication and characterization of metal-supported solidoxide fuel cells**.*Journal of Power Sources 176 (2008) 62–69.*

[29] Chen-li Sun,Hsien-ChihOu.**Numerical characterization of a microscale solid**-oxide **fuel cell.** *Journal of Power Sources 185 (2008) 363–373.*

[30] Denver F. Cheddie, Norman D.H. Munroe. **A dynamic 1D model of a solid oxide fuel cellfor real time simulation**. *Journal of Power Sources 171 (2007) 634–643.*

[31] J.R. Ferguson, J.M. Fiard b, R. Herbin .**Three-dimensional numerical simulation for various geometries of solid oxide fuel cells.***Journal of Power Sources 58 (1996) 109-122.*

[32] Yixin Lu, Laura Schaefer, PeiwenLi.**Numerical study of a flat-tube high power density solid oxide fuel cell.Part I. Heat/mass transfer and fluid flow.***Journal of Power Sources 140 (2005) 331–339.*

[33] Xiongwen Zhang, Jun Li, GuojunLi ,ZhenpingFeng. **Numerical study on the thermal characteristics in a tubular solid oxide fuel cell with indirect internal reformer.**International Journal of Thermal Sciences 48 (2009) 805–814.

[34] K.J. Daun, S.B. Beale, F. Liu, G.J. Smallwood. **Radiation heat transfer in planar SOFCelectrolytes**. *Journal of Power Sources 157 (2006) 302–310.*

[35] Pei-Wen Li, Minking K. Chyu**Simulation of the chemical/electrochemical reactions and heat/mass transfer for a tubular SOFC in a stack.***Journal of Power Sources 124 (2003) 487–498*

[36] David L. Damm, Andrei G. Fedorov .**Local thermal non-equilibrium effects in porous electrodesof the hydrogen-fueled SOFC.** *Journal of Power Sources 159 (2006) 1153–1157.*

[37] Sunil Murthy, Andrei G. Fedorov .**Radiation heat transfer analysis of the monolith type solid oxide fuel cell.** *Journal of Power Sources 124 (2003) 453–458.*

[38] Ying-Wei Kanga, Jun Li ,Guang-Yi Cao , Heng-Yong Tu, Jian Li , Jie Yang .**Dynamic temperature modeling of an SOFC using least squares support vector machines.***Journal of Power Sources 179 (2008) 683–692.*

[39] YaneepornPatcharavorachot, AmornchaiArpornwichanop , Anon Chuachuensuk.**Electrochemical study of a planar solid oxide fuel cell:Role of support structures .***Journal of Power Sources 177 (2008) 254–261.*

[40] D. Sànchez, R. Chacartegui, A. Munoz, T. Sànchez .**Thermal and electrochemical model of internal reforming solid oxide fuel cells with tubular geometry.** *Journal of Power Sources 160 (2006) 1074–1087.*

[41] Lijin Wang, Huisheng Zhang, ShilieWeng .**Modeling and simulation of solid oxide fuel cell based on the volume–resistance characteristic modeling technique.** *Journal of Power Sources 177 (2008) 579–589.*

[42] YunzhenYang ,Guilan Wang, Haiou Zhang , Weisheng Xia .**Comparison of heat and mass transfer between planar andMOLB-type SOFCs.** *Journal of Power Sources 177 (2008) 426–433.*

[43] M.A. Khaleel , Z. Lina, P. Singh, W. Surdoval, D. Collin.**A finite element analysis modeling tool for solid oxidefuel cell development: coupled electrochemistry,thermal and flow analysis in MARC** .*Journal of Power Sources 130 (2004) 136–148.*

[44] YingruZhaoa, CongjieOub, Jincan Chena **.A new analytical approach to model and evaluate the performance of a classof irreversible fuel cells.** International journal of hydrogen energy 33 (2008) 4161–4170.

[45] B*. Zitouni.* ***Etude Numérique des Phénomènes de Transfert dans les Piles à Combustible à Oxyde Solide de Type Planaire****. Thèse de Doctorat .Facultés des sciences de L'ingénieur. Université de Batna .2007.*

Résumé

Le but de cette étude est l'analyse et l'obtention de la variation de la température dans la pile à combustible à oxyde solide (SOFC) sous l'effet de la configuration géométrique et les différentes surtensions. La comparaison des allures thermiques de la pile par un modèle de calcul pour différentes températures de fonctionnement au niveau d la partie solide est réalisée. Les champs thermiques bidimensionnels des trois espèces hydrogène, eau et oxygène dans les électrodes poreuses sous l'effet des sources de chaleur, des configurations géométriques, des densités de courant et de termes convectif ont été obtenus. Finalement l'effet de l'étude longitudinale et l'épaisseur sur le champ de température est étudié.

Mots clés : SOFC, Température, Sources de chaleur, Numérique, Matlab.

ملخَص

الهدف من هذه الدراسة هو التحليل والحصول على التغيرات في درجة الحرارة داخل الخلية تحت تأثير التشكل الهندسي ومختلف الضياع. (SOFC) الوقودية ذات النواة الصلبة .وقد تمت مقارنة المنحنيات الحرارية لهذه الخلية بنموذج حسابي لمختلف دراجات الحرارة العملية على مستوى المناطق الصلبة الثلاث.

وتم الحصول على الحقول الحرارية ثنائية البعد للعناصر الثلاث الهيدروجين والأكسجين والماء داخل الأقطاب الكهربائية المسامية تحت تأثير مصادر الحرارة والتشكل الهندسي والتيارات الكهربائية وكذا الحمل الحراري.

الكلمات الأساسية: *SOFC.* **,درجة الحرارة , مصادر الحرارة , العددية , ماطلاب.**

Abstract

The purpose of this study is to analyze and obtain the variation of the temperature in the solid oxide fuel cell (SOFC) as a result of the geometrical configuration and the different voltages. Comparing graphs of the thermal cell with a computational model for different operating temperatures at the level of the solid part is also made. The two-dimensional temperature fields of the three species hydrogen, oxygen and water in the porous electrodes under the influence of heat, the geometric configurations, and the current densities; thus, they were obtained under convective and diffusive. Finally, the effect of the longitudinal study and the thickness of the temperature field are studied.

Key Word: SOFC, Temperature, Heat Sources, Numerical, Matlab.