

RÉPUBLIQUE ALGÉRIENNE DÉMOCRATIQUE ET POPULAIRE

**MINISTÈRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPÉRIEUR
ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE**

MÉMOIRE

Présenté

**AU DÉPARTEMENT DE MÉCANIQUE
FACULTÉ DES SCIENCES DE L'INGÉNIEUR
UNIVERSITÉ DE BATNA**

Pour l'obtention du diplôme de

**MAGISTÈRE EN GÉNIE MÉCANIQUE
Option : Énergétique**

**Par
M^{lle} ABDENEBI Hafsia**

**Étude numérique bidimensionnelle des champs thermiques
dans une pile à combustible du type SOFC planaire**

Soutenu le 01/07/2009

Prof. BEN MOUSSA Hocine	Prof. Université de Batna	Président
Dr. ZITOUNI Bariza	M.C. Université de Batna	Rapporteur
Dr. MOUMI Nour Eddine	M.C. Université de Biskra	Examineur
Dr. ZEROUAL Mustapha	M.C. Université de Batna	Examineur

Sommaire

Liste des figures et des tableaux.....	
Nomenclature et Indices.....	
Introduction Générale.....	1

Chapitre I **Équation d'Énergie; Modèles Mathématiques** **et Sources de Chaleur: État d'Art**

Introduction.....	3
I. Généralité sur la pile SOFC.....	3
I.1. Principe de fonctionnement.....	3
I.2. Composant d'une cellule SOFC.....	4
II. Équation d'énergie et terme source: Étude bibliographique.....	5
III. Différentes expressions des sources de chaleur.....	10
III.1. Source de chaleur due aux surtensions ohmiques.....	11
III.2. Source de chaleur due aux surtensions d'activation.....	11
III.3. Source de chaleur due aux surtensions de concentration.....	13
III.4. Source de chaleur due à la réaction chimique.....	15
III.4.1. Pile alimentée par l'hydrogène.....	15
III.4.1.1. Expression et localisation de la source de chaleur chimique.....	16
III.4.1.2. Différentes expressions de la chaleur chimique.....	16
III.4.1.2.1. Chaleur chimique en fonction de l'entropie.....	16
III.4.1.2.2. Chaleur chimique en fonction de l'enthalpie et l'énergie libre de Gibbs.....	18
III.4.2. Pile alimentée par un mélange de gaz.....	22

Chapitre II **Étude Numérique 2-D des Champs Thermiques dans une SOFC_P:** **Modélisation Mathématique et Résolution Numérique**

Introduction.....	26
I. Modèle physique.....	26
II. Modèle mathématique.....	26
II.1. Équations gouvernantes.....	26
II.2. Hypothèses simplificatrices.....	28
III. Équations gouvernantes et terme source dans les différents composants de la cellule.....	28
III.1. Interconnexions.....	28
III.2. Électrode.....	28
III.2.1. Cathode.....	28
III.2.2. Anode.....	29
III.3. Interfaces électrodes/électrolyte.....	31
III.3.1. Interface cathode/électrolyte.....	31
III.3.2. Interface anode/électrolyte.....	32
III.4. Électrolyte.....	32
IV. Conditions aux limites.....	34
V. Résolution numérique.....	34

V.1. Discrétisation de l'équation de transport.....	35
VI. Tableaux des données.....	37
VII. Structure du programme.....	38
VIII. Organigrammes	40

Chapitre III

Résultats et Interprétations

Introduction.....	42
I. Champ de température pour différentes expressions de la source chimique.....	42
I.1. Source de chaleur chimique en fonction de différente expression de l'entropie.....	42
I.2. Source de chaleur chimique en fonction de différentes expressions de l'enthalpie	42
I.3. Choix de l'expression de la source de chaleur due à la réaction chimique.....	44
I.4. Performance de la pile.....	45
II. Cellule SOFC fonctionnant aux mêmes températures de gaz.....	45
II.1. Champ de température pour une cellule SOFC à anode supportée.....	45
II.1.1. Source de chaleur due aux gaz.....	45
II.1.2. Source de chaleur due aux surtensions Ohmiques.....	46
II.1.3. Source de chaleur due aux surtensions d'activations et de concentration.....	46
II.1.4. Source de chaleur due aux surtensions électriques.....	47
II.1.5. Source de chaleur due à la réaction chimique.....	49
II.1.6. Source de chaleur totale.....	50
II.1.7. Performance de la pile	52
II.2. Champ de température pour une cellule SOFC à électrolyte supportée.....	52
II.2.1. Source de chaleur due aux gaz.....	52
II.2.2. Source de chaleur due aux surtensions Ohmiques.....	52
II.2.3. Source de chaleur due aux surtensions d'activations et de concentration.....	52
II.2.4. Source de chaleur due aux surtensions électriques.....	55
II.2.5. Source de chaleur due à la réaction chimique.....	57
II.2.6. Source de chaleur totale.....	57
II.2.7. Performance de la pile.....	59
III. Inégalité des températures d'hydrogène et d'air	59
III.1. Température d'hydrogène est supérieur à celle de l'air.....	61
III.1.1. Champ de température pour une cellule SOFC à anode supportée.....	61
III.1.2. Champ de température pour une cellule SOFC à électrolyte supporté.....	61
III.1.3. Effet de la configuration géométrique.....	64
III.1.4. Performance de la pile.....	64
III.2. Température de l'air est supérieur à celle de l'hydrogène.....	64
III.2.1. Champ de température pour une cellule SOFC à anode supportée.....	64
III.2.2. Champ de température pour une cellule SOFC à électrolyte supporté.....	66
III.2.3. Effet de la configuration géométrique.....	66
III.2.4. Performance de la pile.....	66
Conclusion générale.....	72

Symboles Latins

Paramètre	Signification	Unité (S.I)
C_p	Chaleur spécifique du fluide à pression constante.	[J.Kg ⁻¹ .K]
D_{eff}	Coefficient de diffusion effectif	[m ² .s]
e	Epaisseur de chaque composant	[μm]
E^0	Potentiel réversible standard	[V]
$E_{idéal}$	Potentiel idéal d'une cellule	[V]
E	Energie d'activation	[J.mole ⁻¹]
F	Constante de Farady	[C.mole ⁻¹]
i_0	Densité de courant d'échange	[A.m ²]
i	Densité de courant	[A.m ²]
M	Masse molaire	[g.mole ⁻¹]
n	Nombre d'électron	/
p	Pression	[Pa]
R	Constante des gaz parfait	[J.mole ⁻¹ .K]
S	Source de chaleur	[W.m ³]
T	Température	[K]
V	Tension de la cellule	[V]
u, v	Composantes du vecteur vitesse	[m.s ⁻¹]
W_{el}	Travail électrique maximal	[J.mole ⁻¹]
X	Fraction massique des espèces ($i = H_2, H_2O, O_2$)	/
ΔG	Variation de l'énergie de Gibbs	[J.mole ⁻¹]
ΔH	Variation d'enthalpie	[J.mole ⁻¹]
ΔS	Variation d'entropie de formation	[J.mole ⁻¹ .K]

Symboles grecs

symbole	Signification	Unité (S.I)
δ	Epaisseur de la zone où la chaleur est produite	[mm]
σ	Conductivité électrique	[Ω ⁻¹ .m ⁻¹]
η	Surtension	[V]
γ	Coefficient pré exponentiel	/
α	Coefficient de transfert de charge	/

Indices et Exposants

Indice	Signification
an	anode
cat	cathode
ele	électrolyte
ohm	ohmique
act	activation
con	concentration
chim	chimique
l	limite
int <i>f</i>	interface
eff	effective
ref	référence
T	thermique
tot	total
pr	produit-réactif
Exposant	Signification
0	État standard

1. Liste des figures

- Fig. I.1:** Principe de fonctionnement de la pile à combustible SOFC
- Fig. II.2:** Modèle physique et conditions aux limites
- Fig. II.3:** Structure du programme
- Fig. II.4:** Organigramme du programme
- Fig. III.1:** Champ de température d'une SOFC_P à AS dont la source de chaleur chimique est exprimée en fonction de l'entropie, $T_{H_2/air} = 873$ K. (a): [13] et (b): [27]
- Fig. III.2:** Champ de température d'une SOFC_P à AS à dont la source de chaleur chimique est en fonction de différente expression de l'enthalpie, (a): [23], (b): [8], (c):[2], (d): [32] et (e)
- Fig. III.3:** Profil de température en fonction des différentes expressions de la source de chaleur
- Fig. III.4:** Effet de l'expression de la source chimique sur la performance d'une SOFC_P à AS
- Fig. III.5:** Champ de température d'une SOFC_P à AS sous l'effet de la source de chaleur due aux gaz. (a): $T = 873$ K et (b): $T = 1173$ K
- Fig. III.6:** Champ de température d'une SOFC_P à AS sous l'effet de la source de chaleur due aux surtensions Ohmiques. (a): $T = 873$ K, (b): $T = 973$ K, (c): $T = 1073$ K et (d): $T = 1173$ K
- Fig. III.7:** Champ de température d'une SOFC à AS sous l'effet de la source de chaleur due aux surtensions de concentration et d'activation appliquée aux interfaces électrodes/électrolyte. (a): $T = 873$ K, (b): $T = 973$ K, (c): $T = 1073$ K et (d): $T = 1173$ K
- Fig. III.8:** Champ de température d'une SOFC_P à AS sous l'effet de la source de chaleur due aux surtensions de concentration et d'activation appliquée dans les électrodes. (a): $T = 873$ K et (b): $T = 1173$ K
- Fig. III.9:** Champ de température d'une SOFC_P à AS sous l'effet des surtensions électriques (a): $T = 873$ K, (b): $T = 973$ K, (c): $T = 1073$ K et (d): $T = 1173$ K
- Fig. III.10:** Champ de température d'une SOFC_P à AS sous l'effet de la source de chaleur due à la réaction chimique. (a): $T = 873$ K, (b): $T = 973$ K, (c): $T = 1073$ K et (d): $T = 1173$ K
- Fig. III.11:** Champ de température d'une SOFC_P à AS sous l'effet de la source totale de chaleur. (a): $T = 873$ K, (b): $T = 973$ K, (c): $T = 1073$ K et (d): $T = 1173$ K
- Fig. III.12:** Effet de la source totale de chaleur sur la performance d'une SOFC_P à AS (a): $T = 873$ K et (b): $T = 1173$ K
- Fig. III.13:** Champ de température d'une SOFC_P à ES sous l'effet de la source de chaleur due aux gaz, (a): $T = 873$ K et (b): $T = 1173$ K
- Fig. III.14:** Champ de température pour une SOFC_P à ES sous l'effet de la source de chaleur due aux surtensions Ohmiques. (a): $T = 873$ K, (b): $T = 973$ K, (c): $T = 1073$ K et (d): $T = 1173$ K
- Fig. III.15:** Champ de température d'une SOFC_P à ES sous l'effet de la source de chaleur due aux surtensions de concentration et d'activation appliquée aux interfaces électrodes/électrolyte. (a): $T = 873$ K, (b): $T = 973$ K, (c): $T = 1073$ K et (d): $T = 1173$ K
- Fig. III.16:** Champ de température d'une SOFC_P à ES sous l'effet de la source de chaleur due aux surtensions de concentration et d'activation appliquée dans les électrodes (a): $T = 873$ K et (b): $T = 1173$ K
- Fig. III.17:** Champ de température d'une SOFC_P à ES sous l'effet des surtensions électriques (a): $T = 873$ K, (b): $T = 973$ K, (c): $T = 1073$ K et (d): $T = 1173$ K
- Fig. III.18:** Champ de température d'une SOFC_P à ES sous l'effet de la source de chaleur due à la réaction chimique. (a): $T = 873$ K, (b): $T = 973$ K, (c): $T = 1073$ K et (d): $T = 1173$ K
- Fig. III.19:** Champ de température d'une SOFC à ES sous l'effet de la source totale de chaleur (a): $T = 873$ K, (b): $T = 973$ K, (c): $T = 1073$ K et (d): $T = 1173$ K
- Fig. III.20:** Effet de la source totale de chaleur sur la performance d'une SOFC_P à ES, (a) et (b)
- Fig. III.21:** Champ de température pour une cellule SOFC_P à AS fonctionnant aux différentes températures de gaz ($T_{H_2} > T_{air}$). (a), (c), (e) et (g): Effet des température des gaz (b), (d), (f) et (h): Effet de la source totale de chaleur
- Fig. III.22:** Champ de température pour une cellule SOFC à ES fonctionnant aux différentes températures de gaz ($T_{H_2} > T_{air}$). (a), (c), (e) et (g): Effet des température des gaz, (b), (d), (f) et (h): Effet de la source totale de chaleur

- Fig. III.23:** Performance d'une SOFC_P: $T_{H_2} > T_{air}$, (a): SOFC à AS et (b): SOFC à ES
- Fig. III.24:** Champ de température pour une cellule SOFC à AS fonctionnant aux différentes températures de gaz ($T_{H_2} < T_{air}$)
 (a), (c), (e) et (g): Effet des température des gaz
 (b), (d), (f) et (h): Effet de la source totale de chaleur
- Fig. III.25:** Champ de température pour une cellule SOFC à ES fonctionnant aux différentes températures de gaz ($T_{H_2} < T_{air}$)
 (a), (c), (e) et (g): Effet des température des gaz
 (b), (d), (f) et (h): Effet de la source de chaleur totale
- Fig. III.26:** Performance d'une SOFC_P: $T_{H_2} < T_{air}$, (a) et (b)

2. Liste des tableaux

- Tableau I.1:** Propriétés physiques du SOFC [2]
- Tableau I.2:** Propriétés physiques du SOFC [4]
- Tableau I.3:** Propriétés physiques du SOFC [5]
- Tableau I.4:** Chaleur chimique et Ohmique dans la cellule [6]
- Tableau I.5:** Chaleur générée dans les composants de la cellule [7]
- Tableau I.6:** Dimensions d'une cellule SOFC [2], [4], [5] et [7]
- Tableau I.7:** Propriétés physiques de la cellule [7]
- Tableau I.8:** Propriétés physiques de l'air et l'hydrogène [7]
- Tableau I.9:** Dimensions d'une cellule SOFC [8]
- Tableau I.10:** Propriétés physiques des matériaux des composants [8]
- Tableau I.11:** Propriétés physiques de la cellule
- Tableau I.12:** Conductivités électriques
- Tableau I.13:** Expressions de la densité de courant d'échange i_0
- Tableau I.14:** Pressions partielles de (H_2 , H_2O , O_2) aux interfaces électrolyte/électrodes [25]
- Tableau I.15:** Constantes suivant [1]
- Tableau I.16:** Coefficients des chaleurs spécifiques des gaz [24]
- Tableau I.17:** Enthalpie de formation h_f^0 , fonction de Gibbs de formation g_f^0 et entropie S^0 à $P = 1$ [atm], $T = 298.15$ [K] des trois espèces (H_2 , O_2 , H_2O) [14].
- Tableau I.18:** Coefficients a_i de la chaleur spécifique [28]
- Tableau I.19:** L'enthalpie d' H_2O , H_2 et O_2 à une température entre 700 K et 1500 K
- Tableau I.20:** Expressions de la tension standard $E^\circ(T)$
- Tableau II.1:** Différentes expressions du ' Q_{chim} '
- Tableau II.2:** Différentes expressions du terme source de chaleur et de masse
- Tableau II.3:** Composition et propriétés de l'air et de l'hydrogène [1] et [7]
- Tableau II.4:** Propriétés physiques des parties solides [2] et [5]
- Tableau II.5:** Conductivités électriques [2], [3], [4] et [15]
- Tableau III.1:** Élévation maximale de la température: Source de chaleur chimique exprimée en fonction de l'entropie et de l'enthalpie
- Tableau III.2:** Élévation maximale des températures d'une SOFC_P à AS: $T_{H_2} = T_{air}$
- Tableau III.3:** Élévation maximale des températures d'une SOFC_P à ES: $T_{H_2} = T_{air}$
- Tableau III.4:** Densité de puissance du SOFC_P à AS et ES: $T_{H_2} = T_{air}$
- Tableau III.5:** Élévation maximale des températures d'une SOFC_P à AS: $T_{H_2} \neq T_{air}$
- Tableau III.6:** Densité de puissance d'une SOFC_P à AS: $T_{H_2} \neq T_{air}$

Ce travail vient pour contribuer à nos travaux de recherche¹ sur les piles à combustible. L'objectif est d'étendre l'étude à la totalité de la pile SOFC et de prendre en considération plus de sources de chaleurs. Ces dernières sont dues aux surtensions électriques, aux gaz d'alimentation de la pile SOFC ou au phénomène exothermique lors de la formation de l'eau. Plus d'intérêt est porté à ce dernier type de source de chaleur.

Dans les composants solides; l'électrolyte et les interconnexions ou poreux; les électrodes de la pile SOFC, on distingue cinq types de sources de chaleur dont leurs origines sont comme suit: La haute température avec laquelle la pile SOFC fonctionne est dont une grande partie d'origine les gaz préchauffés (carburant et comburant). C'est la source de chaleur principale pour la pile. Lors de son fonctionnement, on distingue d'autre type de source de chaleur dont les phénomènes électriques et thermodynamiques sont la cause. Dans le cas électrique, il y a naissance de trois types de surtensions électriques; surtension Ohmique, surtension de concentration et surtension d'activation. Ces dernières jouent le rôle de sources de chaleur. Thermodynamiquement, la pile SOFC est aussi le siège d'une réaction chimique responsable de la production de l'électricité, de l'eau et de la chaleur. Cette dernière est le cinquième type de source de chaleur dans SOFC.

L'objectif de ce présent travail est de visualiser le champ de température et la localisation des hautes températures dans les composants solides ou poreux de la pile sous l'effet de ces cinq types de source de chaleur: source de chaleur due aux températures des gaz, trois autres sources dues aux surtensions électriques et un dernier type de source de chaleur due à la réaction chimique. Les paramètres étudiés sont la configuration géométrique; anode supportée AS ou électrolyte supporté ES ainsi que les valeurs des températures des gaz TH_2/air (mêmes ou différentes valeurs pour les deux températures). Plus d'intérêt est porté à l'expression de la source de chaleur de type chimique où un choix suite à une étude comparative des différentes expressions de l'enthalpie et de l'entropie. Ces différents modèles mathématiques de cette

¹ Hocine Ben Moussa, Bariza Zitouni, Kafia Oulmi, Bouziane Mahmah, Maiouf Belhamel and Philippe Mandin. Hydrogen consumption and power density in a co-flow planar SOFC. *Int. Journal of Hydrogen Energy*, Vol. 34 issue 11 (2009) 5021-5030

Bariza Zitouni, Hocine Ben Moussa, Kafia Oulmi, Slimane Saighi and Khaled Chetehouna. Temperature field, H_2 and H_2O mass transfer in SOFC single cell: Electrode and electrolyte thickness effects. *Int. Journal of Hydrogen Energy*, Vol. 34 issue 11, (2009) 5031-5038

Y. Sahli, et F. Ben Moussa, 'Etude Numérique Bidimensionnelle Stationnaire et Instationnaire des Phénomènes du Transfert de Chaleur Dans Les Piles à Combustible Type SOFC : Effet de Joule', Mémoire d'ingénieur. Département de Mécanique. 2008.

S. Saighi, 'Etude Numérique de l'Effet des Phénomènes de Transport de Chaleur, de masse et de Charge sur la Performance d'une Pile à Combustible du Type planaire', Mémoire de magister. 2008.

B. Zitouni, 'Etude numérique des phénomènes de transfert dans les piles à combustible à oxyde solide de type planaire, Thèse de doctorat. Département de Mécanique. Université de Batne. 2007.

dernière source de chaleur été le résultat d'une étude bibliographique en plus d'une autre portée sur l'équation d'énergie.

Le travail présent comporte trois chapitres. Une étude bibliographique exhaustive est faite sur l'équation d'énergie utilisée pour décrire les phénomènes de transfert de chaleur dans la pile SOFC. Plus d'intérêt est porté à la recherche des différents types de source de chaleur et plus particulièrement la recherche des différentes expressions du terme source de chaleur due à la réaction chimique.

Cette étude bibliographique nous a permis de faire un choix sur un certain modèle mathématique. Ce dernier est un couplage des phénomènes de transport de masse, d'énergie en plus de la loi d'écoulement gouvernée par la loi de Darcy ainsi que la tension de la pile. Notre travail est présenté suivant un modèle mathématique bidimensionnel dans une pile SOFC. La méthode des différences finies est utilisée pour la résolution numériquement. Le champ de température dans chaque élément de la pile (l'interconnexion, la cathode, l'anode et l'électrolyte) a été obtenu en développant un programme informatique (fortran).

Les résultats montrant l'effet des différentes sources de chaleur sur des piles SOFC à anode et à électrolyte supportée. L'effet des températures des gaz de même ou de valeurs différentes est discuté. Plus d'intérêt sont porté à la source due à la formation de l'eau dans la pile. Cette étude numérique nous a permis de discuter la performance de la pile dans chaque cas.

La synthèse bibliographique effectuée, le type de modèle mathématique choisi, la méthode numérique utilisée et les résultats trouvés nous mène à une conclusion générale.

Mots clés: SOFC, Température, Source de Chaleur, Réaction Chimique, Performance, Bidimensionnel, Fortran

Introduction

Les sources de chaleur dans la pile à combustible (PàC) type solide oxyde fuel cell SOFC sont: la source de chaleur due aux surtensions ohmiques, la source de chaleur due aux surtensions d'activation (dus aux réactions électrochimique), la source de chaleur due aux surtensions de concentration et la source de chaleur due aux réactions chimiques.

Le but de ce chapitre est de présenter une synthèse bibliographique concernant le transfert de chaleur dans les piles à combustible type SOFC sous l'effet des différentes sources de chaleur. Cette synthèse est groupée en deux parties. La première partie est dédiée aux différents travaux de recherche en se basant plus sur l'expression du terme « source de chaleur ». La deuxième partie de cet état d'art est consacrée aux expressions des différents types de source de chaleur.

I. Généralité sur la pile SOFC

La technologie SOFC est basée essentiellement sur l'utilisation d'un électrolyte solide et une température élevée. Par rapport aux piles à basse et à moyenne température, elle est plus intéressante par son rendement électrique élevé et l'utilisation de la chaleur produite (cogénération).

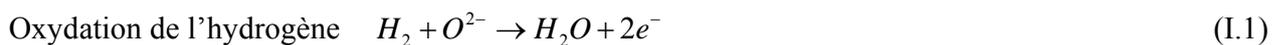
I.1. Principe de fonctionnement

Une cellule SOFC se compose d'une anode, d'un électrolyte, d'une cathode et les interconnexions. L'anode est alimentée en hydrogène ou un en mélange de gaz (carburant) et la cathode est alimentée par l'air (comburant).

Le principe de fonctionnement de la SOFC est basé sur le mécanisme suivant: l'oxygène est dissocié à la cathode en O^{2-} , puis le cation migre à travers l'électrolyte conducteur ionique à haute température et va se combiner à l'anode avec l'hydrogène pour former de l'eau et libérer des électrons qui traversent un circuit électrique externe (**Fig. I.1**).

Les réactions électrochimiques et la réaction globale sont:

Anode:



Cathode:



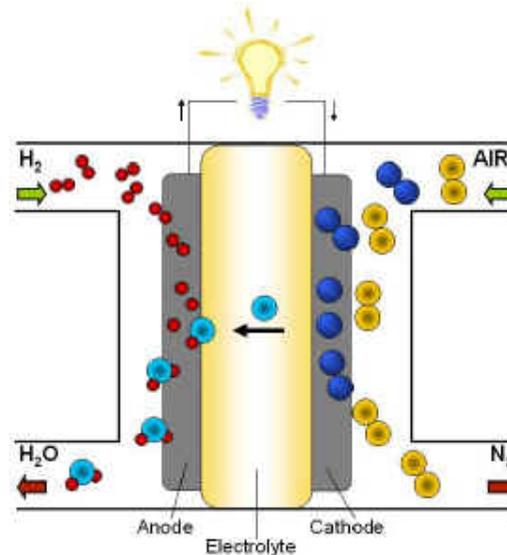
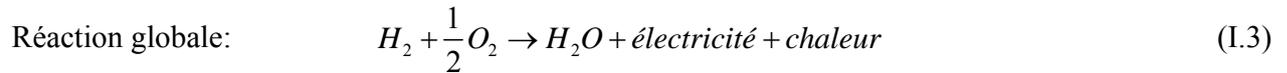


Fig. I.1: Principe de fonctionnement de la pile à combustible SOFC

I.2. Composant d'une cellule SOFC

Electrolyte: C'est un l'électrolyte solide qui caractérise la pile SOFC. Celui-ci doit être un bon conducteur ionique pour les ions O^{2-} et doit avoir de bonnes résistances chimiques et mécaniques. L'électrolyte généralement utilisé est composé de Zircone Yttrée (YSZ).

Anode: Le matériau utilisé dans l'anode de la SOFC est un cermet (mélange de Nickel poreux (Ni) et de YSZ). Il présente une bonne activité catalytique (Ni-YSZ).

Cathode: Les matériaux de la cathode fonctionnent en conditions très oxydantes; air ou oxygène en plus des hautes températures. Le matériau le plus souvent utilisé à la cathode est un manganite de lanthane dopé au strontium (LSM).

Interconnexion: Les interconnexions dans la SOFC doivent jouer le rôle du collecteur de courant et aussi assurer l'étanchéité. En raison de la température élevée de fonctionnement, les interconnexions doivent avoir une bonne résistance en milieux oxydant et réducteur. On utilise en général un métal à base de chrome. Ces quatre composants sont groupés suivant une géométrie; tubulaire, planaire (classique et monolithique) ou Sulzer Hexis.

II. Équation d'énergie et terme source: Étude bibliographique

Dans la référence [1]; **Yixin Lu et al (2005)** sont les seuls auteurs qui ont pris en considération dans leur modèle numérique tridimensionnel le terme source de chaleur englobant quatre type de sources: la source chimique, la source due aux pertes d'activation, la source due aux pertes de concentration et la source ohmique dans une SOFC à tube plat. La variation des champs de température, de concentration et de l'écoulement en fonction du courant est étudiée. Dans le canal cathodique, le fluide se compose de 21% d'oxygène et de 79% d'azote. Dans le canal anodique, le fluide se compose de 90% d'hydrogène et de 10% de vapeur d'eau. Les températures du carburant et de l'air sont 800°C et 600°C respectivement. Pour la modélisation du transfert de chaleur les modes pris sont: la convection et la conduction.

Dans un autre modèle mathématique tridimensionnel simulant le transfert de la chaleur et de la masse (**Qiusheng Wang et al (2009) [2]**), la SOFC planaire (SOFC_P) à anode supportée (les dimensions sont dans le **tableau I.6**) est alimentée par un carburant. Ce dernier est un mélange d'hydrogène H₂, de vapeur H₂O, de monoxyde de carbone CO, de bioxyde de carbone CO₂ et du méthane CH₄. Le contenu de vapeur est 26.3% dans l'H₂, 17.1 % dans le CH₄, 2.9 % dans le CO, 49.3% dans le H₂O, et 4.4 % dans le CO₂. La composition molaire d'air est de 21 % d'oxygène et de 79 % d'azote. La température des deux gaz est de T=1173K. Seulement deux types de source de chaleur; la source due aux surtensions Ohmique est appliquée dans la cathode, l'électrolyte et l'anode et la source due aux réactions chimiques qui englobe la chaleur due aux réactions de reformation et la chaleur due aux réactions de formation (H₂O, CO₂). Pour la modélisation du transfert de chaleur, ils ont pris le mode convectif et le mode conductif avec une conductivité thermique effective. La température, la fraction molaire des espèces, la densité de courant et d'autres paramètres de la performance de la cellule ont été obtenues par un code numérique (Fluent) et une subroutine externe. Les résultats prouvent que la densité de courant produite par des réactions électrochimiques d'oxyde de carbone ne peut pas être ignorée. La perte de la tension cathodique est la plus grande parmi les trois pertes et que la diminution de la tension de fonctionnement mène à l'augmentation des facteurs suivants: la densité de courant, la température des trois parties (anode, électrolyte et cathode), le facteur d'utilisation de carburant, l'efficacité du carburant et de la puissance du SOFC en utilisant les propriétés physiques du **tableau I.1**.

Tableau I.1: Propriétés physiques du SOFC [2]

Composant	ε [%]	κ [$\text{m.Pa}^{-1}.\text{s}^{-1}$]	C_p [$\text{Kj.Kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$]	λ [$\text{W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$]	P [Kg.m^{-3}]
Anode	46	$1.7 \cdot 10^{-7}$	0.65	6.2	6200
Cathode	45	$1.7 \cdot 10^{-7}$	0.9	9.6	6000
Electrolyte	/	/	0.3	2.7	5560
interconnexions	/	/	0.8	9.6	7700

Ferguson, J et al [3] ont présenté un modèle mathématique à 3D d'une SOFC pour des distributions locales du potentiel électrique, de la température et de la concentration des espèces chimiques selon la variation de la géométrie de la cellule, des types de matériaux de l'électrolyte et suivant la température dans les canaux. Pour la modélisation du transfert de chaleur, la conduction est prise dans les quatre parties de la pile. Dans les canaux, ils ont pris la convection dans le sens de l'écoulement des gaz. Le terme source de chaleur est la somme de deux sources; ohmique (appliquée dans les quatre parties) et la source de chaleur due à la réaction chimique. Cette dernière comprend la chaleur de la réaction de reformation et la chaleur de la réaction de formation. Les deux fluides sont: l'air (21% de O_2 et 79% de N_2) et le mélange de 26.26% d' H_2 , et de 49.34% H_2O , de 2.94 % de CO , 4.36 % de CO_2 et 17.10% de CH_4 . Les températures du carburant et de l'air sont égales à 1173K.

Chaisantikulwat, C. et al [4] ont présentés 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 de trois sources de chaleur: Source de chaleur due aux surtensions ohmique (appliquée dans la structure solide entière), source de chaleur due aux surtension d'activation (appliquée aux interfaces électrode/électrolyte) et source de chaleur due à la formation de l'eau (appliquée à l'interfaces anode/électrolyte). Le matériau de l'anode, de l'électrolyte et de la cathode est Ni-YSZ, 8YSZ et LSM respectivement. Les interconnexions sont des alliages de métal. Les deux fluides sont l'air et $\text{H}_2\text{-H}_2\text{O-N}_2$ et la température des gaz est de 1023K. 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 les **tableaux I.6 et I.2.**

Tableau I.2: Propriétés physiques du SOFC [4]

Composant	ε [%]	κ [$\text{m.Pa}^{-1}.\text{s}^{-1}$]	C_p [$\text{Kj.Kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$]	λ [$\text{W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$]	ρ [Kg.m^{-3}]
Anode	30	$1.7 \cdot 10^{-7}$	377	11.0	4760
Cathode	30	$1.7 \cdot 10^{-7}$	377	2.37	4640
Electrolyte	/	/	100	2.7	6000
interconnexion	/	/	300	2.2	Comme les électrodes

Sadik Kakac et al [5] ont développés un modèle mathématique pour une PàC 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 de deux sources: source due aux surtension ohmique et source de chaleur due de 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. Les dimensions et les propriétés physiques d'une cellule sont mentionnées dans les **tableaux I.6** et **I.3** respectivement. Dans les canaux et les électrodes, l'équation d'énergie utilisée est la suivante:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \varepsilon c_p T) - \varepsilon \frac{\partial p}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \varepsilon c_p VT) = \nabla \cdot \varepsilon (-\lambda_{eff} \nabla T) + S_T \quad (I.4)$$

Tableau I.3: Propriétés physiques du SOFC [5]

Propriétés physiques	Valeurs
Pression d'entrée à l'anode [Pa]	102.325
Pression d'entrée à la cathode [Pa]	10.1325
Fraction molaire d'H ₂ à l'entrée	0.9
Fraction molaire de H ₂ O à l'entrée (anode)	0.1
Fraction molaire d'O ₂ à l'entrée	0.7
Fraction molaire de H ₂ O à 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]	5.51 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

Avec la conductivité thermique effective λ_{eff} est donnée par deux expressions sont:

$$\lambda_{eff} = -2\lambda_s + \frac{1}{\varepsilon/(2\lambda_s + \lambda_f) + (1-\varepsilon)/3\lambda_s} \quad (I.5)$$

$$\lambda_{eff} = \varepsilon\lambda_f + (1-\varepsilon)\lambda_s \quad (I.6)$$

Dans l'électrolyte et les interconnexions, l'équation d'énergie s'écrit:

$$\nabla \cdot (-\lambda_k \nabla T) + S_T = 0 \quad (k = ele, int) \quad (I.7)$$

Dans le travail de **Xiongwen Zhang et al [6]**, la simulation numérique a été mise en application sur une PàC de type SOFC tubulaire avec un reformeur interne indirect. La source de chaleur prise dans ce cas englobe la source due aux surtensions ohmique, la source due à la réaction chimique et la source due au rayonnement. Les deux fluides sont: le mélange de gaz (21,7% H₂, 31,7% H₂O, 5,7% CO, 22,3% CO₂, 12,3 CH₄ 6,3 N₂) et l'air (21% O₂, 79% N₂) avec une température de 1123 K et 1073 K respectivement. Le processus électrochimique est une réaction exothermique, qui a contribué par 82,7% dans la génération de la chaleur totale. La chaleur ohmique a participé par 17,3% dans la génération de la chaleur totale (**Tableau I.4**). Environ 47,3% de la chaleur produite dans la cellule a été absorbés par la réaction de reformation. L'écoulement d'air a emporté 36,6% de la chaleur produite et le reste 16% a été emporté par l'écoulement de carburant.

Tableau I.4: Chaleur chimique et Ohmique dans la cellule [6]

Type de Chaleur [W]	Anode	Cathode	Electrolyte	Interconnexion	Reformeur
Chaleur chimique	200	0	0	0	-104
Chaleur Ohmique	0.2	16.0	0.6	3.3	0

K.J. Daun et al [7] ont développé un modèle mathématique bidimensionnel pour simuler le transfert de la chaleur dans une cellule SOFC_P à anode supportée. La chaleur générée dans les composants (**Tableau I.5**) est la somme de trois sources de chaleur. La source due aux réactions électrochimique appliquée aux interfaces électrolyte/électrode, la source due aux pertes cathodiques et anodiques et la source due aux surtensions ohmique. Les dimensions d'une cellule sont données dans le **tableau I.6**. Les propriétés physiques de la cellule, de l'air et de l'hydrogène sont listées dans les **tableaux I.7 et I.8**.

Tableau I.5: Chaleur générée dans les composants de la cellule [7]

Composants	Source de chaleur surfacique [W.m ⁻²]
Anode	$Q'_{perte,an} = 600$, $Q'_{chim,an} = -600$
Cathode	$Q'_{perte,cat} = 400$, $Q'_{chim,cat} = -1700$
Electrolyte	$S_{ohm} = 147 \cdot 10^5$ [W.m ⁻³]

Tableau I.6: Dimensions d'une cellule SOFC [2], [4], [5] et [7]

Composant	Dimension [μm]			
	[2]	[4]	[5]	[7]
Anode	$2 \cdot 10^{-6}$	700	$25 \cdot 10^{-3}$	500
Electrolyte	$2 \cdot 10^{-5}$	10	$150 \cdot 10^{-3}$	150
Cathode	$5 \cdot 10^{-5}$	50	$25 \cdot 10^{-3}$	50
Interconnexions	$1.5 \cdot 10^{-5}$	1.5	/	/
Canal	$1.1 \cdot 10^{-6}$	/	/	/
Longueur de la cellule	$2 \cdot 10^{-5}$	19	/	/

Tableau I.7: Propriétés physiques de la cellule [7]

Matériel	ε [%]	λ [$\text{W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$]
Electrolyte (YSZ)	6	2.3
Cathode (LaMnO_3)	40	0.8
Anode (50% Ni-YSZ)	40	3.7

Tableau I.8: Propriétés physiques de l'air et l'hydrogène [7]

Propriété	ρ [$\text{Kg}\cdot\text{m}^{-3}$]	C_p [$\text{Kj}\cdot\text{Kg}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$]	λ [$\text{W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$]	y_{O_2}	y_{H_2}	y_{N_2}	y_{H_2O}
Air	0.399	1.129	0.067	0.225	0	0.755	0
Hydrogène	0.255	1.673	0.080	0	0.85	0.10	0.05

Dans le travail de **M. CHNANI** [8], les sources de chaleur au sien de la pile sont dues principalement à la variation d'entropie de la réaction de formation de l'eau et aux surtensions ohmiques. Les chaleurs dues aux surtensions d'activation et de concentration sont négligées. La chaleur produite dans les couches d'interconnexion est faible. La génération de chaleur est focalisée uniquement dans l'électrolyte et aux interfaces électrolyte/électrode. Les dimensions et les propriétés des matériaux de la cellule sont données dans les **tableaux I.9 et I.10**.

Tableau I.9: Dimensions d'une cellule SOFC [8]

Composants	Dimensions [mm]
Anode	0.5 - 0.6
Electrolyte	0.003 – 0.01
Cathode	0.03 – 0.05
Interconnexion	0.5 -1.5
Canal anodique	0.5
Canal cathodique	0.9

Tableau I.10: Propriétés physiques des matériaux des composants [8]

Propriétés	Anode	Cathode	Electrolyte	interconnexions
ρ [Kg.m ⁻³]	3000 - 4000	2500 - 3500	5500 - 6500	7000 - 8000
C_p [Kj.Kg ⁻¹ .K ⁻¹]	-	-	-	400 - 600
λ [W.m ⁻¹ .K ⁻¹]	5 - 15	0 - 10	1 - 4	15 - 25

Dans le travail de **Masayuki Suzuki et al [11]**, une simulation numérique et une modélisation du transfert de chaleur et de masse dans une SOFC de tube plat à anode supportée sont effectuées. La seule source de chaleur prise en considération est la source de chaleur due aux surtensions Ohmique. Elle est appliquée dans l'électrolyte, les électrodes et les interconnexions. La température et la pression d'entrée des gaz sont 600°C et à 1 [Atm] respectivement. Les propriétés physiques de la cellule étudiée sont données dans le **tableau I.11**. Les modes de transfert de chaleur pris sont la conduction et la convection avec des propriétés physiques effectives. D'où l'équation de chaleur dans les électrodes s'écrit:

$$\frac{\partial \left[\left(\varepsilon (\rho c_p)_f + (1-\varepsilon) (\rho c_p)_s T \right) \right]}{\partial T} + \nabla \cdot \left((\varepsilon \rho c_p)_f \nabla T \right) = \nabla \cdot \left[(\varepsilon \lambda_f + (1-\varepsilon) \lambda_s) \nabla T \right] + S_T \quad (I.8)$$

Tableau I.11: Propriétés physiques de la cellule

Composant	ρ [Kg.m ⁻³]	C_p [Kj.Kg ⁻¹ .K ⁻¹]	λ [W.m ⁻¹ .K ⁻¹]	σ [Ω^{-1} cm ⁻¹]	ε [%]
Electrolyte (YSZ)	-	-	2	$3 \times 10^{-3} \exp(10300/T)$	-
Cathode (LaSrMnO ₃)	5.62×10^3	0.45	11	1.2×10^{-2}	50 ou 60
Anode (Ni-YSZ)	7×10^3	0.45	10	$2.98 \times 10^{-3} \exp(-1392/T)$	-
Interconnexion (La(Mg)CrO ₃)	-	-	6	$5 \times 10^{-1} \exp(693.14/T)$	-

III. Différentes expressions des sources de chaleur

D'après la recherche bibliographique effectuée, les source de chaleur dans une SOFC sont: la source de chaleur due aux surtensions Ohmiques, la source de chaleur due aux surtensions de concentrations, la source de chaleur due aux surtensions d'activation et la source de chaleur due à la

réaction chimique. Ces dernières ont différentes expressions. C'est ce que nous exposons dans ce qui suit.

III.1. Source de chaleur due aux surtensions Ohmiques

III.1.1. Expression et localisation de la source de chaleur

Tous les matériaux (sauf des super conducteurs naturellement) offrent une résistance au mouvement électrique de la charge. D'où naissance de la source de chaleur due aux surtensions Ohmiques dont l'expression est donnée comme suit:

$$S_{ohm} = \frac{\eta_{ohm}}{\delta} . i \quad (I.9)$$

D'après les auteurs des références [4], [1], [2] et [6], la localisation de la source de chaleur du type ohmique est dans la cathode, l'anode et l'électrolyte. Seulement dans l'électrolyte que **S. Kakac** [5] et **K.J. Daun** [7] voient la localisation de ce type de source de chaleur. D'après **M. CHNANI** [8], la source de chaleur est focalisée à l'interface électrolyte/anode, à l'interface électrolyte/ cathode et dans l'électrolyte.

III.1.2. Surtensions Ohmiques

L'expression des Surtensions Ohmiques est la suivante:

$$\eta_{ohm} = \frac{e_j}{\sigma_j} . i \quad \text{avec } j = (\text{éle, an, cat, int}) \quad (I.10)$$

Les conductivités électriques (σ) de chaque composant sont données dans le **tableau I.12**.

III.2. Source de chaleur due aux surtensions d'activation

III.2.1. Expression et localisation de la source de chaleur

Cette source de chaleur est liée à la cinétique des réactions d'oxydoréduction dans les électrodes. Elle est donnée par la relation suivante:

$$S_{act,i} = \frac{\eta_{act,i}}{\delta} . i \quad \text{avec } (i = \text{an, cat}) \quad (I.11)$$

Yixin Lu [1] et **Yunzhen Yang** [24] donnent une source de chaleur globale pour toute la cellule. La source de chaleur due aux surtensions d'activation est liée aux réactions électrochimiques qui ont

lieu aux interface anode/électrolyte et cathode/électrolyte [4]. **S.Kakac** [5] et **M. CHNANI** [8] ont mentionné que la source due aux surtensions d'activation existe mais ils l'ont négligée.

Tableau I.12: Conductivités électriques

Composant de SOFC	σ [$\Omega^{-1} \text{ cm}^{-1}$]	Références
Electrolyte	$\sigma_{ele} = 3.34 \times 10^4 \exp(-10300/T)$	[2], [3], [4] et [15]
Cathode	$\sigma_{cat} = \frac{4.2 \times 10^7}{T} \exp(-1200/T)$	Même références
Anode	$\sigma_{an} = \frac{9.5 \times 10^7}{T} \exp(-1150/T)$	Même références
Interconnexions	$\sigma_{intc} = 4 \times 10^6$	[4]
	$\sigma_{intc} = \frac{9.3 \times 10^5}{T} \exp(-1100/T)$	[3]

III.2.2. Surtensions d'activation

D'après la recherche bibliographique effectuée, les surtensions d'activation ont différentes expressions. A titre d'exemple, les auteurs des références [5], [6], [18] et [19] donnent l'expression suivante:

$$\eta_{act,i} = \frac{2.R.T}{n.F} . \sinh^{-1} \left(\frac{i}{2.i_{0,i}} \right) \quad (I.12)$$

Avec i_0 est la densité de courant d'échange. Ces différentes expressions sont illustrées dans le **tableau I.13**. **P. Aguiar** [25] donnent les expressions des surtensions d'activation en fonction des pressions partielles des deux espèces (H_2 , O_2).

$$\eta_{act,an} = \frac{R.T}{\alpha.n.F} \ln \left(\frac{P_{H_2,car} . i}{P_{H_2,int} . i_{0,an}} \right) \quad (I.13)$$

$$\eta_{act,cat} = \frac{R.T}{\alpha.n.F} \ln \left(\frac{P_{O_2,a} . i}{P_{O_2,int} . i_{0,cat}} \right) \quad (I.14)$$

Avec α est le coefficient de transfert de charge (généralement $\alpha = 0.5$). Les pressions partielles des espèces (H_2 , H_2O , O_2) au niveau des interfaces électrolyte/électrodes sont en fonction des pressions

partielles de ces espèces au niveau des canaux. Ses expressions sont dans le **tableau I.12. A.C. Burt et al** [26] donnent les expressions des surtensions d'activation à l'anode et à la cathode suivantes:

$$\eta_{act,i} = \frac{RT}{\alpha.n.F} \ln \left(\frac{i}{i_{0,i}} \right) \quad (I.15)$$

Dans le travail de **Yixin Lu et al** [1], les surtensions d'activation sont globales pour toute la cellule.

$$\eta_{act} = A \ln \left(\frac{i + i_n}{i_0} \right) \quad (I.16)$$

Les Constantes A, i_n , i_0 , sont donné dans le **tableau I.13**.

Tableau I.13: Expressions de la densité de courant d'échange i_0

Expressions de la densité de courant d'échange i_0 [$A.m^{-2}$]	Références
$i_{0,an} = \gamma_{an} \left(\frac{P_{H_2}}{P_{ref}} \right) \left(\frac{P_{H_2O}}{P_{ref}} \right) . \exp(-E_{an}/RT)$ $i_{0,cat} = \gamma_{cat} \left(\frac{P_{O_2}}{P_{ref}} \right) . \exp(-E_{cat}/RT)$ $\gamma_{an} = 5,5 . 10^8 [A.m^{-2}]$, $\gamma_{cat} = 7 . 10^8 [A.m^{-2}]$ $E_{an} = 100.10^3 [j.mole^{-1}]$, $E_{cat} = 120.10^3 [j.mole^{-1}]$,	[6], [4],[28], [33], [36], [18] et [19]
$i_{0,an} = 1.67 \times 10^8 [A.m^{-2}]$, $i_{0,cat} = 5.51 \times 10^9 [A.m^{-2}]$	[5]
$i_{0,i} = \frac{RT}{n.F} \gamma_i . \exp \left(-\frac{E_i}{RT} \right)$ $\gamma_{an} = 6,54.10^{11} [\Omega.m^{-2}]$, $\gamma_{cat} = 2,35.10^{11} [\Omega.m^{-2}]$ $E_{an} = 140.10^3 [j.mole^{-1}]$, $E_{cat} = 137.10^3 [j.mole^{-1}]$	[25]

III.3. Source de chaleur due aux surtensions de concentration

III.3.1. Expression et localisation de la source de chaleur

La source de chaleur due aux surtensions de concentration est liée à la diffusion des espèces dans les électrodes poreuses. Son expression est la suivante:

$$S_{con,i} = \frac{\eta_{con,i}}{\delta} . i \quad (I.17)$$

Peu d'auteurs ont pris en considération ce type de source de chaleur dans leurs calculs. **Yixin Lu et al** [1] ont exprimé ce type de source de chaleur d'une façon globale pour toute la cellule. **M. CHNANI** [8] a mentionne dans son travail que cette source est négligeable.

III.3.2. Surtensions de concentration

Une revue bibliographique prouve que les surtensions de concentration sont exprimées différemment. Au niveau de l'anode et la cathode, la référence [5] exprime ces surtensions de concentration en fonction de la densité de courant limite. Ces derniers, sont à leurs tours exprimées en fonction des coefficients de diffusion effectives comme suit:

$$\eta_{con,an} = -\frac{R.T}{2.F} \ln \left(1 - \frac{i}{i_{l,an}} \right) + \frac{R.T}{2.F} \ln \left(1 + \frac{P_{H_2,car}}{P_{H_2O,car}} \cdot \frac{i}{i_{l,an}} \right) \quad (I.18)$$

$$\eta_{con,cat} = -\frac{R.T}{4.F} \ln \left(1 - \frac{i}{i_{l,cat}} \right) \quad (I.19)$$

Où la densité de courant limite dans les électrodes 'i_l' est donnée par:

$$i_{l,an} = \frac{2F.P_{H_2,car}.D_{eff,an}}{R.T.e_{an}} \quad (I.20)$$

$$i_{l,cat} = \frac{4F.P_{O_2,a}.D_{eff,cat}}{\left(\left(P - P_{O_2,a} \right) / P \right) R.T.e_{cat}} \quad (I.21)$$

Avec 'P_{H₂,car}' est la pression partielle de l'hydrogène à l'anode, 'P_{H₂O,car}' est la pression partielle de la vapeur d'eau à l'anode et 'P_{O₂,a}' est la pression partielle de l'oxygène à la cathode.' D_{eff,cat}' et 'D_{eff,an}' sont les coefficients de diffusion effectives de la cathode et de l'anode dont les valeur sont: D_{eff,cat} = 3.5×10⁻⁵ [m².s⁻¹] et D_{eff,an} = 7.3×10⁻⁶ [m².s⁻¹]. Les équations (I.22) et (I.23), c'est en fonction donnent des pressions partielles que la référence [25] exprime les surtensions de concentration. Les expressions des pressions partielles sont dans le **tableau I.14**.

$$\eta_{conc,an} = \frac{R.T}{2.F} \ln \left(\frac{P_{H_2O,intf}.P_{H_2,car}}{P_{H_2O,car}.P_{H_2,intf}} \right) \quad (I.22)$$

$$\eta_{conc,cat} = \frac{R.T}{4.F} \ln \left(\frac{P_{O_2,a}}{P_{O_2,intf}} \right) \quad (I.23)$$

Une autre forme pour ce type de surtension [1]. Les Constantes B, i_n et i_l sont données dans le **tableau I.15**.

$$\eta_{conc} = -B \ln \left(1 - \frac{i + i_n}{i_l} \right) \quad (I.24)$$

Tableau I.14: Pressions partielles de (H₂, H₂O, O₂) aux interfaces électrolyte/électrodes [25]

Espèces	Expressions
H ₂	$P_{H_2, \text{int } f} = P_{H_2, \text{car}} - \left(\frac{RT.E_{an}}{2.F.D_{eff, an}} \right) . i$
H ₂ O	$P_{H_2O, \text{int } f} = P_{H_2O, \text{car}} + \left(\frac{RT.E_{an}}{2.F.D_{eff, cat}} \right) . i$
O ₂	$P_{O_2, \text{int } f} = P - (P - P_{O_2, a}) \exp \left(\frac{RT.E_{cat}}{4.F.D_{eff, cat} . P} . i \right)$

Tableau I.15: Constantes suivant [1]

Constantes	Valeurs
A [V]	0.04
B [V]	0.002
i _n [mA.cm ⁻²]	2
i ₀ [mA.cm ⁻²]	0.02
i _l [mA.cm ⁻²]	670

III.4. Source de chaleur due à la réaction chimique

Toute l'énergie fournie par le biais des enthalpies des réactifs peut-elle être convertie en électricité? Évidemment Non ! Dans chaque réaction chimique, une certaine entropie est produite et en raison de cela, une partie de l'énergie entrant ne peut pas être convertie en travail utile « l'électricité » et dissipée en chaleur **Franco Barbir** [27]. Cette source de chaleur dépend de carburant qui alimente la pile. Comme la pile SOFC est alimentée par de l'hydrogène pur ou par un mélange de gaz, dans ce qui suit, une revue des différentes expressions de la source de chaleur due à la réaction chimique dans les deux cas.

III.4.1. Pile alimentée par l'hydrogène

La réaction globale (**Eq: I.3**) est identique à la réaction de la combustion d'hydrogène. La combustion est un processus exothermique qui signifie qu'il y a une énergie libérée dans le processus [27].

III.4.1.1. Expression et localisation de la source de chaleur chimique

La source de chaleur due à la formation d'eau est donnée par la relation suivante:

$$S_{chim} = \frac{Q_{chim}}{2F} \cdot \frac{i}{\delta} \quad (I.25)$$

Avec ' Q_{chim} ' est la chaleur dégagée lors de la réaction chimique. Elle est exprimée soit en fonction de l'entropie (S) ou de l'enthalpie (H). D'après la recherche bibliographique, cette source de chaleur a différentes localisations. **Yixin Lu** [1], **M.CHNANI** [8] et **Pei-Wen Li** [10], l'ont localisée à l'interface anode/électrolyte. Dans d'autres travaux [4] et [7], cette source de chaleur est due aux réactions électrochimiques et elle a lieu à l'interface anode/électrolyte et à l'interface cathode/électrolyte.

III.4.1.2. Différentes expressions de la chaleur chimique

III.4.1.2.1. Chaleur chimique en fonction de l'entropie

Les références [4], [9], [12], [16], [17], [24].et [27] expriment ce type de source de chaleur en fonction de l'entropie et dans l'entropie (S) est en fonction de la température.

$$Q_{chim} = -T \cdot \Delta S_T \quad (I.26)$$

$$s_T = s^0 + \int_{298.15}^T \frac{1}{T} C_p dT \quad (I.27)$$

Donc ΔS_T s'écrit:

$$\Delta S_T = \Delta S^0 + \int_{298.15}^T \frac{\Delta C_{pr}}{T} dT \quad (I.28)$$

La chaleur spécifique ' C_p ' de n'importe quel gaz est en fonction de la température. D'après la recherche bibliographique, elle a deux relations empiriques. Dans le travail de **Y. Yunzhen et al** [24], la relation utilisée est la suivante:

$$C_p = a + b \cdot 10^3 T + c \cdot 10^6 T^2 \quad (I.29)$$

Ou a, b, c, sont des constantes empiriques, différents pour chaque gaz comme montré dans le **tableau I.16**. On substituant l'équation (I.29) dans l'équation (I.28) on obtient:

$$\Delta S_T = \Delta S^0 + \Delta a \ln\left(\frac{T}{298.15}\right) + \Delta b (T - 298.15) + \Delta c \frac{(T^2 - 298.15^2)}{2} \quad (I.30)$$

Des données du **tableau I.17**, on a: $\Delta S^0 = -44.365 [Kj / Kmole.K]$. Δa , Δb et Δc sont des différences entre les coefficients (a, b, et c) des produits et des réactifs et sont:

$$\Delta a = a_{H_2O} - a_{H_2} - \frac{1}{2} a_{O_2} \quad (I.31)$$

$$\Delta b = b_{H_2O} - b_{H_2} - \frac{1}{2} b_{O_2} \quad (I.32)$$

$$\Delta c = c_{H_2O} - c_{H_2} - \frac{1}{2} c_{O_2} \quad (I.33)$$

Tableau I.16: Coefficients des chaleurs spécifiques des gaz [24]

Gaz	a	b	c
H ₂	25.8911	-0.8373	2.0138
O ₂	29.0856	12.9874	-3.8644
H ₂ O	30.3794	9.6212	1.1848

Tableau I.17: Enthalpie de formation h_f^0 , fonction de Gibbs de formation g_f^0 et entropie S^0 à P = 1 [atm], T = 298.15 [K] des trois espèces (H₂, O₂, H₂O) [14].

Gaz	h_f^0 [Kj.Kmole ⁻¹]	g_f^0 [Kj.Kmole ⁻¹]	S^0 [Kj.Kmole ⁻¹ .K ⁻¹]
H ₂ (g)	0	0	130.57
O ₂ (g)	0	0	205.03
H ₂ O(g)	-241.820	-228.590	188.72
H ₂ O(l)	-285.830	-237.180	69.95

Yixin Lu et al [28] expriment la chaleur spécifique par une relation empirique. Les coefficients a_i sont présentés dans le **tableau I.18**.

$$C_p = \sum a_i \left(\frac{T}{1000} \right)^i, \quad (i = 0, 6) \quad (I.34)$$

K.J. Daun et al [7] ont donné la chaleur chimique en fonction de l'entropie des réactions électrochimiques.

Tableau I.18: Coefficients a_i de la chaleur spécifique [28]

Gaz	a_0	a_1	a_2	a_3	a_4	a_5	a_6
O_2	34.85	-57.975	203.68	-300.37	231.72	-91.821	14.776
H_2	21.157	56.036	-150.55	199.29	-136.15	46.903	-6.4725
H_2O	37.373	41.205	146.05	-217.08	181.54	-79.409	14.015

Pour la cathode

$$Q_{chim,cat} = T\Delta S_{cat} = T(2S_{O_2} - S_{O_2} - 4S_{e^-}) \quad (I.35)$$

Pour l'anode

$$Q_{chim,an} = T\Delta S_{an} = T(2S_{H_2O} - 2S_{H_2} - 2S_{O_2} - 4S_{e^-}) \quad (I.36)$$

Comme les S_x ($X = O^{2-}, O_2, H_2O, H_2, e^-$) sont généralement inconnues, une valeur expérimentale pour la variation d'entropie à la cathode est prise et la variation d'entropie à l'anode est calculé par la relation : $\Delta S_a = \Delta S_{tot} - \Delta S_c$, avec ΔS_{tot} est la variation d'entropie de la réaction globale. (ΔS_{tot} est calculé en assumant tous les produits et les réactifs à 1000 K et les pression partielles de O_2 , H_2 et H_2O sont égales à 0.21, 0.75, 0.25 [atm] respectivement). Dans ce cas, la source de chaleur appliquée aux interfaces électrolyte/électrodes est due aux réactions électrochimiques.

$$S_{chim,i} = \frac{Q_{chim,i}}{2.F} \cdot \frac{i}{\delta} \quad (I.37)$$

III.4.1.2.2. Chaleur chimique en fonction de l'enthalpie et l'énergie libre de Gibbs

La partie de l'enthalpie de la réaction qui peut être converti en électricité dans une cellule correspond à l'énergie libre de Gibbs et elle est indiquée par l'équation suivante [27]:

$$\Delta G = \Delta H_{f,H_2O} - T\Delta S_T \quad (I.38)$$

Des équations (I.26) et (I.38), l'énergie libre de Gibbs s'écrit:

$$\Delta G = \Delta H_{f,H_2O} + Q_{chim} \quad (I.39)$$

De l'équation (I.39), la chaleur chimique s'écrit:

$$Q_{chim} = -\Delta H_{f,H_2O} + \Delta G \quad (I.40)$$

Les auteurs des références [1], [10] et [23] ont utilisé l'équation (I.34) qui est en fonction de l'enthalpie et la variation de l'énergie libre.

Comme mentionné précédemment, l'énergie électrique maximale (théorique) générée dans la cellule correspond à la variation de l'énergie libre de Gibbs.

$$W_{el} = -\Delta G \quad (I.41)$$

En général, le travail électrique théorique est le produit du potentiel idéal et de la charge [27].

$$W_{el} = qE_{idéal} \quad (I.42)$$

$$q = nN_{avg}q_{el} \quad (I.43)$$

Avec 'n' est le nombre des électrons par molécule (pour l' H_2 $n = 2$), ' N_{Avg} ' est le nombre de molécules par moles (nombre d'Avogadro: $N_{avg} = 6.022 \times 10^{23} [molécules.mole^{-1}]$) et ' q_{el} ' est la charge d'un électron ($q_{el} = 1.602 \times 10^{-19} [coulombs.électron^{-1}]$). Le produit de nombre d'Avogadro et la charge d'un électron donne la constante de Fraday. D'où le travail électrique théorique s'écrit:

$$W_{el} = 2FE_{idéal} \quad (I.44)$$

De l'équation (I.41) et (I.44), l'énergie libre de Gibbs devient:

$$\Delta G = -2FE_{idéal} \quad (I.45)$$

Donc l'équation (I.40) devient

$$Q_{chim} = -\Delta H_{f,H_2O} - 2FE_{idéal} \quad (I.46)$$

La tension utile réelle 'V' donnée par une PàC est différente de la tension théorique ' $E_{idéal}$ ' de la thermodynamique. Donc l'équation (I.46) s'écrit:

$$Q_{chim} = -\Delta H_{f,H_2O} - 2FV \quad (I.47)$$

La tension réelle est donnée par la relation suivante:

$$V = E_{idéal} - pertes = E_{idéal} - (\eta_{ohm} + \eta_{con} + \eta_{act}) \quad (I.48)$$

Comme la chaleur chimique est en fonction de l'enthalpie de formation de l'eau ($\Delta H_{f,H_2O}$) et de la tension de la pile (V). Cette dernière est en fonction de la tension théorique ($E_{idéal}$) et des pertes (η), dans ce qui suit, on donne les différentes expressions de $\Delta H_{f,H_2O}$ et $E_{idéal}$.

A. Différentes expressions de l'enthalpie de formation de l'eau $\Delta H_{f,H_2O}$

D'après la recherche bibliographique, l'enthalpie de formation de l'eau ($\Delta H_{f,H_2O}$) a été exprimé différemment. M. CHNANI [8] et Qiusheng Wang [2] ont exprimé respectivement celle-

ci comme une fonction linéaire ou polynomiale de température (**Eq: I.49, I.50**). La relation (**I.51**) donne l'enthalpie en fonction des enthalpies des produits et des réactifs [32]. Avec H_{H_2O} , H_{H_2} et H_{O_2} sont les enthalpies des trois espèces H_2O , H_2 et O_2 respectivement et sont données par des approximations **tableau I.18**. En plus de la température, Lijin Wang **et al** [23], expriment cette énergie en fonction de la densité de courant (**Eq: I.52**). Frano Barbir [27], en exprimant l'enthalpie de formation de l'eau dans les pile à combustible suivant une forme intégrale (**Eq: I.53**), il trouve l'expression (**I.54**) où les ' C_p ' sont exprimés suivant des formes polynomiales donnée par l'équation (**I.29**).

$$\Delta H_{f,H_2O} = -(240506 + 7.3835T) \quad (\text{I.49})$$

$$\Delta H_{f,H_2O} = -238.376 - 0.0124T + 3.036 \times 10^{-6}T^2 \quad (\text{I.50})$$

$$\Delta H_{f,H_2O} = H_{H_2O} - (H_{H_2} + 0.5H_{O_2}) \quad (\text{I.51})$$

Les enthalpies des trois espèces (H_2O , H_2 et O_2) sont données par des approximations **tableau I.19**

$$\Delta H_{f,H_2O} = \Delta H_{f,H_2O}^0 + 4097.22 + \frac{i}{2F} \left(-1.5985T + 0.38 \times 10^{-3}T^2 - \frac{0.1515 \times 10^5}{T} \right) \quad (\text{I.52})$$

$$h_T = h^0 + \int_{298.15}^T C_p dT \quad (\text{I.53})$$

$$\Delta H_{f,H_2O} = \Delta H_{298.15} + \Delta a(T - 298.15) + \Delta b \frac{(T^2 - 298.15^2)}{2} + \Delta c \frac{(T^3 - 298.15^3)}{3} \quad (\text{I.54})$$

Les coefficients Δa , Δb et Δc sont données par les équations **I.31**, **I.32** et **I.33**

Tableau I.19: L'enthalpie d' H_2O , H_2 et O_2 à une température entre 700 K et 1500 K

Espèces	Enthalpie de formation [J.mole ⁻¹]
H_2O	$H_{H_2O} = -25.790 \times 104 + 42.47T$
H_2	$H_{H_2} = 0.9959 \times 104 + 30.73T$
O_2	$H_{O_2} = -1.2290 \times 104 + 35.12T$

B. Différentes expressions de la tension idéale $E_{idéal}$.

Le potentiel idéal ' $E_{idéal}$ ' est donné par l'équation de Nernst. Il est en fonction de température et les pressions partielles des trois espèces (H_2O , H_2 et O_2).

$$E_{idéal}(T) = E^0 - \frac{RT}{2F} \ln \left(\frac{P_{H_2O}}{P_{H_2} P_{O_2}^{0.5}} \right) \quad (I.55)$$

Et comme la PàC emploie de l'air au lieu de l'oxygène pur, les pressions partielles des trois espèces (H_2O , H_2 et O_2) sont proportionnelles aux concentrations et par conséquent le potentiel idéal peut exprimer en fonction de ses dernières.

$$E_{idéal}(T) = E^0(T) - \frac{RT}{n_e F} \ln \left[\frac{X_{H_2O}}{X_{H_2} X_{O_2}^{0.5}} \right] \quad (I.56)$$

Avec E^0 est la tension standard donnée par la relation suivante:

$$E^0 = -\frac{\Delta G^0}{2F} \quad (I.57)$$

Dans le cas où l'eau produite est sous forme gaz, E^0 prend la valeur de 1.18 [V].

D'autres travaux ont données l'expression de la tension standard E^0 comme une fonction linéaire de température; $E^0(T)$ **tableau I.19**.

Tableau I.20: Expressions de la tension standard $E^0(T)$

$E^0(T)$	Références
$E^0(T) = 1.2723 - 2.7645 \times 10^{-4} T$	[8] et [20]
$E^0(T) = 1.253 - 2.4516 \times 10^{-4} T$	[21]
$E^0(T) = 1.26485 - 2.4725 \times 10^{-4} T - 1.875 \times 10^{-8} T^2$	[22]

Autre expression de la chaleur chimique

- **David L. et al** [16] ont exprimé la chaleur chimique par l'expression suivante:

$$Q_{chim} = -T^0 \Delta S^0 + nF (E^0 - E_{ideal}) + (\Delta H_{f, H_2O}^0 - \Delta H_{f, H_2O}) \quad (I.58)$$

C'est la différence entre l'énergie libre de Gibbs standard ' ΔG^0 ' (**I.59**) et l'énergie libre de Gibbs à une température et pression de fonctionnement différentes (**I.60**).

Où

$$\Delta G^0 = \Delta H_{f,H_2O}^0 - T^0 \Delta S^0 = 2FE^0 \quad (\text{I.59})$$

Et

$$\Delta G = \Delta H_{f,H_2O} - T \Delta S = 2FE_{idéal} \quad (\text{I.60})$$

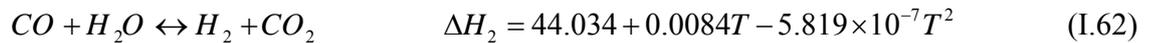
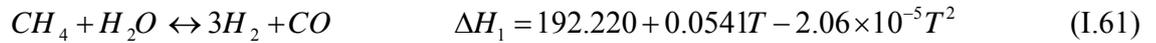
III.4.2. Pile alimentée par un mélange de gaz

Selon la bibliographie consultée, on a trouvé deux articles qui ont travaillé sur une pile alimentée en mélange de gaz. Dans le cas où la pile est alimentée en mélange de gaz, la source chimique comprend la chaleur due aux réactions de reformation ($S_{chim,ref}$) et la chaleur due aux réactions électrochimiques ' $S_{chim,e}$ '.

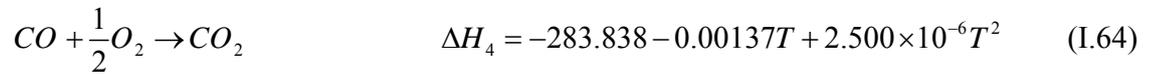
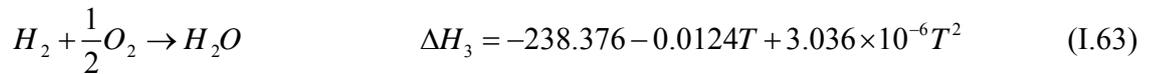
Dans les travaux de **Qiusheng W. et al** [2], le carburant est un mélange d'hydrogène H_2 , de vapeur H_2O , de monoxyde de carbone CO , de bioxyde de carbone CO_2 et de méthane CH_4 . On a les réactions suivantes:

Réactions électrochimiques et de reformation

1. Les réactions de reformation dans l'anode sont:



2. Les réactions électrochimiques globales sont ainsi décrites comme suit:



avec $\Delta H_1, \Delta H_2, \Delta H_3$ et ΔH_4 sont les enthalpies d'échange des réactions qui sont en fonction de la température. La réaction de reformation de vapeur décrite par la relation **(I.61)** est fortement endothermique et la réaction décrite par la relation **(I.62)** est faiblement exothermique et les deux réactions électrochimiques **(I.63)** et **(I.64)** sont exothermiques.

Source de chaleur chimique:**Source de chaleur due aux réactions de reformation**

$$S_{chim,ref} = -R_1\Delta H_1 - R_2\Delta H_2 \quad (I.65)$$

Avec R est le taux de la réaction en [mole.m⁻³ s⁻¹] et donné par la relation suivante:

$$R_1 = k_1^+ p_{CH_4} p_{H_2O} - k_1^- p_{CO} (p_{H_2})^3 \quad (I.66)$$

$$R_2 = k_2^+ p_{CO} p_{H_2O} - k_2^- p_{CO_2} p_{H_2} \quad (I.67)$$

((+): amont et (-): aval)

Avec k est la constante du taux de réaction en [mole.m⁻³ Pa⁻² s⁻¹] et P est la pression partielle des espèces. Les expressions des coefficients K_1^+ et K_2^+ sont:

$$K_1^+ = 2169 \exp(-225103/RT) \quad (I.68)$$

$$K_2^+ = 0.0183 \exp(-103842/RT) \quad (I.69)$$

Les coefficients ' K_1^- ' et ' K_2^- ' sont déterminé en basant sur les constantes d'équilibre suivantes K_e pour les deux réactions.

$$K_{e1} = \frac{k_1^+}{k_1^-} \quad (I.70)$$

$$K_{e2} = \frac{k_2^+}{k_2^-} \quad (I.71)$$

Et les constants d'équilibre (K_{e1} et K_{e2}) peuvent être calculer à partir des équations empiriques suivantes.

$$: \quad K_{e1} = 1.0267 \times 10^{10} \exp(-0.2513Z^4 + 0.3665Z^3 + 0.5810Z^2 - 27.134Z + 3.2770) \quad (I.72)$$

$$K_{e2} = \exp(-0.2935Z^3 + 0.6351Z^2 + 4.1788Z + 0.3169) \quad (I.73)$$

$$Z = \frac{1000}{T} - 1 \quad (I.74)$$

Source de chaleur due aux réactions électrochimiques

$$S_{chim,e} = \left(\frac{-\Delta H_3}{2F} - V \right) \times i_{hyd-ox} + \left(\frac{-\Delta h_4}{2F} - V \right) \times i_{co-ox} \quad (I.75)$$

$$V = E_{hyd-ox} - (\eta_{hyd} + \eta_{oxd}) = E_{co-ox} - (\eta_{co} + \eta_{oxd}) \quad (I.76)$$

Avec 'hyd-oxy': réaction d'oxydation de l' H_2 et 'co-oxy': réaction d'oxydation de CO.

Les tensions idéales (les forces électromotrices) sont données par l'équation de Nernst:

$$E_{hyd-oxy} = E_{hyd-oxy}^0 + \frac{RT}{2F} \ln \left(p_{H_2} \left(p_{O_2} / 100000 \right)^{0.5} / p_{H_2O} \right) \quad (I.77)$$

$$E_{co-oxy} = E_{co-oxy}^0 + \frac{RT}{2F} \ln \left(p_{CO} \left(p_{O_2} / 100000 \right)^{0.5} / p_{CO_2} \right) \quad (I.78)$$

Les tensions idéales standard sont données en fonction de la température:

$$E_{hyd-oxy}^0 = \frac{-\Delta G_{hyd-oxy}^0}{2F} = 1.271 - 2.731 \times 10^{-4} T \quad (I.79)$$

$$E_{co-oxy}^0 = \frac{-\Delta G_{co-oxy}^0}{2F} = 1.474 - 4.679 \times 10^{-4} T \quad (I.80)$$

Les pertes anodiques ' η_{hyd} ' et ' η_{co} ' et les pertes cathodique ' η_{oxy} ' sont:

$$\eta_{hyd} = \left(\frac{2F}{RT} k_{hyd} \left(p_{H_2} / p_{car} \right)^{0.25} \exp(-A_{an}/RT) \right)^{-1} i_{hyd-oxy} \quad (I.81)$$

$$\eta_{co} = \left(\frac{2F}{RT} k_{co} \left(p_{CO} / p_{car} \right)^{0.25} \exp(-E_{an}/RT) \right)^{-1} i_{co-oxy} \quad (I.82)$$

$$\eta_{oxy} = \left(\frac{4F}{RT} k_{oxy} \left(p_{O_2} / p_{air} \right)^{0.25} \exp(-E_{cat}/RT) \right)^{-1} (i_{hyd-oxy} + i_{co-oxy}) \quad (I.83)$$

Avec ' $i_{hyd-oxy}$ ' et ' i_{co-oxy} ' sont les densités de courant électrique locales produites par les réactions d'oxydation (I.14) et (I.15) respectivement. ' k_{oxy} ', ' k_{co} ' et ' k_{hyd} ' sont les coefficients du courant électrique donné comme suit: $k_{hyd} = 2.13 \times 10^8 [A.m^{-2}]$ et $k_{co} = 2.98 \times 10^8 [A.m^{-2}]$. L'énergie d'activation anodique et cathodique sont: $E_a = 1.1 \times 10^5 [J.mole^{-1}]$ et $E_c = 1.6 \times 10^5 [J.mole^{-1}]$.

Dans les travaux de **Xiongwen Z. et al** [6], la composition molaire de carburant est 21,7% H_2 , 31,7% H_2O , 5,7% CO, 22,3% CO_2 , 12,3 CH_4 et 6,3 N_2 .

Source de chaleur chimique: est donnée par la relation suivante:

$$S_{chim} = (r^+ - r^-) \Delta H_2 + r_1 \Delta H_1 + \Delta H_e A_{CV} |\vec{i} \cdot \vec{n}| / 2F \quad (I.84)$$

Avec ΔH_e est l'enthalpie des réactions électrochimiques, A_{CV} est la surface spécifique du volume de contrôle et (r) est le taux volumétrique de réaction donnée par:

$$r^+ = k_1 p_{CO} p_{H_2O} \quad (I.85)$$

$$r^- = k_1 k_{shift} p_{CO_2} p_{H_2} \quad (I.86)$$

$$r_1 = k_0 \times p_{CH_4} \times f_e \times \exp\left(\frac{-\Delta E}{RT}\right) \quad (I.87)$$

Avec:

f_e : Facteur d'équilibre de la réaction de reformation ($f_e = 1$).

k_0 : Paramètre constant pour le taux de réaction de reformation [$\text{mol s}^{-1} \text{m}^{-2} \text{p}^{-1}$]

k_1 : Paramètre constant pour le taux de réaction shift est : $k_1 = 1.2 \times 10^4 [\text{mole.m}^{-3}.\text{s}^{-1}]$

K_{shift} : Constante d'équilibre est exprimée comme suit: $K_{shift} = \exp\left(\frac{-\Delta G(T)}{RT}\right)$

VIII. Organigrammes

VIII.I. Organigramme du programme principal

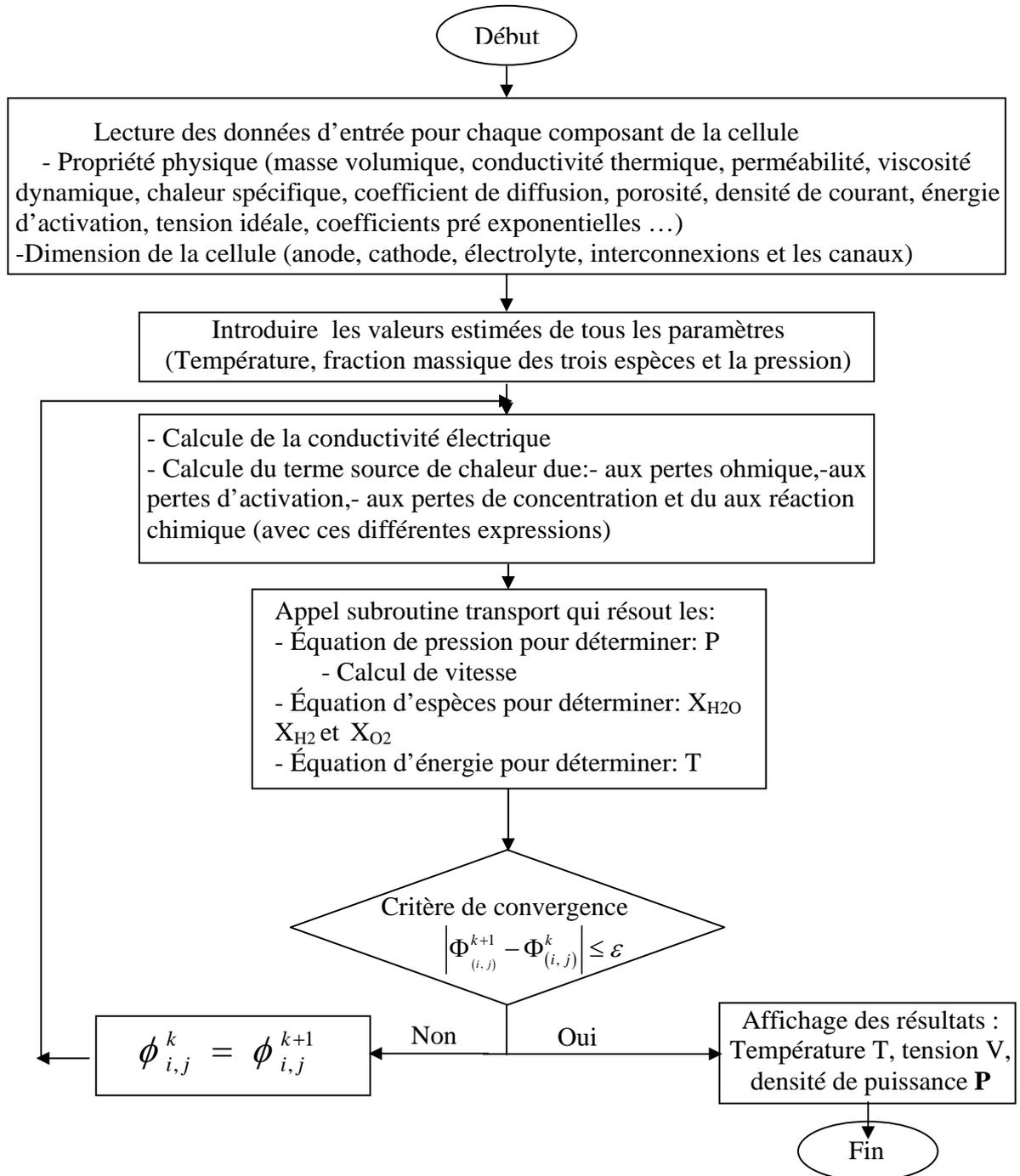
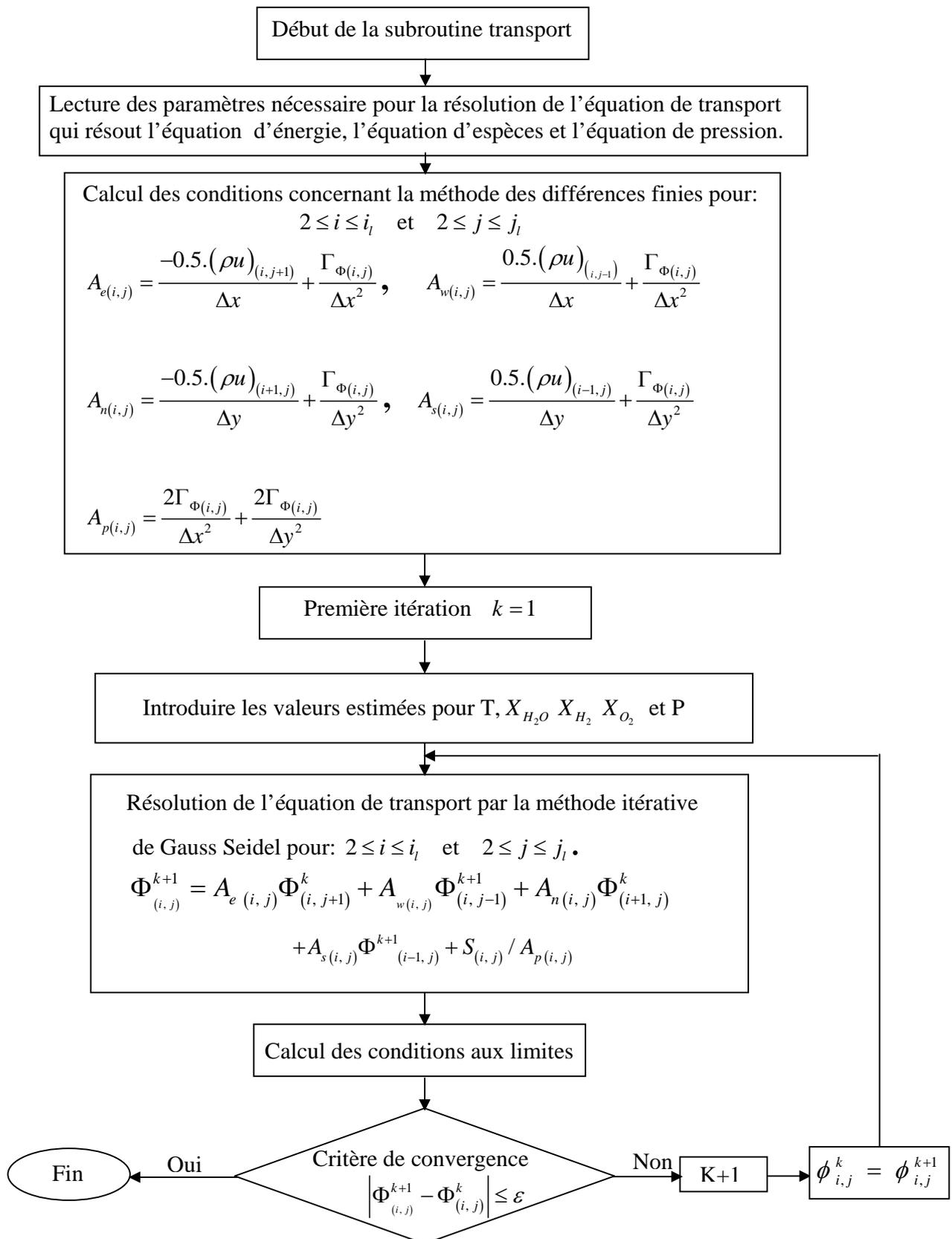


Fig. II.4: Organigramme du programme

VIII.2. Organigramme de la subroutine transport



Introduction

L'objectif visé de ce travail est l'étude numérique bidimensionnelle des champs thermiques tout en quantifiant la performance dans une pile SOFC_P. L'étude bibliographique nous a permis de faire un choix du modèle physique et mathématique régissant le phénomène de transfert thermique et massique dans les différentes parties d'une PàC SOFC_P (interconnexion cathodique, cathode, électrolyte, anode et interconnexion anodique). Le modèle mathématique porte plus d'intérêt aux différents types de source de chaleur; source de chaleur due au perte ohmique, source de chaleur due au perte d'activation, source de chaleur due au perte de concentration et source de chaleur due aux réactions chimiques ainsi qu'aux dimensions des électrodes et de l'électrolyte. A la fin de ce chapitre, on expose la procédure de simulation numérique retenue pour la résolution de ces équations gouvernantes.

I. Modèle physique

Le Modèle physique étudié est représenté dans les **figures (II.1) et (II.2)**.

II. Modèle mathématique

II.1. Équations gouvernantes

Notre modèle de calcul est un couplage d'équations de conservation (masse et d'énergie) pour le calcul du champ thermique et celle du calcul de la performance de la pile.

Le champ thermique dans une PàC du type SOFC_P est régi par les équations de base, telles que l'équation de conservation de masse, de conservation d'espèces et de conservation d'énergie. Pour la quantité de mouvement, dans les électrodes poreuses, l'écoulement est modélisé par la loi de Darcy.

Équation de continuité

$$\text{div}(\varepsilon\rho U) = 0 \quad (\text{II.1})$$

Équation de conservation d'espèces

$$\text{div}(\varepsilon\rho UX_i) = \text{div}(\rho D_{\text{eff}} \text{grad}(X_i)) + S_{X_i} \quad (\text{II.2})$$

Équation de conservation d'énergie

$$\text{div}(\varepsilon\rho C_p UT) = \text{div}(\lambda_{\text{eff}} \text{grad}(T)) + S_T \quad (\text{II.3})$$

Loi de Darcy

$$U = -\frac{\kappa}{\varepsilon \cdot \mu} \text{grad}(p) \quad (\text{II.4})$$

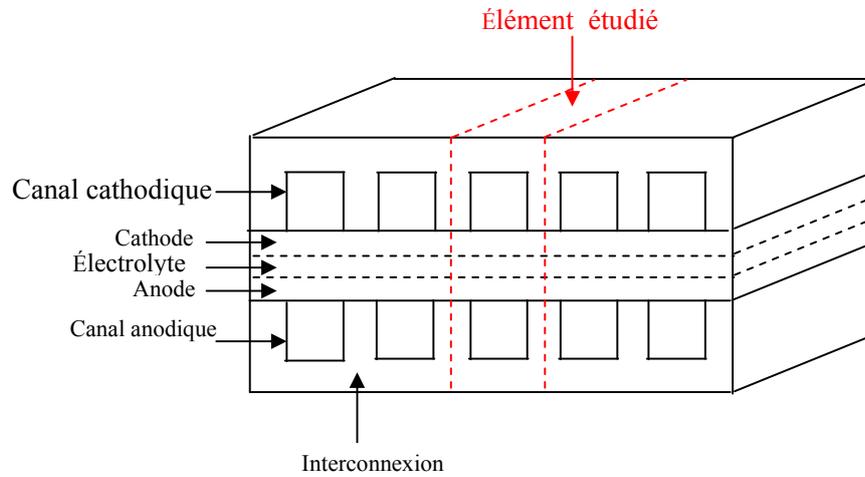


Fig. II.1 Schéma d'une cellule SOFC planaire

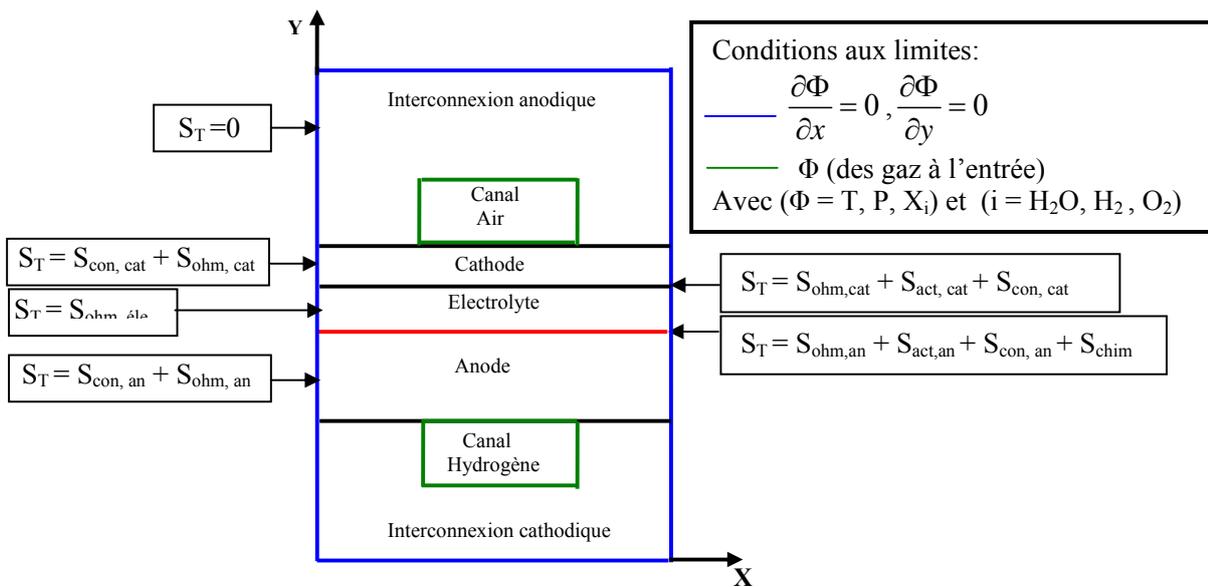


Fig. II.2: Modèle physique et conditions aux limites

La performance de la pile est donnée par la tension et la densité de puissance. Ces dernières sont en fonction de la densité de courant:

$$P = V.i \tag{II.5}$$

Équation de la tension de la pile:

$$V = E_{idéal} - pertes = E_{idéal} - (\eta_{ohm} + \eta_{con} + \eta_{act}) \quad (II.6)$$

Et la tension idéale est donnée par la relation suivante:

$$E_{idéal}(T) = E^0(T) - \frac{RT}{n_e F} \ln \left[\frac{X_{H_2O}}{X_{H_2} X_{O_2}^{0.5}} \right] \quad (II.7)$$

II.2. Hypothèses simplificatrices

Les hypothèses simplificatrices retenues dans notre étude sont les suivantes:

- Modèle de calcul est bidimensionnel et stationnaire.
- l'air et hydrogène sont considérés incompressible.
- Négligence du mode de transfert due au rayonnement.

III. Équations gouvernantes et terme source dans les différents composants de la cellule

III.1. Interconnexions

Le matériau utilisé pour les interconnexions est imperméable et employé pour rassembler le courant donc le transfert de chaleur dans les interconnexions se fait par conduction et on suppose que le terme source de chaleur est nul d'où l'équation d'énergie se réduit et s'écrit:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda_{int,k} \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\lambda_{int,k} \frac{\partial T}{\partial y} \right) = 0 \quad (II.8)$$

Avec $k = (int_an, int_cat)$

III.2. Électrode

Les électrodes sont poreuses, permettant ainsi le transport de la masse des espèces des gaz (H_2 , O_2) aux sites des réactions (interfaces électrodes/électrolyte) et le transfert de chaleur par diffusion et convection. Donc les équations de conservation d'énergie et des espèces s'écrivent:

III.2.1. Cathode

III.2.1.1. Équation d'énergie

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\varepsilon_{cat} (\rho c_p u)_{air} \cdot T \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\varepsilon_{cat} (\rho c_p v)_{air} \cdot T \right) = \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda_{eff,cat} \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\lambda_{eff,cat} \frac{\partial T}{\partial y} \right) + S_{T,cat} \quad (II.9)$$

La source d'énergie dans la cathode est la somme de deux sources; la source de chaleur due aux pertes ohmiques et la source de chaleur due aux pertes de concentration, ses expressions sont:

$$S_{ohm,cat} = \frac{i^2}{\sigma_{cat}} \quad (II.10)$$

$$S_{con,cat} = i\eta_{con,cat} \quad (II.11)$$

Les pertes de concentration cathodique ($\eta_{con,cat}$) sont données par la relation suivante:

$$\eta_{con,cat} = -\frac{RT}{4F} \ln\left(1 - \frac{i}{i_{l,cat}}\right) \quad (II.12)$$

$$i_{l,cat} = \frac{4F \cdot P_{O_2} \cdot D_{cat}}{\left(\frac{P - P_{O_2}}{P}\right) R.T. e_{cat}} \quad (II.13)$$

D'où le terme source de chaleur dans la cathode s'écrit:

$$S_{T,cat} = S_{ohm,cat} + S_{con,cat} \quad (II.14)$$

III.2.1.2. Équation de conservation des espèces

L'équation de conservation d'espèce pour l'oxygène dans la cathode est donnée par la relation suivante:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial x} \left(\varepsilon_{cat} (\rho u)_{air} \cdot X_{O_2} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\varepsilon_{cat} (\rho v)_{air} \cdot X_{O_2} \right) \\ &= \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho_{air} D_{eff,O_2} \cdot \frac{\partial X_{O_2}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\rho_{air} D_{eff,O_2} \cdot \frac{\partial X_{O_2}}{\partial y} \right) + S_{O_2,cat} \end{aligned} \quad (II.15)$$

Le terme source est une consommation de l'oxygène dans la cathode donné par l'expression suivante:

$$S_{O_2,cat} = -\frac{M_{O_2}}{2F} \cdot i \quad (II.16)$$

III.2.2. Anode

III.2.2.1. Équation d'énergie

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\varepsilon_{an} (\rho c_p u)_{H_2} \cdot T \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\varepsilon_{an} (\rho c_p v)_{H_2} \cdot T \right) = \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda_{eff,an} \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\lambda_{eff,an} \frac{\partial T}{\partial y} \right) + S_{T,an} \quad (II.17)$$

La source de chaleur dans l'anode est la somme de deux sources qui sont:

La source due aux pertes ohmique est la suivante:

$$S_{ohm,an} = \frac{i^2}{\sigma_{an}} \quad (\text{II.18})$$

La source due aux pertes de concentration est:

$$S_{con,an} = i \cdot \eta_{con,an} \quad (\text{II.19})$$

Les pertes de concentration anodique sont données par l'expression suivante:

$$\eta_{con,an} = -\frac{RT}{2F} \ln \left(1 - \frac{i}{i_{l,an}} \right) + \frac{RT}{2F} \ln \left(1 + \frac{P_{H_2,an}}{P_{H_2O,an}} \times \frac{i}{i_{l,an}} \right) \quad (\text{II.20})$$

$$i_{l,an} = \frac{2F \cdot P_{H_2} \cdot D_{an}}{RT \cdot e_{an}} \quad (\text{II.21})$$

Donc le terme source de chaleur dans l'anode est:

$$S_{T,an} = S_{ohm,an} + S_{con,an} \quad (\text{II.22})$$

III.2.2.2. Équation de conservation des espèces

L'équation de conservation de la masse d'hydrogène dans l'anode est:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial x} \left(\varepsilon_{an} (\rho u)_{H_2} \cdot X_{H_2} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\varepsilon_{an} (\rho v)_{H_2} \cdot X_{H_2} \right) \\ & = \frac{\partial}{\partial x} \left(\varepsilon_{an} (\rho D)_{H_2} \cdot \frac{\partial X_{H_2}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\varepsilon_{an} (\rho D)_{H_2} \cdot \frac{\partial X_{H_2}}{\partial y} \right) + S_{H_2,an} \end{aligned} \quad (\text{II.23})$$

Le terme source expliquant la consommation de l'hydrogène dans l'anode est exprimé en fonction de la densité de courant:

$$S_{H_2,an} = -\frac{M_{H_2}}{2F} \cdot i \quad (\text{II.24})$$

-

Pour la vapeur d'eau, l'équation de conservation d'espèce d'eau dans l'anode est donnée par la relation suivante:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} \left(\varepsilon_{an} (\rho u)_{H_2} \cdot X_{H_2O} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\varepsilon_{an} (\rho v)_{H_2} \cdot X_{H_2O} \right) = \\ \frac{\partial}{\partial x} \left(\varepsilon_{an} \rho_{H_2} D_{eff, H_2O} \cdot \frac{\partial X_{H_2O}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\varepsilon_{an} \rho_{H_2} D_{eff, H_2O} \cdot \frac{\partial X_{H_2O}}{\partial y} \right) + S_{H_2O, an} \end{aligned} \quad (II.25)$$

La production de la vapeur à l'anode et s'écrit:

$$S_{H_2O, an} = \frac{M_{H_2O}}{2F} \cdot i \quad (II.26)$$

III.3. Interfaces électrodes/électrolyte

Aux interfaces anode/électrolyte ou cathode/électrolyte, l'équation de conservation d'espèce et de conservation d'énergie restent inchangeable. Elles prennent les mêmes formes que celles appliquées dans chaque électrode adjacente à l'interface. A ces interfaces, seulement le terme source de l'équation d'énergie change d'expressions. Dans ce qui suit, l'expression du terme source de chaleur pour chaque interface.

III.3.1. Interface cathode/électrolyte

Les sources d'énergie qui peuvent exister à l'interface cathode/électrolyte d'une PàC SOFC_P sont: la source due aux pertes ohmique, la source due aux pertes de concentration et la source due aux pertes d'activation.

$$S_{ohm, cat} = \frac{i^2}{\sigma_{cat}} \quad (II.27)$$

$$S_{con, cat} = i \cdot \eta_{con, cat} \quad (II.28)$$

$$S_{act, cat} = i \cdot \eta_{act, cat} \quad (II.29)$$

L'expression des pertes de concentration cathodique ($\eta_{con, cat}$) est donnée par la relation (II.9) et l'expression des pertes d'activation cathodique ($\eta_{act, cat}$) est la suivante:

$$\eta_{act, cat} = \frac{R.T}{\alpha.n.F} \ln \left(\frac{i}{2i_{0, cat}} \right) \quad (II.30)$$

$$i_{0, cat} = \gamma_{ca} \left(\frac{R.T}{2.F} \right) \cdot \exp \left(\frac{-E_{ca}}{R.T} \right) \quad (II.31)$$

D'où le terme source de chaleur à l'interface cathode/électrolyte s'écrit:

$$S_T = S_{ohm,cat} + S_{con,cat} + S_{act,cat} \quad (II.32)$$

III.3.2. Interface anode/électrolyte

Les sources d'énergie qui peuvent exister à l'interface anode/électrolyte d'une PàC SOFC_P sont les même qu'à l'interface cathode/électrolyte en plus d'une autre source de chaleur liée à la réaction chimique. C'est la chaleur dégagée lors de la formation de l'eau.

$$S_{ohm,an} = \frac{i^2}{\sigma_{an}} \quad (II.33)$$

$$S_{con,an} = i \cdot \eta_{con,an} \quad (II.34)$$

$$S_{act,an} = i \cdot \eta_{act,an} \quad (II.35)$$

La relation des pertes de concentration anodique ($\eta_{con,an}$) est donnée par l'équation (II.16) et l'expression des pertes d'activation ($\eta_{con,cat}$) est la suivante:

$$\eta_{act,an} = \frac{R.T}{\alpha.n.F} \ln \left(\frac{i}{2i_{0,i}} \right) \quad (II.36)$$

$$i_{0,an} = \gamma_{an} \left(\frac{R.T}{2.F} \right) \cdot \exp \left(\frac{-E_{an}}{R.T} \right) \quad (II.37)$$

$$S_{chim} = \frac{Q_{chim}}{2F} \cdot \frac{i}{\delta} \quad (II.38)$$

D'après la recherche bibliographique, la chaleur due à la réaction chimique ' Q_{chim} ' a sept expressions; deux sont en fonction de l'entropie et cinq sont en fonction de l'enthalpie et en fonction de la tension de la pile. Leurs expressions sont illustrées dans le tableau (II.1).

D'où le terme source de chaleur à l'interface anode /électrolyte s'écrit:

$$S_T = S_{ohm,an} + S_{con,an} + S_{act,an} + S_{chim} \quad (II.39)$$

III.4. Électrolyte

Les SOFC ont un électrolyte solide, conducteur ionique et isolant électronique.

La conduction ionique se fait par diffusion qui est un phénomène activé thermiquement, d'où l'équation d'énergie s'écrit:

$$\left(\lambda_{ele} \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\lambda_{ele} \frac{\partial T}{\partial y} \right) + S_{T,ele} = 0 \quad (\text{II.40})$$

Tableau II.1: Différentes expressions du ‘ Q_{chim} ’

	Différentes expression de Q_{chim}	Références
$Q_{chim} = f(\Delta S)$ $\Delta S_T = \Delta S^0 + \int_{298.15}^T \frac{\Delta C_{pr}}{T} dT$	$C_p = a + b.10^3 T + c.10^6 T^2$ Les constantes (a, b et c) sont dans le tableau I.16	[24]
	$C_p = \sum a_i \left(\frac{T}{1000} \right)^i$ Les constantes ‘ a_i ’ sont dans le tableau I.18 .	[28]
$Q_{chim} = f(\Delta H_{f,H_2O}, V)$	Différentes expression de $\Delta H_{f,H_2O}$	
	$\Delta H_{f,H_2O} = -(240506 + 7.3835T)$	[8]
	$\Delta H_{f,H_2O} = -238.376 - 0.0124T + 3.036 \times 10^{-6} T^2$	[2]
	$\Delta H_{f,H_2O} = H_{H_2O} - (H_{H_2} + 0.5H_{O_2})$ Les H_{H_2O} , H_{H_2} et H_{O_2} sont dans le tableau I.19 .	[32]
	$\Delta H_{f,H_2O} = \Delta H_{f,H_2O}^0 + 4097.22$ $+ \frac{i}{2F} \left(-1.5985T + 0.38 \times 10^{-3} T^2 - \frac{0.1515 \times 10^5}{T} \right)$	[23]
	$\Delta H_{f,H_2O} = \Delta H_{298.15} + \Delta a(T - 298.15)$ $+ \Delta b \frac{(T^2 - 298.15^2)}{2} + \Delta c \frac{(T^3 - 298.15^3)}{3}$ Les coefficients Δa , Δb et Δc sont exprimés par les équations (I.31), (I.32) et (I.33) et les constantes a, b et c sont dans le tableau I.16 .	[27]

La seule source de chaleur qui peut exister dans l'électrolyte d'une PàC SOFC_P est la source ohmique, sa relation est la suivante:

$$S_{T,ele} = S_{ohm,ele} = \frac{i^2}{\sigma_{ele}} \quad (\text{II.41})$$

IV. Conditions aux limites

Le long du contour de la cellule SOFC_P, les conditions aux limites sont des conditions aux limites du type Neumann pour la température (T), les fractions massiques (X) des trois espèces (l'hydrogène, l'oxygène et l'eau) et la pression (p).

Aux quatre parois internes anodique et cathodique, les valeurs de la température, des fractions massiques et la pression sont ceux à l'entrée des gaz **Fig. II.2**.

V. Résolution numérique

L'obtention du champ de température, dans les électrodes poreuses, nécessite un champ de vitesse. L'équation de quantité de mouvement est modélisée par la loi de Darcy. La combinaison entre l'équation de continuité (II.1) et la loi de Darcy (II.2) donne l'équation de pression suivante:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\kappa \cdot \rho}{\mu} \frac{\partial P}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\kappa \cdot \rho}{\mu} \frac{\partial P}{\partial y} \right) = 0 \quad (\text{II.42})$$

Les équations (II.1) (II.2) (II.3) et (II.42) utilisées pour la description des phénomènes de transfert de chaleur et de masse dans les composants de la pile SOFC; anode, cathode, électrolyte interconnexion anodique et interconnexion cathodique peuvent être modélisées par l'équation générale de transport.

$$\underbrace{div(\varepsilon \rho U \Phi)}_{\text{I}} = \underbrace{div(\Gamma_{\Phi} grad \Phi)}_{\text{II}} + S_{\Phi} \quad (\text{II.43})$$

Avec 'Φ' est une variable générale, (I) est le terme convectif, (II) est le terme diffusif, 'Γ_Φ' est le coefficient de diffusion et 'S_Φ' est le terme source.

- Dans le cas de l'équation de continuité: Φ = 1, Γ_Φ = 0 et S_Φ = 0.

- Dans le cas de l'équation d'énergie: Φ = T et Γ_Φ = λ_j avec j = (éle, an, cat, int).

- Pour l'équation de conservation d'espèce: Φ = X_i avec i = (H₂, O₂, H₂O) et Γ_Φ = ρD_(eff, j)

- Pour l'équation de pression: $\Phi = P$, $\Gamma_\Phi = \frac{\kappa \cdot \rho}{\mu}$ avec $j = (\text{an}, \text{éle})$ et $S_\Phi = 0$.

Dans chaque composant de la cellule SOFC_P, le terme source de chaque équation; énergie et espèce a sa propre expression (**Tableau II.2**).

Tableau II.2: Différentes expressions du terme source de chaleur et de masse

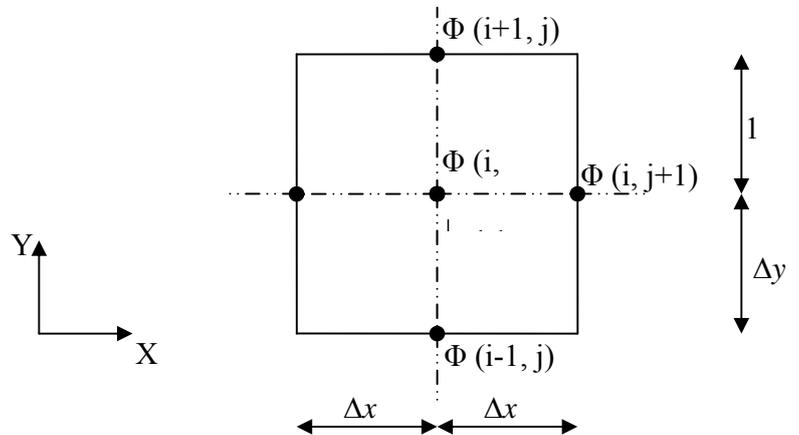
Composants	Terme source S_Φ	
	Équation d'énergie	Équation de conservation des espèces
Anode	$S_{T,an} = S_{ohm,an} + S_{con,an}$	$S_{H_2,an} = -\frac{M_{H_2}}{2F} \cdot i$
Interface A/E	$S_T = S_{ohm,an} + S_{con,an} + S_{act,an} + S_{chim}$	$S_{H_2O,an} = \frac{M_{H_2O}}{2F} \cdot i$
Cathode	$S_{T,cat} = S_{ohm,cat} + S_{con,cat}$	$S_{O_2,cat} = -\frac{M_{O_2}}{2F} \cdot i$
Interface C/E	$S_T = S_{ohm,cat} + S_{con,cat} + S_{act,cat}$	/
Électrolyte	$S_{T,ele} = S_{ohm,ele}$	/
Interconnexions	$S_{T,ele} = 0$	/

V.1. Discrétisation de l'équation de transport

L'équation de transport (II.43) pour 2D s'écrit sous la forme suivante:

$$\frac{\partial(\varepsilon\rho u\Phi)}{\partial x} + \frac{\partial(\varepsilon\rho v\Phi)}{\partial y} = \Gamma_\Phi \left(\frac{\partial^2\Phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\Phi}{\partial y^2} \right) + S_\Phi \quad (\text{II.44})$$

La méthode utilisée pour la discrétisation de l'équation de transport (II.44) est la méthode des différences finies. Celle-ci consiste à remplacer chaque dérivée contenue dans l'équation (II.44) par le rapport des différences.



V.1.1. Discrétisation du terme convectif

Selon l'axe X:

$$\frac{\partial(\varepsilon\rho u\Phi)_{(i,j)}}{\partial x} = \left(\frac{(\varepsilon\rho u\Phi)_{(i,j+1)} - (\varepsilon\rho u\Phi)_{(i,j-1)}}{2\Delta x} \right) \quad (\text{II.45})$$

Selon l'axe:

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

V.1.1. Discrétisation du terme diffusif

Selon l'axe X:

$$\Gamma_{\Phi} \frac{\partial^2 \Phi_{(i,j)}}{\partial x^2} = \Gamma_{\Phi} \left(\frac{\Phi_{(i,j-1)} - 2\Phi_{(i,j)} + \Phi_{(i,j+1)}}{\Delta x^2} \right) \quad (\text{II.47})$$

Selon l'axe Y:

$$\Gamma_{\Phi} \frac{\partial^2 \Phi_{(i,j)}}{\partial y^2} = \Gamma_{\Phi} \left(\frac{\Phi_{(i-1,j)} - 2\Phi_{(i,j)} + \Phi_{(i+1,j)}}{\Delta y^2} \right) \quad (\text{II.48})$$

Remplaçant le terme convectif et le terme diffusif par leurs expressions dans l'équation (II.44) et après un réarrangement on obtient l'équation suivante

$$\Phi_{(i,j)} = A_{e(i,j)}\Phi_{(i,j+1)} + A_{w(i,j)}\Phi_{(i,j-1)} + A_{n(i,j)}\Phi_{(i+1,j)} + A_{s(i,j)}\Phi_{(i-1,j)} + S_{(i,j)} / A_p(i,j) \quad (\text{II.49})$$

Avec les expressions des coefficients $A_{e(i,j)}$, $A_{w(i,j)}$, $A_{n(i,j)}$, $A_{s(i,j)}$ et $A_p(i,j)$ sont:

$$A_{e(i,j)} = \frac{-0.5 \cdot (\rho u)_{(i,j+1)}}{\Delta x} + \frac{\Gamma_{\Phi(i,j)}}{\Delta x^2} \quad (\text{II.50})$$

$$A_{w(i,j)} = \frac{0.5 \cdot (\rho u)_{(i,j-1)}}{\Delta x} + \frac{\Gamma_{\Phi(i,j)}}{\Delta x^2} \quad (\text{II.51})$$

$$A_{n(i,j)} = \frac{-0.5 \cdot (\rho v)_{(i+1,j)}}{\Delta y} + \frac{\Gamma_{\Phi(i,j)}}{\Delta y^2} \quad (\text{II.52})$$

$$A_{s(i,j)} = \frac{0.5 \cdot (\rho u)_{(i-1,j)}}{\Delta y} + \frac{\Gamma_{\Phi(i,j)}}{\Delta y^2} \quad (\text{II.53})$$

$$A_{p(i,j)} = \frac{2\Gamma_{\Phi(i,j)}}{\Delta x^2} + \frac{2\Gamma_{\Phi(i,j)}}{\Delta y^2} \quad (\text{II.54})$$

La résolution de système d'équation (II.49) est faite par la méthode de Gauss Seidel. Cette dernière consiste à estimer une solution ' $\Phi_{(i,j)}^k$ ' dans l'itération 'k' pour calculer ' $\Phi_{(i,j)}^{k+1}$ ' et au lieu d'utiliser les premières (i-1, j) et (i, j-1) composantes de ' Φ^k ', on utilise les (i-1,j) et (i,j-1) composantes de ' Φ^{k+1} '. Donc l'équation (II.49) dans l'itération (k+1) s'écrit:

$$\Phi_{(i,j)}^{k+1} = A_{e(i,j)} \Phi_{(i,j+1)}^k + A_{w(i,j)} \Phi_{(i,j-1)}^{k+1} + A_{n(i,j)} \Phi_{(i+1,j)}^k + A_{s(i,j)} \Phi_{(i-1,j)}^{k+1} + S_{(i,j)} / A_p \quad (\text{II.55})$$

La condition de convergence:

$$\left| \Phi_{(i,j)}^{k+1} - \Phi_{(i,j)}^k \right| \leq \varepsilon \quad (\text{II.56})$$

Si la condition (II.56) n'est pas encore satisfaite, on pose que: $\phi_{i,j}^k = \phi_{i,j}^{k+1}$ et on recalcule la même formule jusqu'à ce qu'elle vérifie la condition de convergence.

VI. Tableaux des données

Les données des propriétés physiques des composants de la cellule, de l'air et de l'hydrogène sont illustrées dans les **tableaux (II.3) à (II.5)**.

Tableau II.3: Composition et propriétés de l'air et de l'hydrogène [1] et [7]

Propriétés	Air	Hydrogène
ρ [Kg.m ⁻³]	0.399	0.255
C_p [J.Kg ⁻¹ .K ⁻¹]	1.129	1.673
μ [Kg.m ⁻¹ .S ⁻¹]	$2.3 \cdot 10^{-5}$	$2.3 \cdot 10^{-5}$
X_{O_2}	0.8	0
X_{H_2}	0	0.9
X_{H_2O}	0.2	0.1
P [bar]	2	2

Tableau II.4: Propriétés physiques des parties solides [2] et [5]

Paramètres	Anode	électrolyte	cathode	interconnexions
ε %	50	/	50	/
D [$\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$]	$3.5 \cdot 10^{-5}$		$7.3 \cdot 10^{-6}$	
κ [m^2]	10^{-12}	/	10^{-12}	/
λ [$\text{W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$]	6.2	2.7	9.6	9.6
ρ [$\text{Kg} \cdot \text{m}^{-3}$]	3030	5160	3310	8030
C_p [$\text{J} \cdot \text{Kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$]	595	606	573	502
γ [$\Omega^{-1} \cdot \text{m}^{-2}$]	$6,54 \cdot 10^{11}$	/	$2,35 \cdot 10^{11}$	/
E [$\text{j} \cdot \text{mole}^{-1}$]	$140 \cdot 10^3$	/	$E_{\text{cat}} = 137 \cdot 10^3$	/
e [mm]	0.2	0.05	0.05	0.3

Tableau II.5: Conductivités électriques [2], [3], [4] et [15]

Composant de SOFC	σ [$\Omega^{-1} \text{cm}^{-1}$]
Electrolyte	$\sigma_{ele} = 3.34 \times 10^4 \exp(-10300/T)$
Cathode	$\sigma_{cat} = \frac{4.2 \times 10^7}{T} \exp(-1200/T)$
Anode	$\sigma_{an} = \frac{9.5 \times 10^7}{T} \exp(-1150/T)$
Interconnexions	$\sigma_{intc} = 4 \times 10^6$ $\sigma_{intc} = \frac{9.3 \times 10^5}{T} \exp(-1100/T)$

VII. Structure du programme:

Le programme numérique qu'on a élaboré est écrit en langage de programmation **FORTRAN 6.6**. Il est composé de:

Un programme principal: qui permet de calculer:

- le champ thermique (T),
- la tension V et la densité de puissance P.

Celui-ci est composé de six sous-routines:

- 1- Subroutine de transport qui permet de calculer les cinq paramètres T, P, $X_{\text{H}_2\text{O}}$, X_{H_2} et X_{O_2} .
- 2- Subroutine pour les sources afin de calculer les sources de chaleur; source due aux pertes ohmiques, source due aux pertes d'activation, source due aux pertes de concentration et source due aux réaction chimique.

3- Subroutine englobe les différentes expressions de la source de chaleur due à la réaction chimique.

4- Subroutine pour la calcul de la tension de la pile.

5- Subroutine pour le calcul des conditions aux limites le long du contour de la cellule et aux quatre parois internes anodique et cathodique **Fig II.3**.

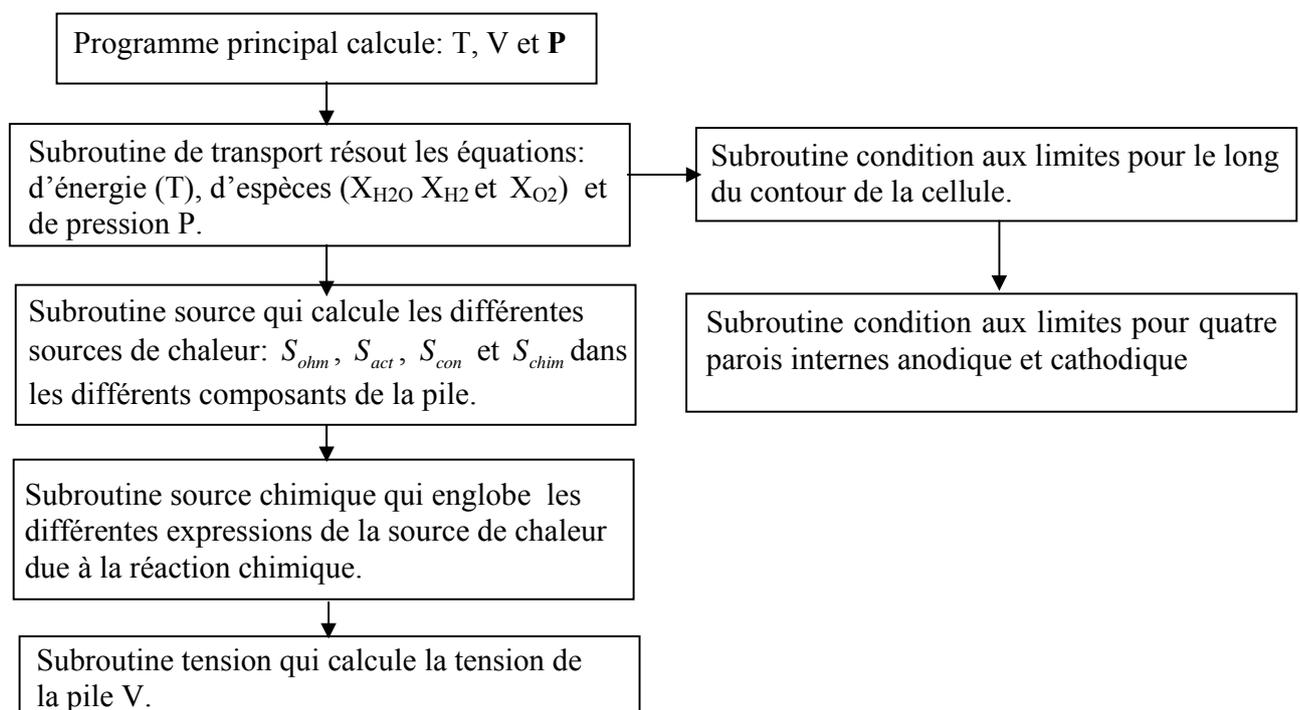


Fig. II.3: Structure du programme

Introduction

La performance d'une pile SOFC et les champs de températures calculés résultent d'un modèle de calcul appliqué dans un plan perpendiculaire au sens de l'écoulement des gaz dans les canaux d'une cellule standard (NiYSZ), (YSZ), (LSM) SOFC_P à anode supportée (AS) ou à électrolyte supportée (ES).

L'analyse du champ de température est faite en fonction de l'effet de différents type de sources de chaleur: Il s'agit de la source de chaleur due aux surtensions électriques; ohmiques, activation et concentration et celle due à la réaction chimique. Exprimée en fonction de l'enthalpie ou de l'entropie, une étude comparative nous a permis de faire un choix d'expression pour la source de chaleur due à la formation de l'eau dans le reste des cas de calcul.

Sachant que les températures d'air ou d'hydrogène (T_{H_2}/T_{air}) sont différentes et de valeur très élevées, de l'ordre de 873-1173K, notre étude englobe trois cas. En premier lieu, la SOFC fonctionne aux mêmes valeurs de ($T_{H_2} = T_{air}$). Dans un second cas, elle fonctionne à ($T_{H_2} > T_{air}$). Le dernier cas montre l'effet de l'inversement des valeurs de T_{gaz} ($T_{H_2} < T_{air}$) sur le champ de température et sur la performance de la pile.

I. Champ de température pour différentes expressions de la source chimique

I.1. Source de chaleur chimique en fonction de différente expression de l'entropie

En exprimant le terme source de chaleur due à la réaction chimique en fonction des différentes expressions de l'entropie, la température maximale se localise dans toute l'interface anode/électrolyte et de part et d'autre des extrémités de cette interface. A une température des gaz égaux à 873 K, l'élévation maximale de la température est de 1/10 de degré pour les deux types d'expressions de la source d'énergie chimique données par les références [13] et [27] (**Fig. III.1, Tableau III.1**).

I.2. Source de chaleur chimique en fonction de différentes expressions de l'enthalpie

Dans le cas où cette source de chaleur est en fonction de l'enthalpie, les sites des températures maximales sont les même que dans le cas précédent mais l'élévation de température est importante. En se servant des expressions de l'enthalpie données par **Lijin Wang et al** [23] d'une part et celle donnée par **Qiusheng Wang et al** [2] et **M. CHNANI** [8] et enfin celle donnée par **Franco Barbir** [27] et [32], l'élévation maximale est de l'ordre de 18 degré, 4 degré et de 3 degré respectivement. (**Fig. III.2, Tableau III.1**).

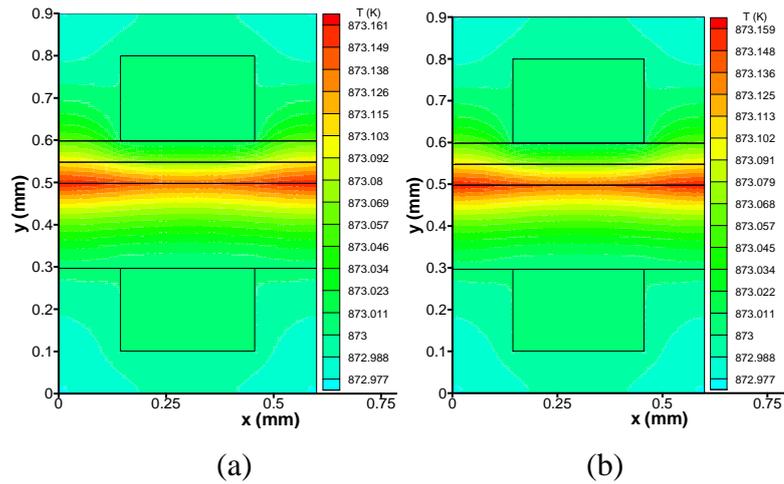


Fig. III.1: Champ de température d'une SOFC_P à AS dont la source de chaleur chimique est exprimée en fonction de l'entropie, $T_{H_2/air} = 873$ K. (a): [13] et (b): [27]

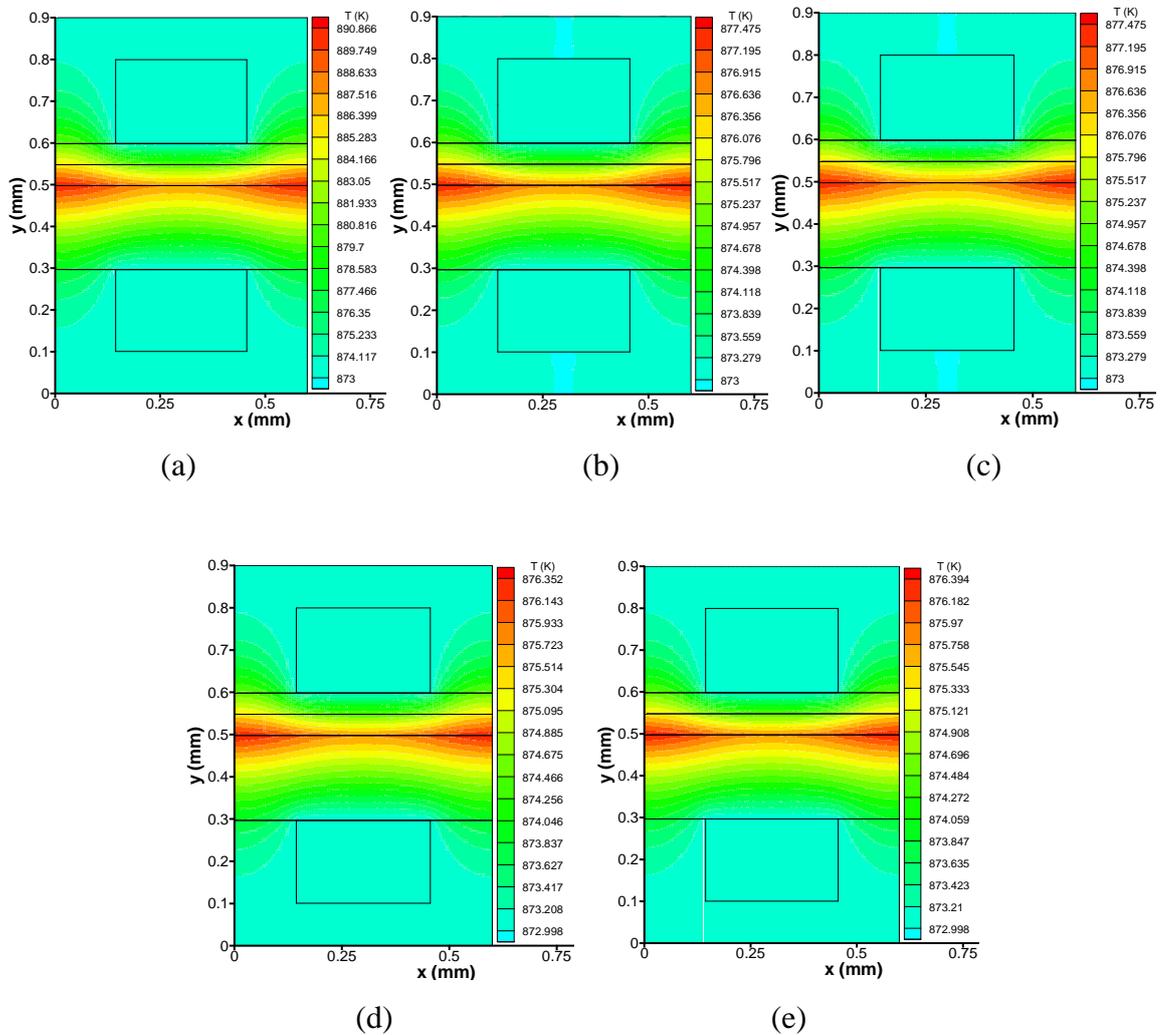


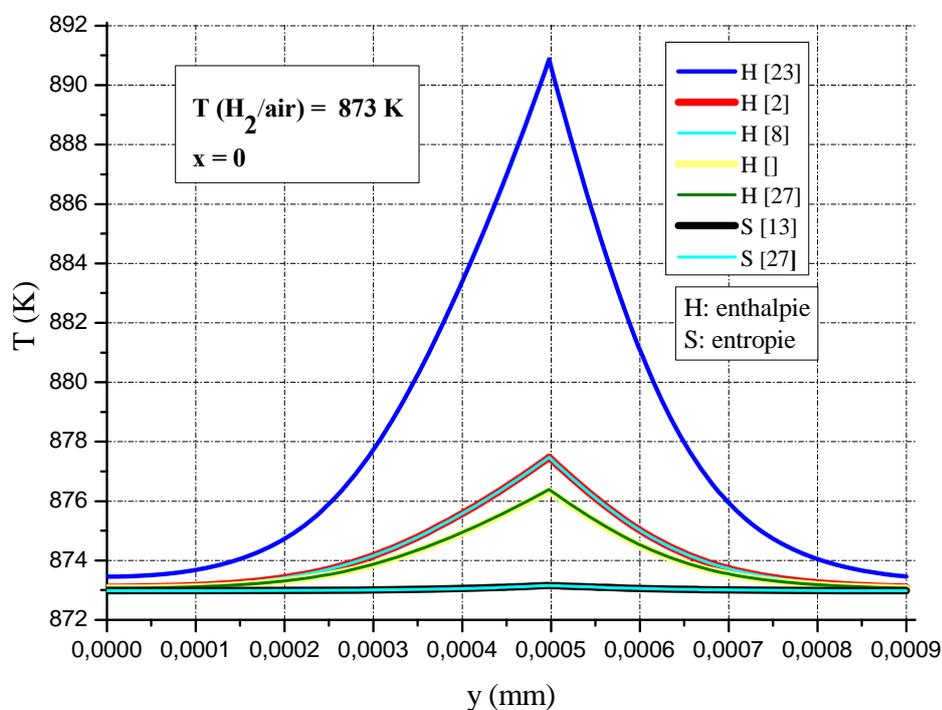
Fig. III.2: Champ de température d'une SOFC_P à AS dont la source de chaleur chimique est en fonction de différente expression de l'enthalpie, $T_{H_2/air} = 873$ K (a): [23], (b): [8], (c): [2], (d): [32] et (e): [27]

Tableau III.1: Elévation maximales de la température: Source de chaleur chimique exprimée en fonction de l'entropie et de l'enthalpie

	$\Delta T \text{ max[K]}$	Références
Expression de ΔS	0.16	[13]
	0.16	[27]
Expression de $\Delta H_{f, H_2O}$	17.87	[23]
	4.48	[8]
	4.48	[2]
	3.40	[27]
	3.35	[32]

I.3. Choix de l'expression de la source de chaleur due à la réaction chimique

Comme les expressions de chaleur d'origine chimique sont diverses, l'élaboration d'un profil, renfermant toutes les expressions, est nécessaire pour pouvoir choisir l'expression la plus convenable. Ce profil est obtenu pour une température des gaz égale à 873 K. D'après les graphes, on constate que la température maximale est obtenue par la relation de la référence [23] et celle minimale par les relations des références [13] et [27]. Alors que la température moyenne est donnée par les expressions des références [2] et [8]. Par conséquent dans ce qui suit, l'affichage des résultats sera effectué en utilisant l'expression de l'enthalpie [8] pour décrire la source de chaleur chimique (**Fig. III.3**).

**Fig. III.3:** Profil de température en fonction des différentes expressions de la source de chaleur

I.4. Performance de la pile

La diversité des expressions de la source de chaleur due à la formation d'eau a conduit à la variation des valeurs de température (Fig. III.3). Par conséquent, la densité de puissance varie. Pour une SOFC planaire à anode supportée fonctionnant à une température de gaz égale à 973 K, la densité de puissance maximale est de $0.23 \text{ [W/cm}^2\text{]}$ suivant une expressions de la source chimique donnée par **Lijin Wang** et al [23] et elle est de $0.19 \text{ [W/cm}^2\text{]}$ suivant une autre expression donnée par **Yixin Lu** [13] (Fig. III.4).

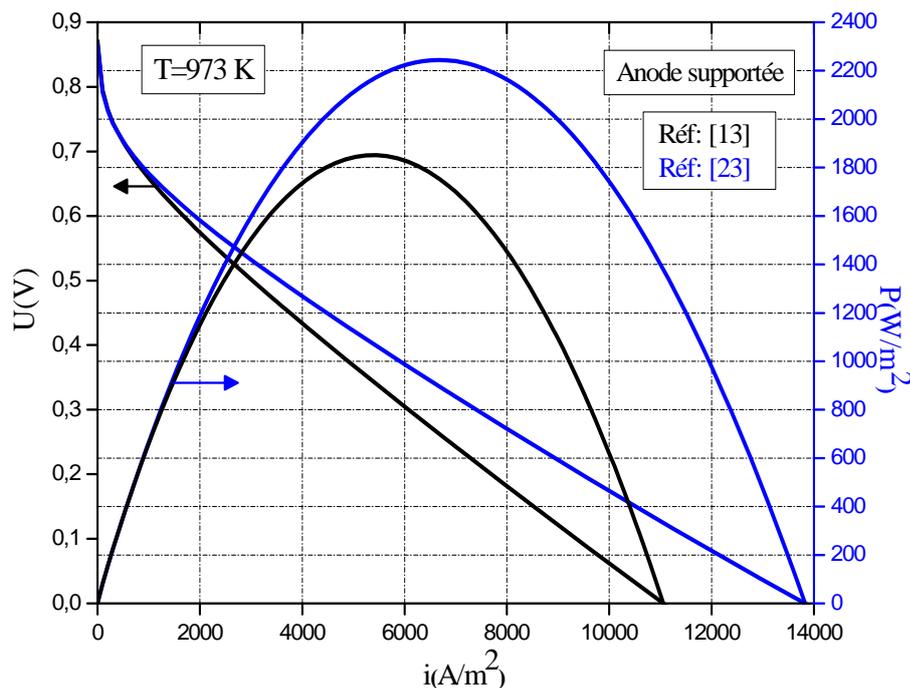


Fig. III.4: Effet de l'expression de la source chimique sur la performance d'une SOFC_P à AS

II. Cellule SOFC fonctionnant aux mêmes températures de gaz

II.1. Champ de température pour une cellule SOFC à anode supportée

Les figures ci-dessous (Fig. III.5 - Fig. III.11) présentent l'effet des différents types de source de chaleur pour une cellule à anode supportée (AS) fonctionnant aux différentes valeurs de température des gaz (T_{gaz}).

II.1.1. Source de chaleur due aux gaz

Les gaz dans les canaux anodiques et cathodiques aux mêmes températures sont considérés comme une source de chaleur pour la pile. La **figure III.5** montre que, quelque soient les valeurs de température attribuées aux gaz, l'allure de la distribution de température demeure la même.

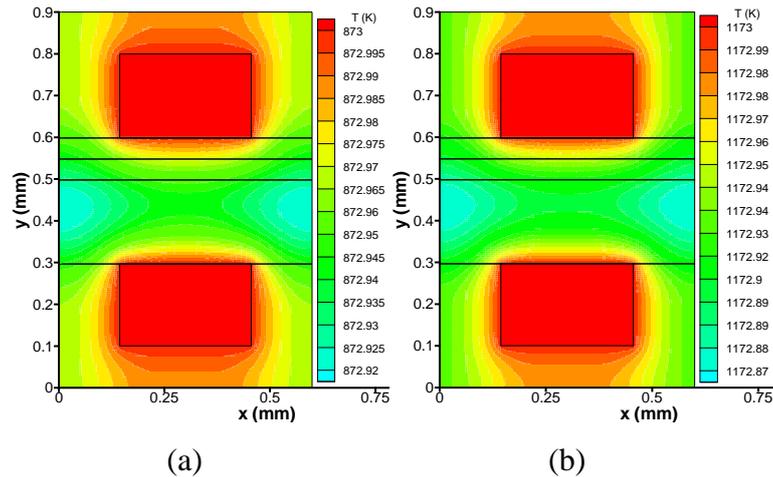


Fig. III.5: Champ de température d'une SOFC_P à AS sous l'effet de la source de chaleur due aux gaz (a): $T = 873$ K et (b): $T = 1173$ K

II.1.2. Source de chaleur due aux surtensions Ohmiques

La visualisation du champ de température est faite pour différentes valeurs de température. L'effet de la source de chaleur due aux surtensions Ohmiques (effet de Joules) est remarquable pour une température de gaz moins élevées ($T_{\text{gaz}} = 873$ K). L'élévation maximale de température est d'ordre de 2.2 K. Au fur et à mesure que T_{gaz} augmente, l'effet devient négligeable ($T_{\text{gaz}} = 1173$ K).

A une valeur de T_{gaz} égale à 873 K, la localisation de la température maximale (T_{max}) est dans l'électrolyte loin des canaux. Ces températures envahissent la totalité de l'électrolyte et de la cathode au voisinage des valeurs de T_{gaz} égales à 1173 K (**Fig. III.6**).

II.1.3. Source de chaleur due aux surtensions d'activations et de concentration

En plus de l'existence des surtensions de concentrations dans la totalité des électrodes, les surtensions d'activation sont localisées soit aux interfaces électrodes/électrolyte [4] soit dans la totalité des électrodes Yixin Lu et al [1] et Yunzhen Yang et al [24]. Cette source de chaleur résultante de la source de chaleur due à aux surtensions d'activation et celle due surtension de concentration est étudiée suivant deux cas.

Dans le cas où les surtensions d'activation sont appliquées aux interfaces électrodes/électrolyte, on constate que les températures maximales se localisent dans l'électrolyte à cause de son épaisseur fine. Un maximum d'élévation de température est de l'ordre de 0.5 K et cela seulement aux températures de gaz inférieur à 973 K. On peut conclure que les deux gaz jouent le rôle d'un refroidisseur pour l'électrolyte (**Fig. III.7: a, b**). Cependant, ces gaz changent de rôle et deviendront un réchauffeur sous des températures de gaz égale à 1173 K (**Fig. III.7: c**).

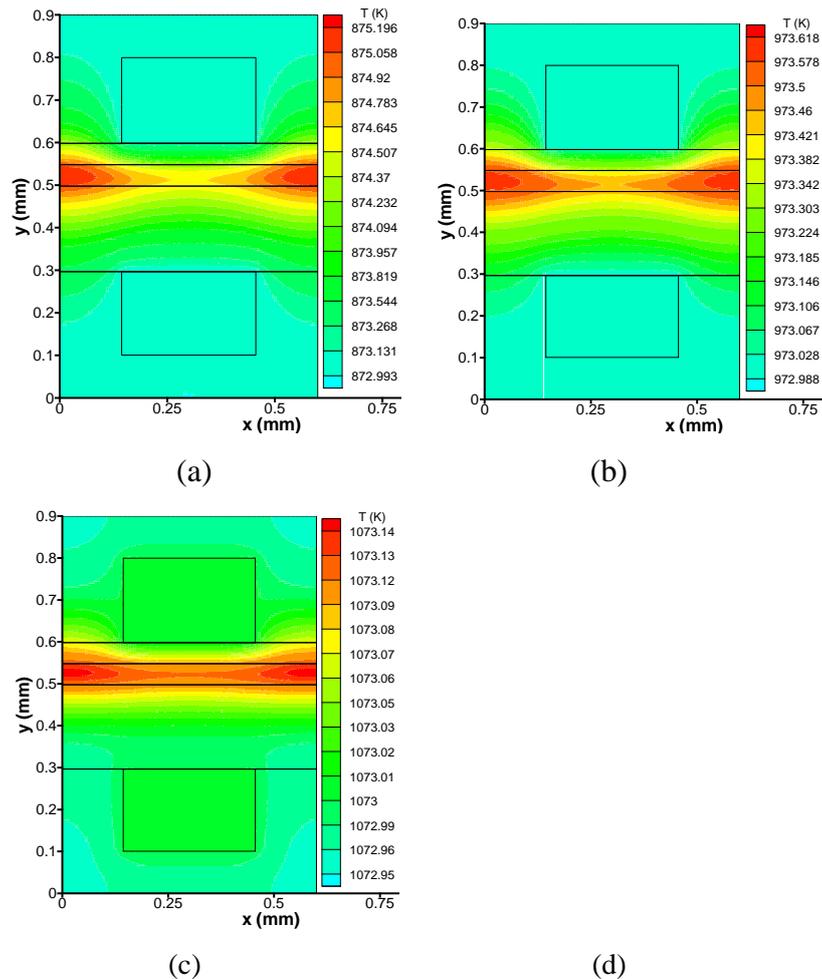


Fig. III.6: Champ de température d'une SOFC_P à AS sous l'effet de la source de chaleur due aux surtensions Ohmiques, (a): $T = 873$ K, (b): $T = 973$ K, (c): $T = 1073$ K et (d): $T = 1173$ K

A une valeur de température, aucune élévation n'a été enregistrée mais il y a un changement dans l'allure de la distribution de température (**fig. III.7: d**).

Par contre, quand les surtensions d'activation sont appliquées dans la totalité des électrodes, le champ de température dans une cellule SOFC_P est du seulement aux températures des gaz. En outre la **figure III.8** montre que indépendamment de la valeur de la température de gaz d'alimentation, la distribution de température dans une cellule SOFC demeure la même.

II.1.4. Source de chaleur due aux surtensions électriques

A des températures de 873, 973 et 1073 K, on a constaté que l'élévation maximale de température se localise dans l'électrolyte loin des canaux bien que les sources de chaleur dues aux surtensions électriques soient réparties dans les trois parties (électrolyte et électrodes).

Egalement à une température de 1173 K, on a remarqué une très faible élévation mais sa localisation se trouve dans l'électrolyte entre les deux canaux comme le montre la **figure III.9**.

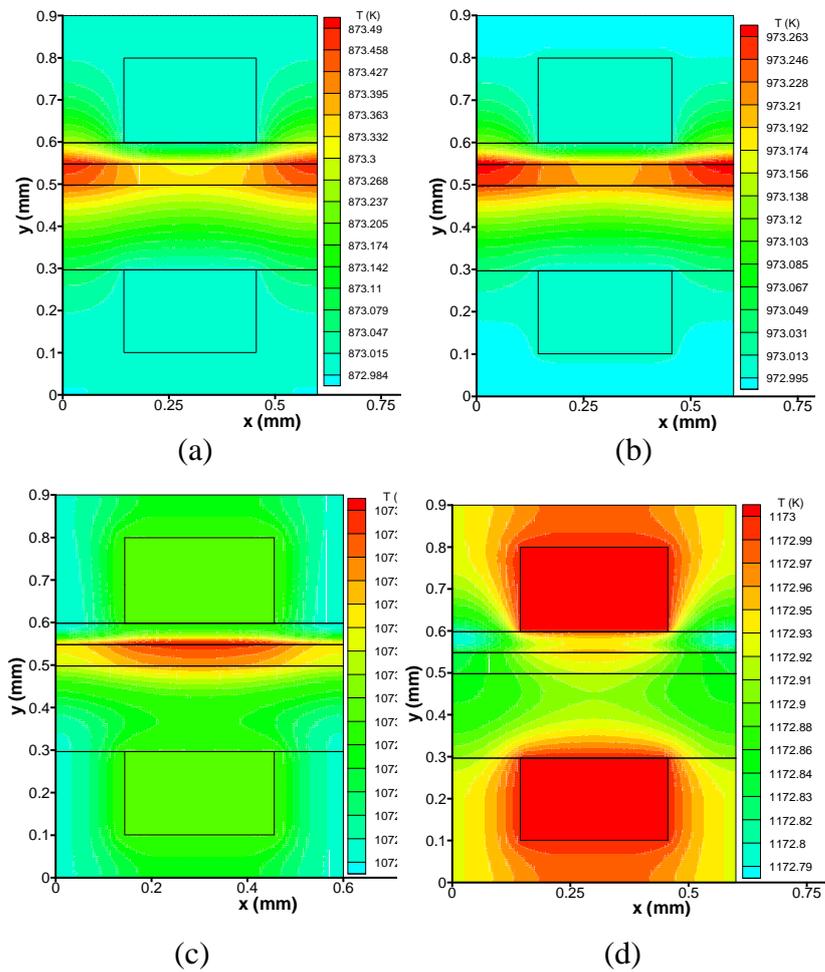


Fig. III.7: Champ de température d'une SOFC à AS sous l'effet de la source de chaleur due aux surtensions de concentration et d'activation appliquée aux interfaces électrodes/électrolyte (a): $T = 873$ K, (b): $T = 973$ K, (c): $T = 1073$ K et (d): $T = 1173$ K

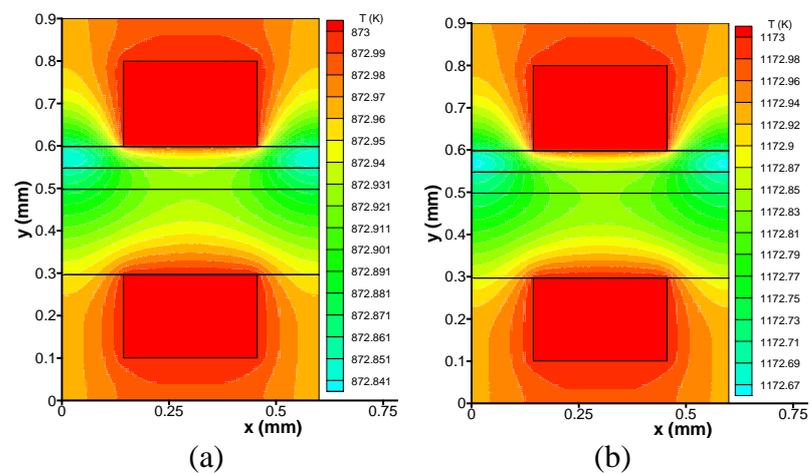


Fig. III.8: Champ de température d'une SOFC_P à AS sous l'effet de la source de chaleur due aux surtensions de concentration et d'activation appliquée dans les électrodes (a): $T = 873$ K et (b): $T = 1173$ K

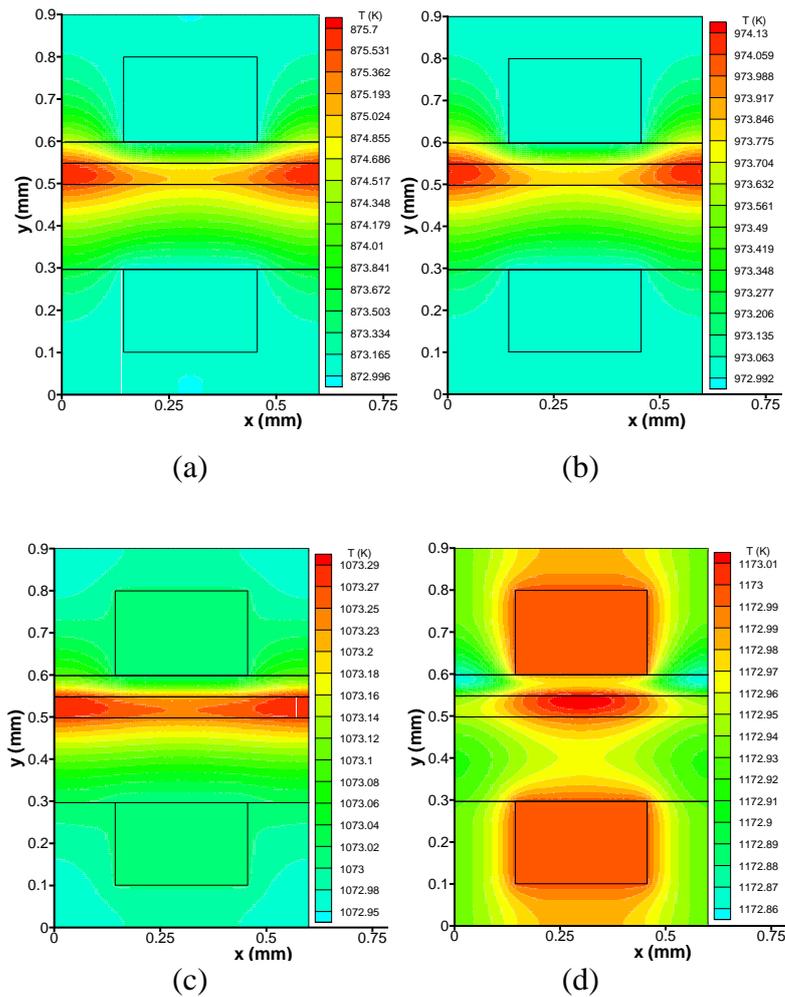


Fig. III.9: Champ de température d'une SOFC_P à AS sous l'effet des surtensions électriques (a): $T = 873$ K, (b): $T = 973$ K, (c): $T = 1073$ K et (d): $T = 1173$ K

II.1.5. Source de chaleur due à la réaction chimique

Sous l'effet de la source de chaleur due à la formation de l'eau, la figure III.10 illustre les faits suivants:

- L'élévation maximale de température se focalise dans toute l'interface anode/électrolyte, de plus de part et d'autre des extrémités de cette interface.
- De ces sites chauds, la chaleur se propage aux autres parties de la pile.
- On remarque également que l'élévation de température décroît quant la pile est alimentée par des gaz à haute température et vis vers ça.

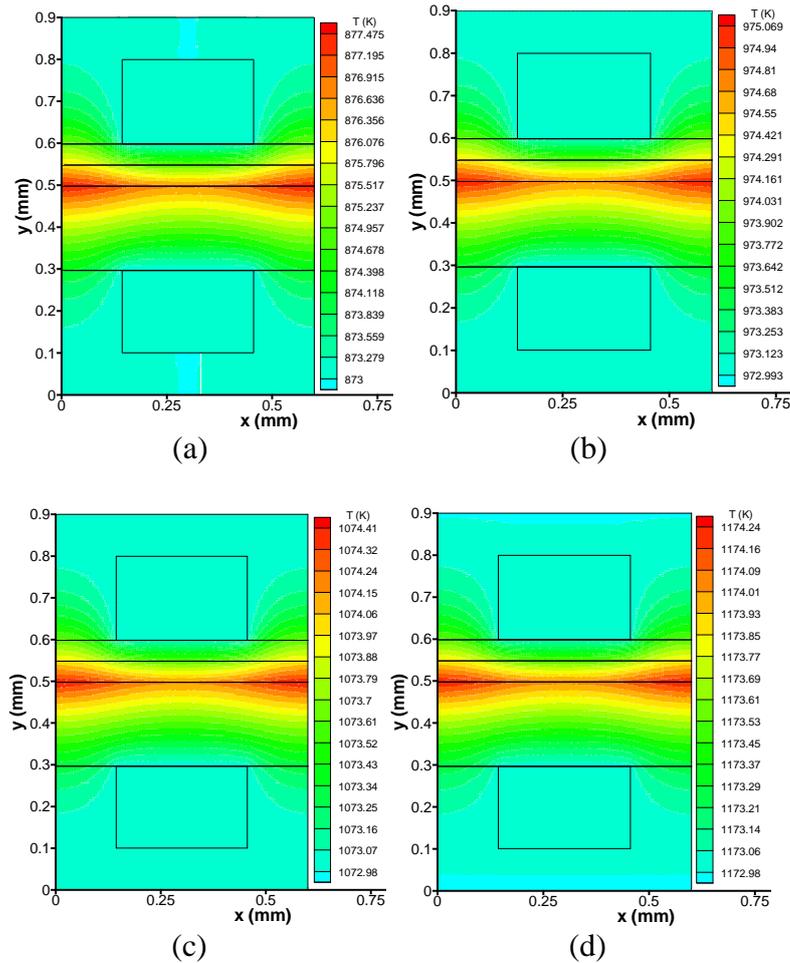


Fig. III.10: Champ de température d'une SOFC_P à AS sous l'effet de la source de chaleur due à la réaction chimique, (a): $T = 873$ K, (b): $T = 973$ K, (c): $T = 1073$ K et (d): $T = 1173$ K

II.1.6. Source de chaleur totale

Sous l'effet de la source totale de chaleur; les sources de chaleur dues aux surtensions électriques et la source de chaleur due à la réaction chimique, l'élévation maximale de la température dans une SOFC se trouve au niveau de l'interface anode/électrolyte et de part et d'autre de ses extrémités. Aux températures de gaz égales à 873 K, une élévation maximale de 6.469 K. Toute fois à des températures plus élevées, cette valeur s'atténue. On a mentionné une élévation de 1.18 K à une température de gaz égale 1173 K (**Fig. III.11**).

Le **Tableau III.2**, englobe les élévations maximales des températures d'une SOFC_P à AS où les valeurs des températures des deux gaz sont égales ($T_{H_2} = T_{air}$). Les plus grandes élévations de température sont causée par la source de chaleur due à la réaction chimique quelque soit les températures de gaz. Aucune élévation de température n'est constatée dans le cas

de la source de chaleur due aux surtensions de concentration et celle d'activation surtout dans le cas où ces dernières sont appliquées dans la totalité des électrodes. L'effet Joule a un effet non négligeable surtout aux basses températures de gaz.

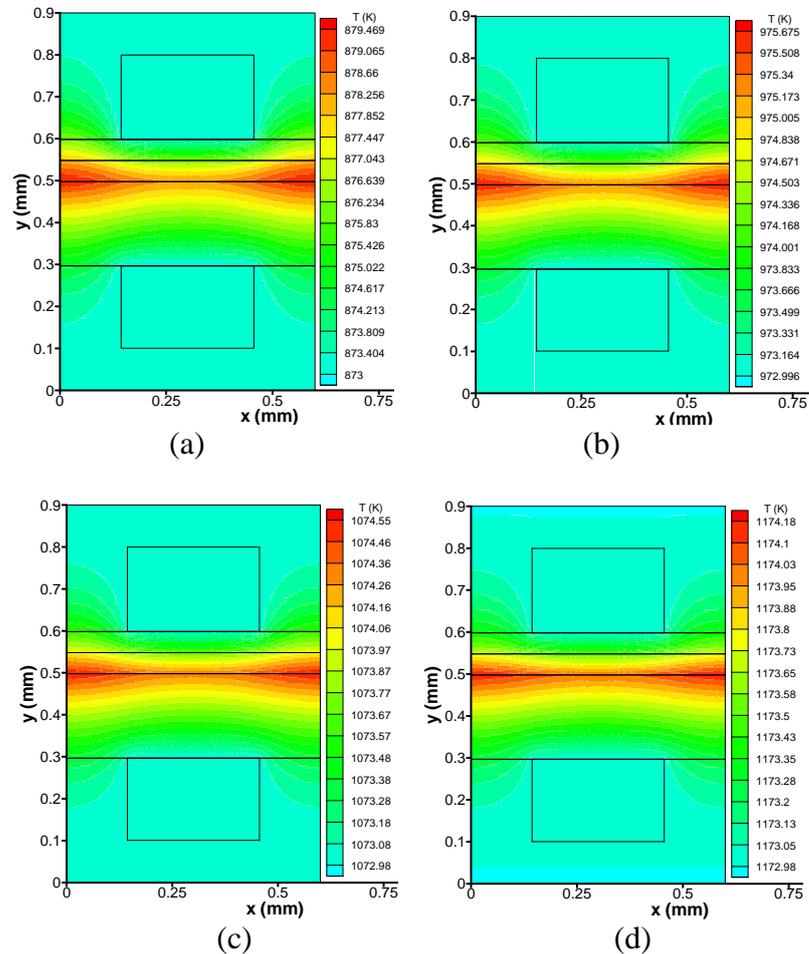


Fig. III.11: Champ de température d'une SOFC_P à AS sous l'effet de la source totale de chaleur (a): $T=873$ K, (b): $T=973$ K, (c): $T=1073$ K et (d): $T=1173$ K

Tableau III.2: Élévation maximale des températures d'une SOFC_P à AS: $T_{H_2} = T_{air}$

Source de chaleur		ΔT_{max} [K]			
		873 K	973 K	1073 K	1173 K
S_{ohm}		2.20	0.60	0.10	0.01
$S_{act}+S_{con}$	S_{act} : appliquée aux interfaces A/E et C/E	0.50	0.30	0.10	0
	S_{act} : appliquée dans les électrodes	0	/	/	0
S_{chim}		4.50	2.10	1.40	1.30
Source totale de chaleur		6.47	2.67	1.55	1.18

II.1.7. Performance de la pile

L'effet de la source totale de chaleur sur la performance d'une cellule SOFC_P à anode supportée a été étudiée pour deux valeurs de températures de fonctionnement 873 K et 1173 K.

La cellule SOFC présente des densités de puissance faible pour une température de fonctionnement égale à 873 K. La densité de puissance générée dans le cas avec et sans source totale de chaleur est d'ordre de 0.080 et 0.065 [W/cm²] respectivement.

A une température de fonctionnement plus élevée; de l'ordre de 1173 K, les densités de puissance sont plus élevée et de valeur respectivement 0.55 et 0.52 [W/cm²]. La source totale de la chaleur fait augmenter la densité de puissance d'une valeur de 0.015 [W/cm²] à 873 K et à 1173 K, cette élévation de la densité de puissance est doublée (0.03 [W/cm²]).

En passant de la température de fonctionnement de 873 K à 1173 K, une même élévation de la densité de puissance d'ordre 0.45 [W/cm²] est remarquée avec ou sans source totale de chaleur. En déduit que l'effet de la source totale de la chaleur est négligeable à toute température de fonctionnement (0.015 [W/cm²], 873K et 0.03 [W/cm²], 1173 K) devant l'effet de la valeur de la température de gaz. **Fig. III.12.**

II.2. Champ de température pour une cellule SOFC à électrolyte supportée

II.2.1. Source de chaleur due aux gaz

Cette source de chaleur donne la même allure quelque soit la valeur de la T_{gaz} **Fig. III.13.**

II.2.2. Source de chaleur due aux surtensions Ohmiques

L'effet de la source de chaleur due aux surtensions Ohmiques de l'électrolyte est remarquable par apport aux deux autres. L'élévation de température est maximale pour une faible température de gaz ($T_{\text{gaz}} = 873$ K). A haute température ($T_{\text{gaz}} = 1173$ K), l'effet de la source de chaleur due aux surtensions Ohmiques est faible. Dans l'électrolyte loin des canaux se localisent les hautes températures **Fig. III.14.**

II.2.3. Source de chaleur due aux surtensions d'activations et de concentration

II.2.3.1. Surtensions d'activation appliquée aux interfaces électrodes/électrolyte

Comme pour les SOFC_P à AS, la seule élévation de température pour une SOFC_P à ES est à l'interface cathode /électrolyte ($\Delta T_{\text{max}} = 0.4$ K) sous l'effet des surtensions de concentration et celle d'activation appliquée aux interfaces électrodes/électrolyte. Par conséquent, la propagation de la chaleur se fait vers l'électrolyte et la cathode. Cette dernière, présentant une conductivité thermique élevée, est refroidie par l'air (**Fig. III.15: a, b**).

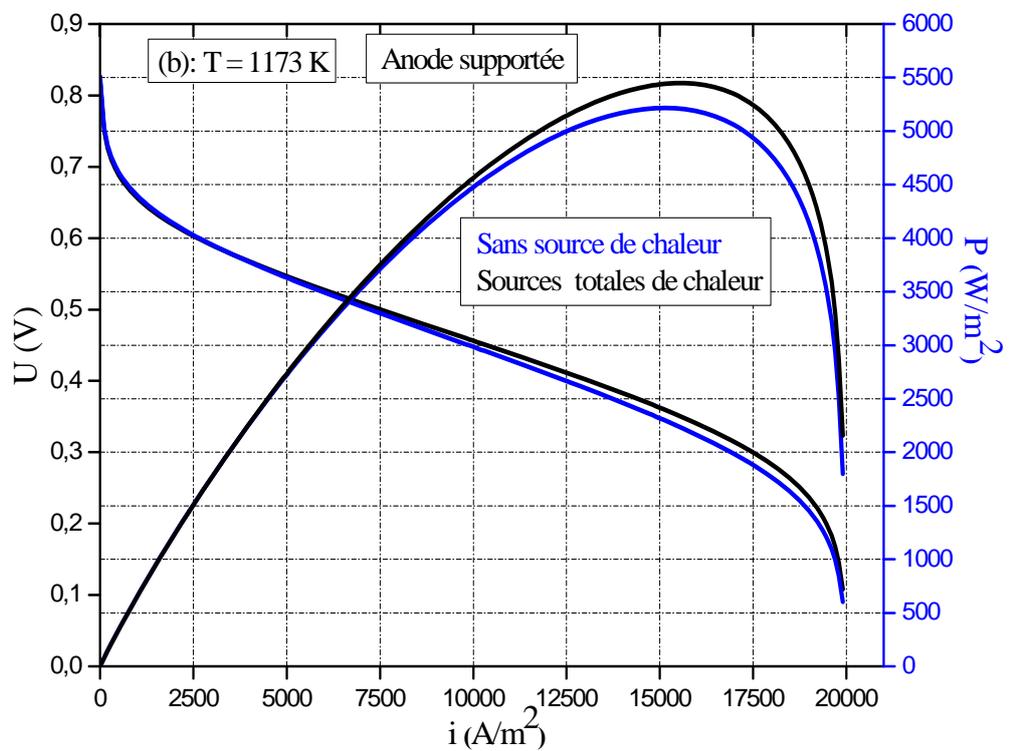
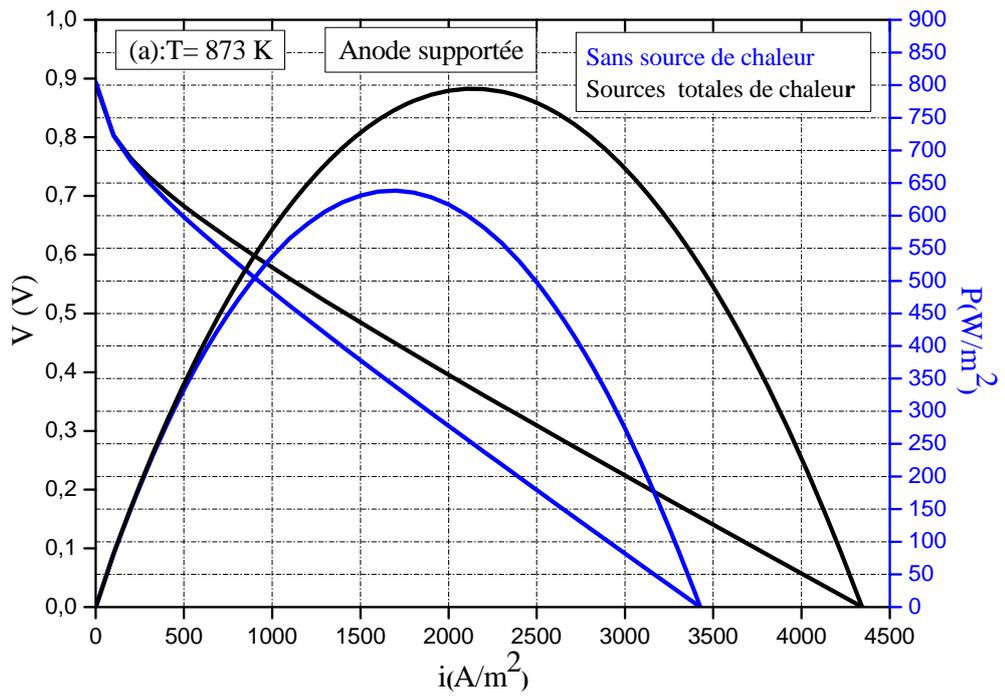


Fig. III.12: Effet de la source totale de chaleur sur la performance d'une SOFC_P à AS
 (a): $T = 873 \text{ K}$ et (b): $T = 1173 \text{ K}$

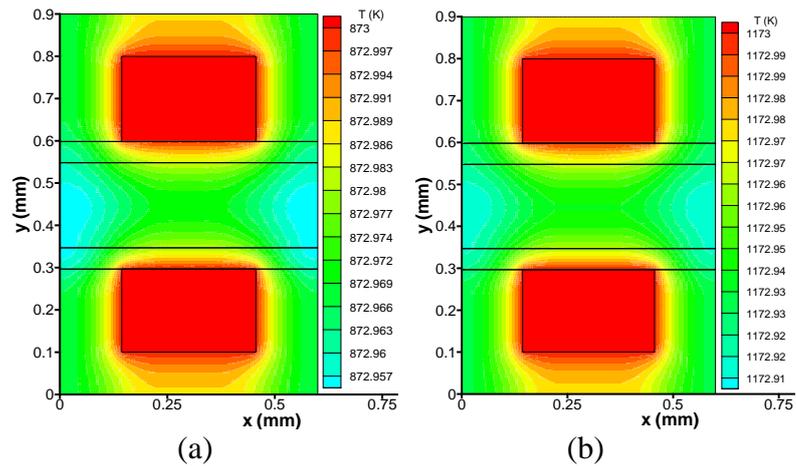


Fig. III.13: Champ de température d'une SOFC_P à ES sous l'effet de la source de chaleur due aux gaz, (a): $T = 873$ K et (b): $T = 1173$ K

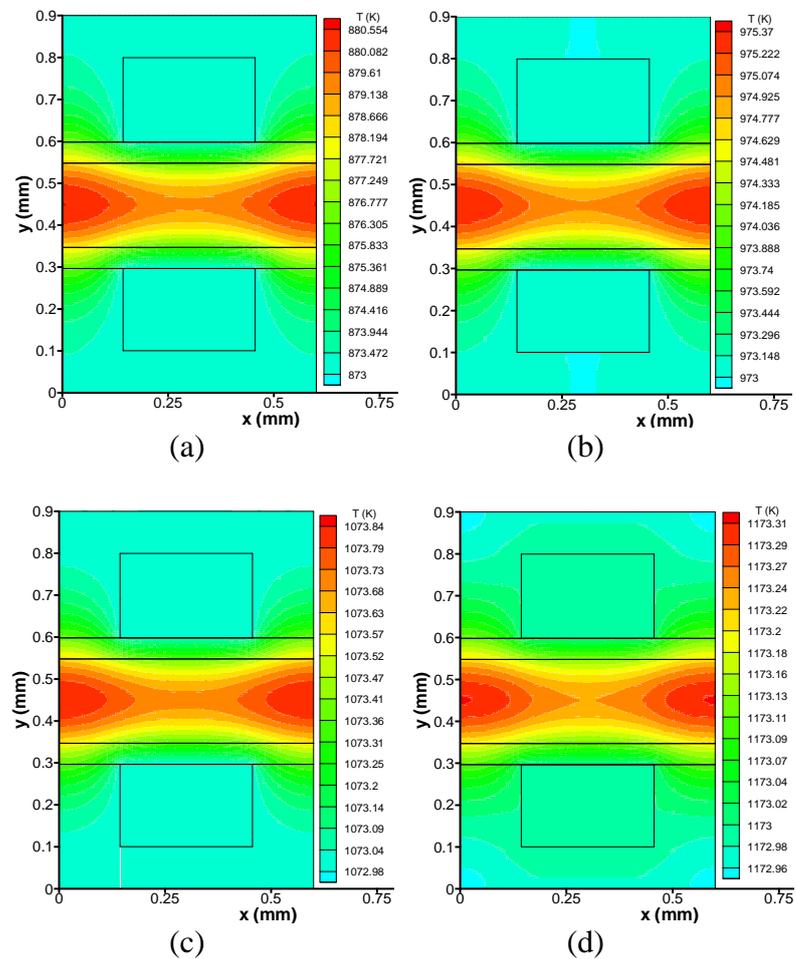


Fig. III.14: Champ de température pour une SOFC_P à ES sous l'effet de la source de chaleur due aux surtensions Ohmiques (a): $T = 873$ K, (b): $T = 973$ K, (c): $T = 1073$ K et (d): $T = 1173$ K

Aux T_{gaz} égales à 1073 K, une élévation très faible de l'ordre de 0.06 K pour l'interface cathode/électrolyte du SOFC situé entre deux canaux l'un anodique et l'autre cathodique. Sa localisation est favorisée par la valeur des températures des gaz. (Fig. III.15: c). Au fur et à mesure que ces derniers augmentent, les surtensions de concentration et celles d'activation se localise dans l'anode (Fig. III.15: d). c'est le même résultat trouvé si les surtensions d'activation sont appliquées dans la totalité des électrodes (Fig. III.16).

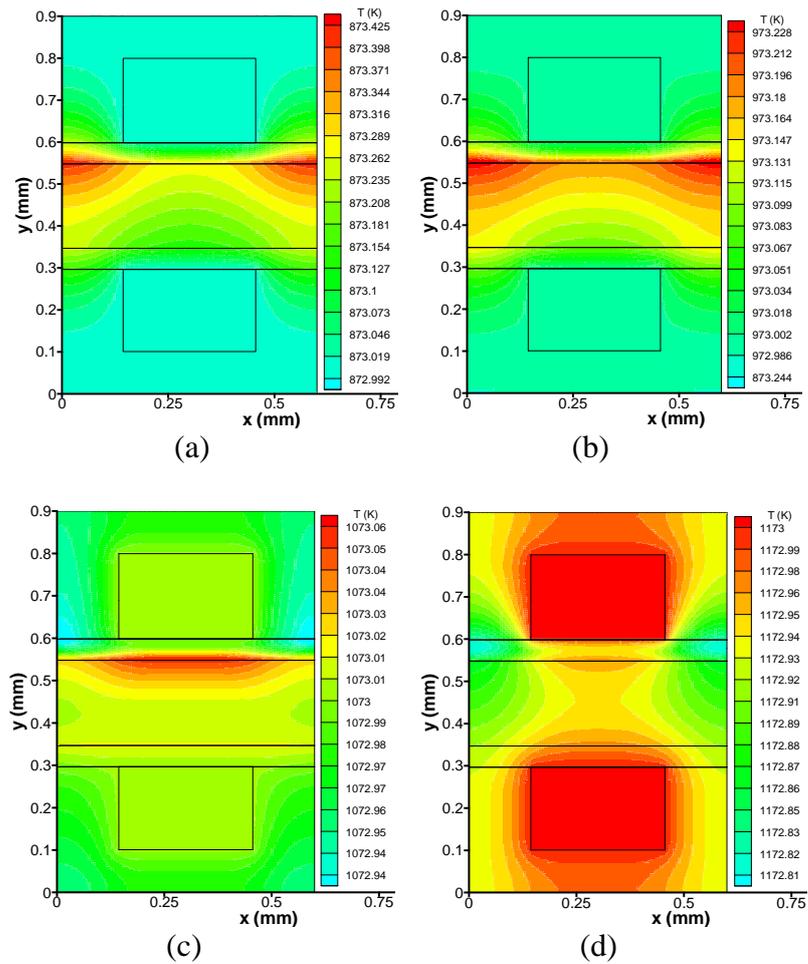


Fig. III.15: Champ de température d'une SOFC_P à ES sous l'effet de la source de chaleur due aux surtensions de concentration et d'activation appliquée aux interfaces électrodes/électrolyte (a): $T = 873$ K, (b): $T = 973$ K, (c): $T = 1073$ K et (d): $T = 1173$ K

II.2.4. Source de chaleur due aux surtensions électriques

Quelque soit la T_{gaz} et quelques soient la répartition des surtensions électrique, la température maximale se localise dans l'électrolyte loin des canaux. L'élévation est maximale pour des faibles T_{gaz} . Elle est faible pour des hautes températures Fig. III.17.

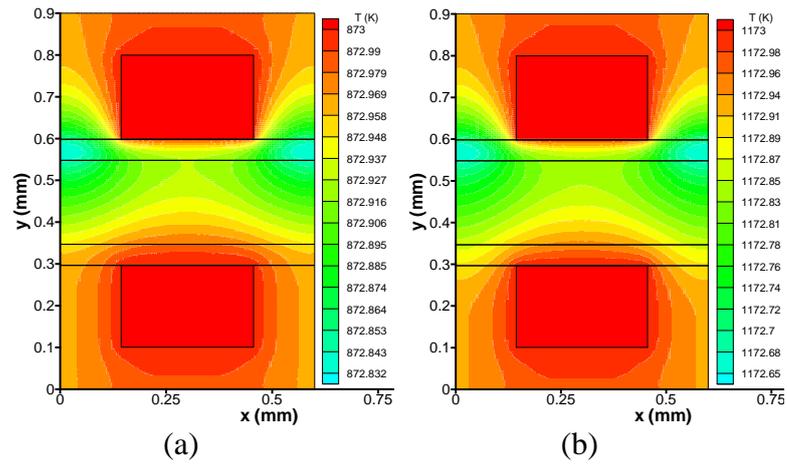


Fig. III.16: Champ de température d'une SOFC_P à ES sous l'effet de la source de chaleur due aux surtensions de concentration et d'activation appliquée dans les électrodes, (a): $T=873$ K et (b): $T=1173$ K

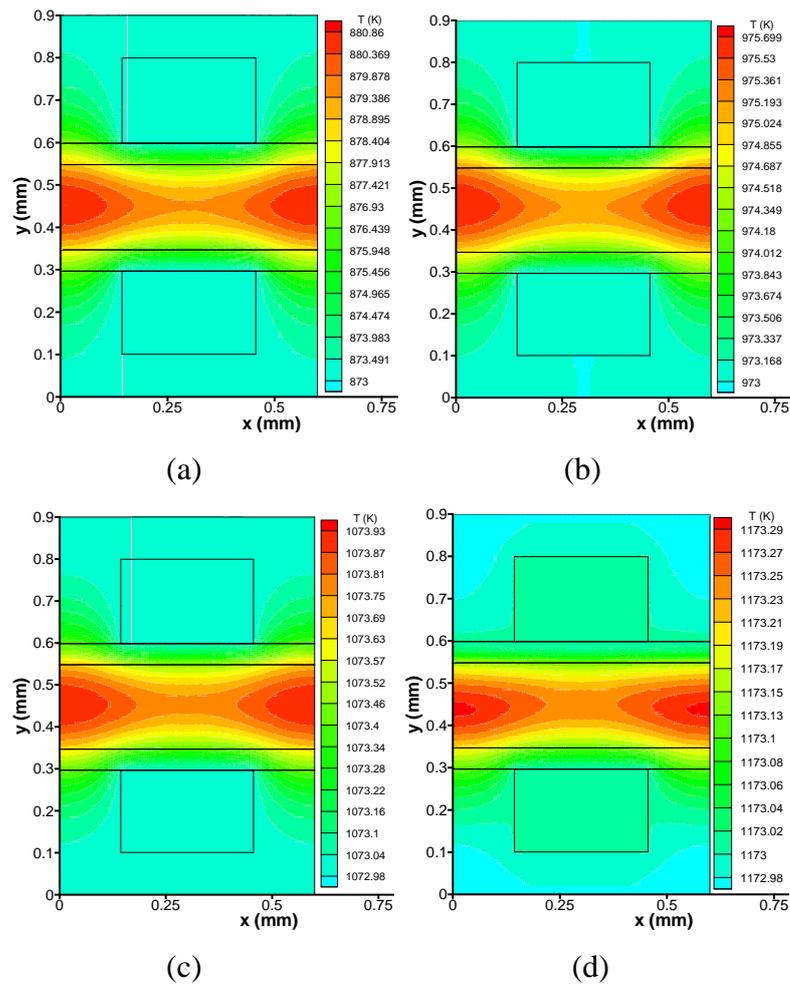


Fig. III.17: Champ de température d'une SOFC_P à ES sous l'effet des surtensions électriques (a): $T = 873$ K, (b): $T = 973$ K, (c): $T = 1073$ K et (d): $T = 1173$ K

II.2.5. Source de chaleur due à la réaction chimique

A l'interface anode/électrolyte et dans les régions situées de part et d'autre de l'interface loin des canaux se localisent les températures maximales. Les valeurs moins élevées des températures de gaz ($T_{\text{gaz}} = 873 \text{ K}$) donnent une élévation maximale d'ordre 11.79 K. L'élévation est minimale et égale à 1.53 K pour des températures de gaz plus élevées ($T_{\text{gaz}} = 1173 \text{ K}$) Fig. III.18.

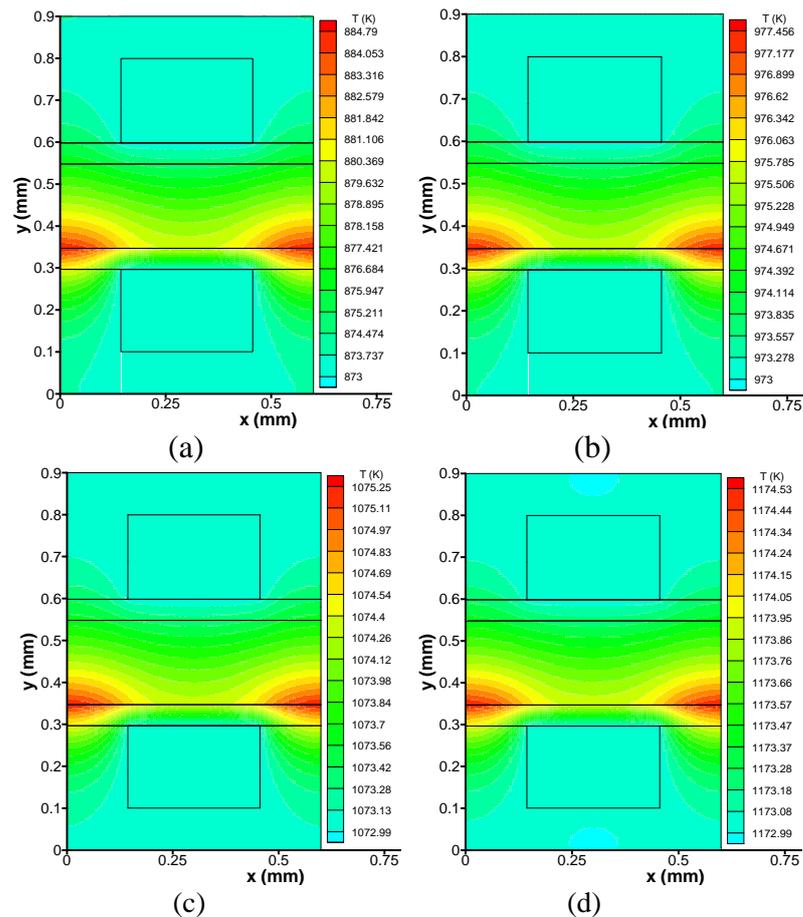


Fig. III.18: Champ de température d'une SOFC_P à ES sous l'effet de la source de chaleur due à la réaction chimique. (a): $T = 873 \text{ K}$, (b): $T = 973 \text{ K}$, (c): $T = 1073 \text{ K}$ et (d): $T = 1173 \text{ K}$

II.2.6. Source de chaleur totale

C'est à l'interface anode électrolyte et dans les régions loin des canaux de part et d'autre de l'interface que les températures maximales se localisent sous l'effet de la source de chaleur due aux surtensions électrique et à la source de chaleur dégagée lors de la formation de l'eau. De ces régions chaudes se propage la chaleur vers l'électrolyte. Aux températures moins élevées T_{gaz} ($T = 873 \text{ K}$), une élévation maximale de l'ordre de 16.4 K Fig. III.19.

Fonctionnant toujours avec des températures de gaz égales ($T_{\text{H}_2} = T_{\text{air}}$) mais cette fois ci en changeant les dimensions d'une SOFC_P; une SOFC_P à ES présente plus d'élévation de

température par rapport à une SOFC_P à AS (16.37 K au lieu 6.45 K). L'effet des températures de gaz et du pourcentage de participation de chaque type de source de chaleur dans l'élévation de la température dans une SOFC_P à ES sont les mêmes que dans une SOFC_P à AS. C'est toujours la source de chaleur due à la réaction chimique qui cause la plus grande élévation de température (Tableau III.3).

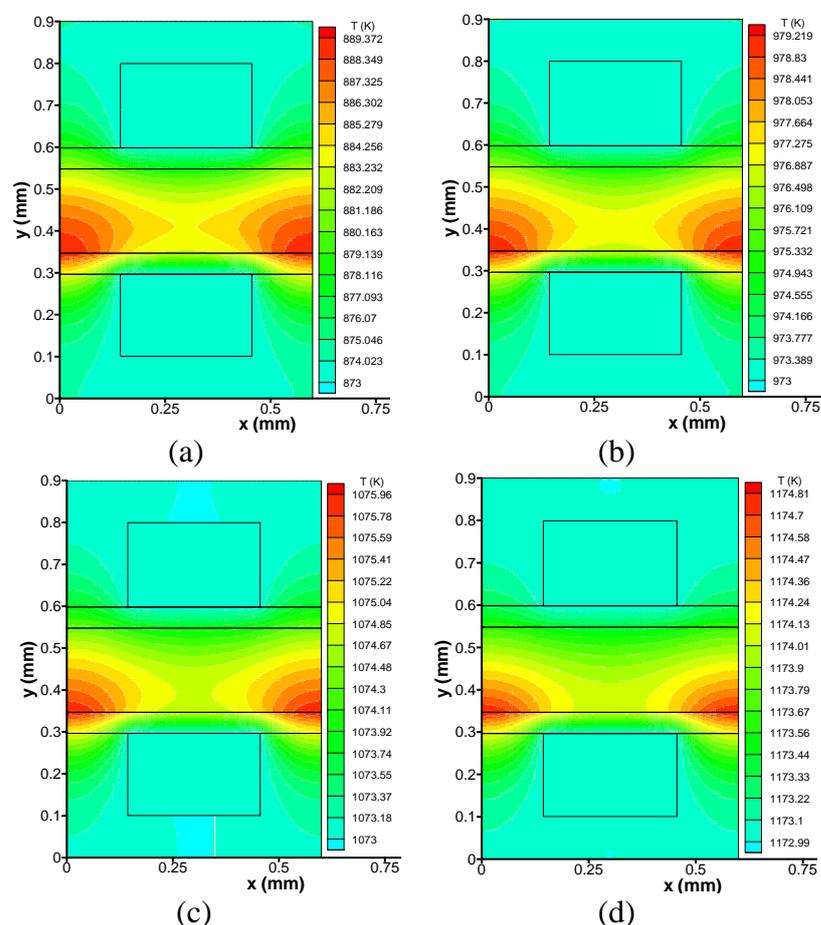


Fig. III.19: Champ de température d'une SOFC à ES sous l'effet de la source totale de chaleur (a): $T = 873$ K, (b): $T = 973$ K, (c): $T = 1073$ K et (d): $T = 1173$ K

Tableau III.3: Élévation maximale des températures d'une SOFC_P à ES: $T_{H_2} = T_{air}$

Source de chaleur		$\Delta T_{max}[K]$			
		873 K	973 K	1073 K	1173 K
S_{ohm}		7.50	2.40	0.80	0.30
$S_{act}+S_{con}$	S_{act} : appliquée aux interface A/E et C/E	0.40	0.20	0.06	0
	S_{act} : appliquée dans les électrodes	0	/	/	0
S_{chim}		11.8	4.50	2.30	1.50
Source totale de chaleur		16.37	6.22	2.96	1.81

II.2.7. Performance de la pile

On discute l'effet de la source totale de chaleur et celle de la température des gaz ($T_{H_2} = T_{air}$) sur la performance d'une cellule SOFC_P à électrolyte supportée. A une même température de gaz, la source totale de chaleur n'a pas d'effet significatif sur la valeur de la performance. La densité de puissance est faible de l'ordre de $0.02 \text{ [W/cm}^2\text{]}$ à 873 K et de $0.21 \text{ [W/cm}^2\text{]}$ à 1173 K (**Fig. III. 20**).

L'analyse des résultats obtenus tenant compte de l'effet de la configuration géométrique, de la température des gaz et de l'existence ou l'absence de la source de chaleur montre que cette dernière n'a pas d'effet remarquable sur la valeur de la densité de puissance du SOFC_P. C'est l'effet de la température des gaz qui agit fortement (0.06 à $0.52 \text{ [W/cm}^2\text{]}$ à 873 K). Une SOFC à AS débite une densité de puissance mieux que celle d'une SOFC à ES (0.52 contre $0.2 \text{ [W/cm}^2\text{]}$ à 1173 K) **Tableau III.4**.

Tableau III.4: Densité de puissance du SOFC_P à AS et ES: $T_{H_2} = T_{air}$

Tgaz [K]		P [W/cm ²]	
		SOFC à AS	SOFC à ES
873	Effet des T _{gaz}	0.06	0.02
	Effet de la source totale de la chaleur	0.08	0.022
1173	Effet des T _{gaz}	0.52	0.21
	Effet de la source totale de la chaleur	0.52	0.21

III. Inégalité des températures d'hydrogène et d'air

Dans ce qui précède, le champ de température été visualisé dans le cas où les deux gaz (l'air et l'hydrogène) ont les mêmes valeurs pour la température. Que devient ce champ de température quand l'air et l'hydrogène alimentant la pile ont des températures inégales?

Suivant la bibliographie consultée, la température de l'hydrogène est toujours supérieure à celle de l'air. Mais, que devient le champ de température quand la pile fonctionne avec une température d'air supérieure à celle de l'hydrogène ?

La localisation et la valeur des hautes températures dans ces deux cas sont discutées en fonction d'une différence de température entre les deux gaz de 10 , 50 et 270 K . L'effet de la source totale de chaleur et l'effet de la géométrie sont pris en considération. En parallèle, la performance de la pile SOFC est évaluée dans chaque cas.

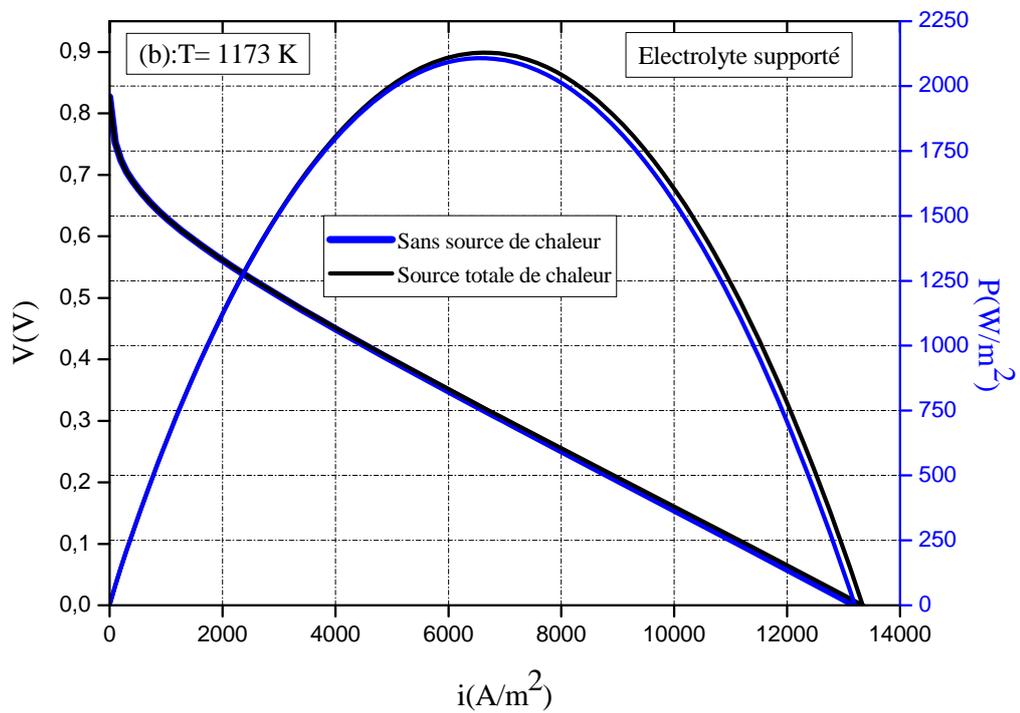
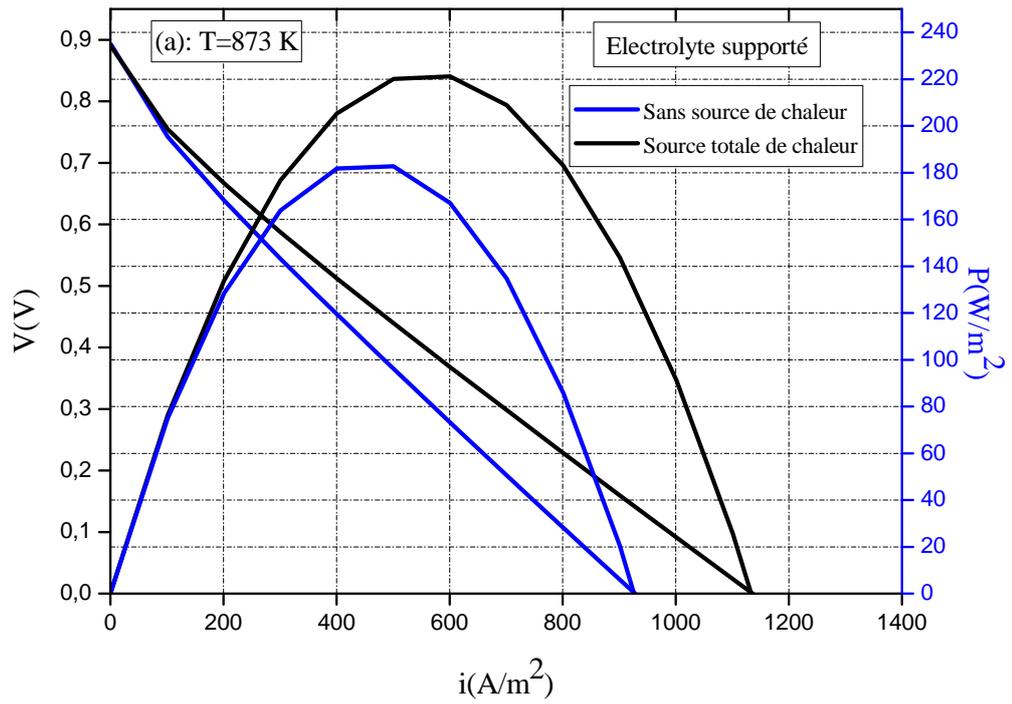


Fig. III.20: Effet de la source totale de chaleur sur la performance d'une SOFC_P à ES, (a) et (b)

III.1. Température d'hydrogène est supérieur à celle de l'air

Pour comprendre le comportement de la pile SOFC vis-à-vis de différentes valeurs pour les températures d'hydrogène et celle de l'air en présence ou en absence de la source de chaleur, le champ de température dans les parties solides de la pile SOFC_P à AS ou à ES est calculé pour des températures (T_{H_2}/T_{air}) suivantes; 883/873 K, 923/873 K, 1123/1073 K et 1143/873 K dont une différence de 10, 50, 50 et 270 K entre T_{H_2} et T_{air} respectivement.

III.1.1. Champ de température pour une cellule SOFC à anode supportée

Effet de (T_{H_2}/T_{air})

En absence de la source totale de la chaleur, la pile présente une même allure pour le champ de température quelque soit les valeurs de (T_{H_2}/T_{air}). La chaleur se propage du canal anodique vers les autres parties de la pile. Une partie de l'anode en contact du canal anodique atteint la température maximale T_{max} . Cette dernière se localise aussi dans la totalité de l'interconnexion anodique (**Fig. III.21.a, c, e et g**).

Effet de la source totale de la chaleur

En présence de la source totale de la chaleur, aux basses valeurs de (T_{H_2}/T_{air}); 883/873 K, une élévation d'ordre de 0.6 K a été remarqué (**Fig. III.21.b**). La température maximale se localise dans la totalité de l'interconnexions anodique et dans la totalité de l'anode. Une évacuation de la chaleur à travers le canal cathodique a été remarquée. La distribution de température dans les parties solides d'une pile SOFC alimentée par des gaz dont les (T_{H_2}/T_{air}) sont plus élevées; 923/873 K, 1123/1073 K et 1143/873 K, a la même allure que celle en absence de la source totale de la chaleur et aucune élévation de température a été remarqué (**Fig. III.21.d, f et h**).

III.1.2. Champ de température pour une cellule SOFC à électrolyte supporté

Effet de (T_{H_2}/T_{air})

Les résultats d'un calcul refait pour une configuration de SOFC à ES montrent qu'il n'y a pas d'effet des valeurs de (T_{H_2}/T_{air}) sur l'allure des champs de température dans une cellule du SOFC. La totalité de l'interconnexion anodique ainsi que la totalité de l'anode sont portées à la température maximale. La propagation de la chaleur se fait vers le côté cathodique de la pile (**Fig. III.22.a, c, e et g**).

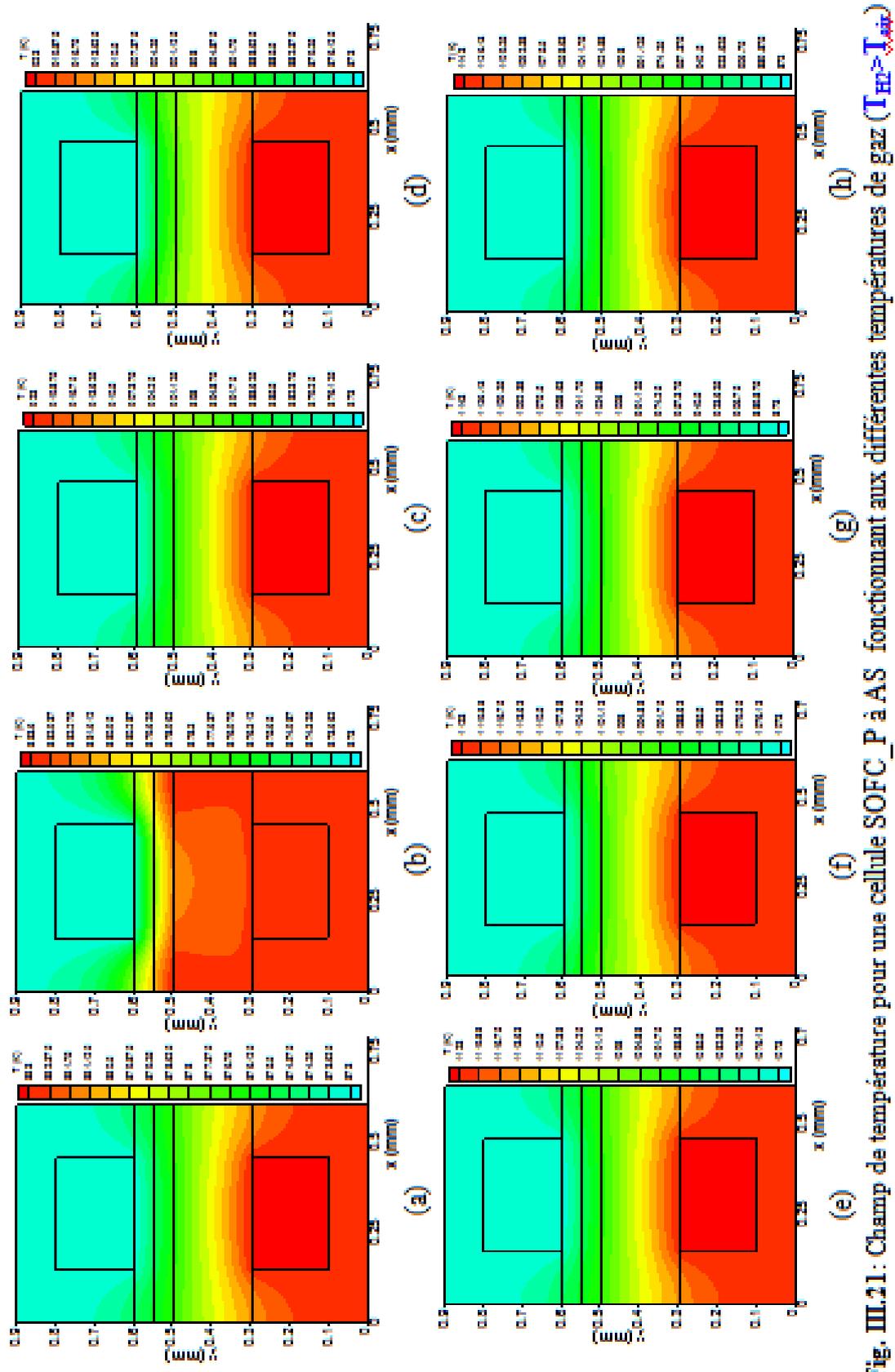


Fig. III.21 : Champ de température pour une cellule SOFC P à AS fonctionnant aux différentes températures de gaz ($T_{H2} > T_{air}$) (a), (c), (e) et (g): Effet des températures des gaz (b), (d), (f) et (h): Effet de la source totale de chaleur

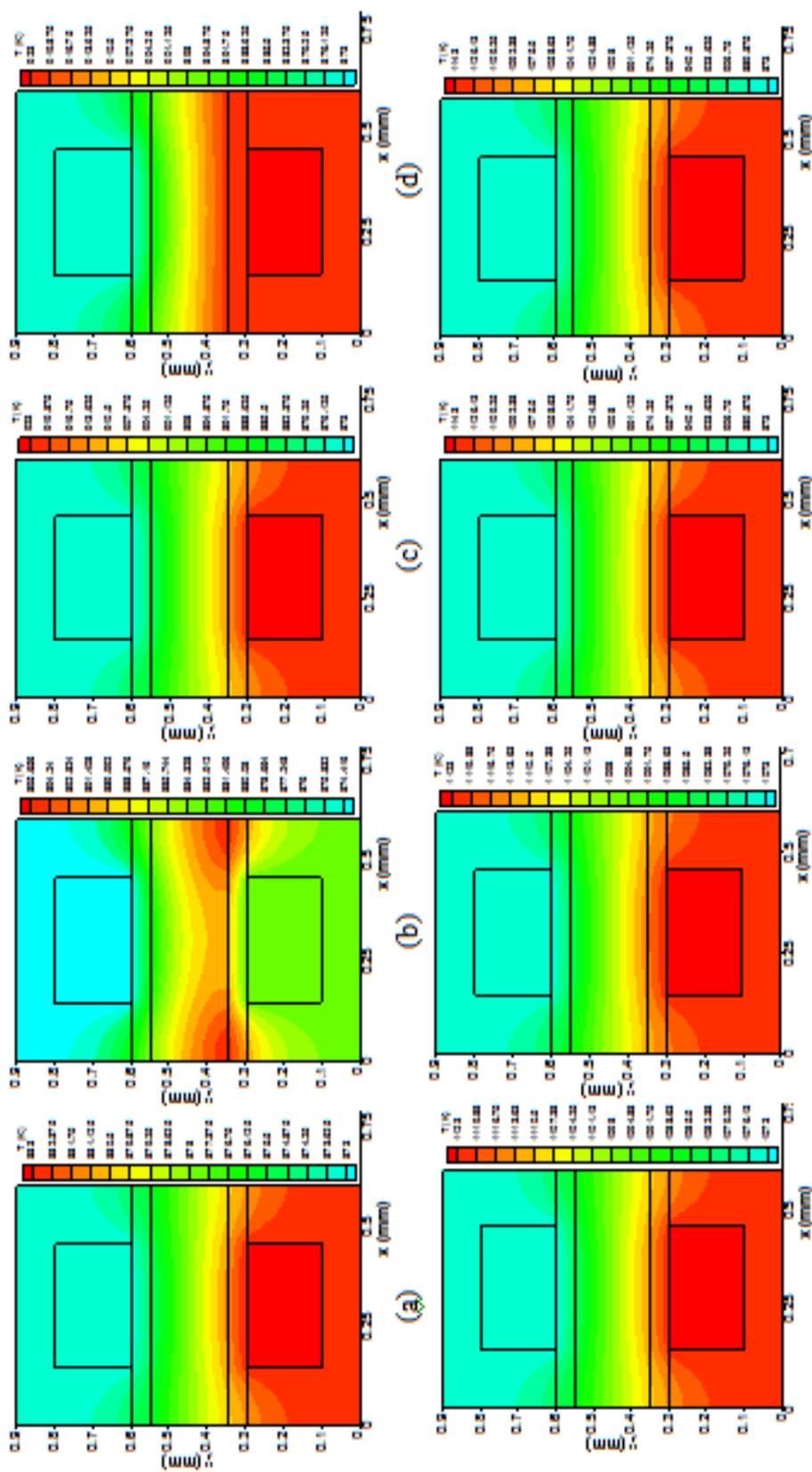


Fig. III.22: Champ de température pour une cellule SOFC à ES fonctionnant aux différentes températures de gaz ($T_{HD} > T_{air}$) (a), (c), (e) et (g): Effet des températures des gaz (b), (d), (f) et (h): Effet de la source totale de chaleur

Effet de la source totale de la chaleur

Une SOFC_P à ES présente une élévation remarquable de la température de l'ordre de 12.66 K aux valeurs moins élevées de (T_{H_2}/T_{air}) ; 883/873 K. Les températures maximales se localisent à l'interface anode électrolyte et dans les régions loin des canaux de part et d'autre de l'interface. On déduit que c'est l'effet de la source de chaleur type chimique qui domine (**Fig.III.22.b**). Dans le reste des cas, où (T_{H_2}/T_{air}) prend les valeurs suivantes; 923/873 K, 1123/1073 K et 1143/873 K, aucune élévations de température n'a été observée sous l'effet de la source totale de chaleur sauf un changement dans l'allure pour des SOFC fonctionnant aux (T_{H_2}/T_{air}) égale à 923/873 K (**Fig. III.22.d**). C'est le cas où les températures de gaz sont moins élevés et présentent une différence de 50 K.

III.1.3. Effet de la configuration géométrique

Une pile SOFC_P fonctionnant avec des (T_{H_2}/T_{air}) où T_{H_2} est supérieure à celle T_{air} présente une même allure pour le champ de température. La totalité de l'interconnexion anodique atteint la température maximale. Cette dernière occupe aussi la totalité de l'anode dans le cas d'une SOFC à ES ou seulement une partie de l'anode pour une SOFC à AS. Une élévation remarquable de température de l'ordre de 12.7 K pour une SOFC à ES contre 0.6 K pour une SOFC à AS (**Fig. III.21 et III.22**).

III.1.4. Performance de la pile

Dans le cas où la température d'hydrogène T_{H_2} est supérieure à celle d'air T_{air} , ($T_{H_2} > T_{air}$), on étudie l'effet des deux valeurs de (T_{H_2}/T_{air}) et l'effet de la source totale de chaleur sur la densité de puissance de SOFC_P à AS et à ES. La plus grande densité de puissance de l'ordre de 0.47 [W/cm²] est obtenue en utilisant une SOFC à AS fonctionnant à la plus haute température. La plus faible valeur est de l'ordre de 0.03 [W/cm²] pour SOFC à ES aux basses valeurs de (T_{H_2}/T_{air}) . Quelques soit les valeurs de (T_{H_2}/T_{air}) , l'effet de la source totale de chaleur sur la performance est négligeable pour une SOFC à AS ou à ES. (**Fig. III.23**).

III.2. Température de l'air est supérieur à celle de l'hydrogène

III.2.1. Champ de température pour une cellule SOFC à anode supportée

Effet de (T_{H_2}/T_{air})

En absence de la source totale de la chaleur, la pile présente une même allure pour le champ de température quelque soit les valeurs des températures; T_{H_2} ou T_{air} (T_{H_2}/T_{air}). La localisation des températures maximales est cette fois ci dans l'interconnexion cathodique. La partie de la cathode en contact avec l'oxygène présente aussi une température maximale. De ces

régions plus chaudes se propage la chaleur vers les autres parties de la pile (Fig. III.24.a, c, e et g).

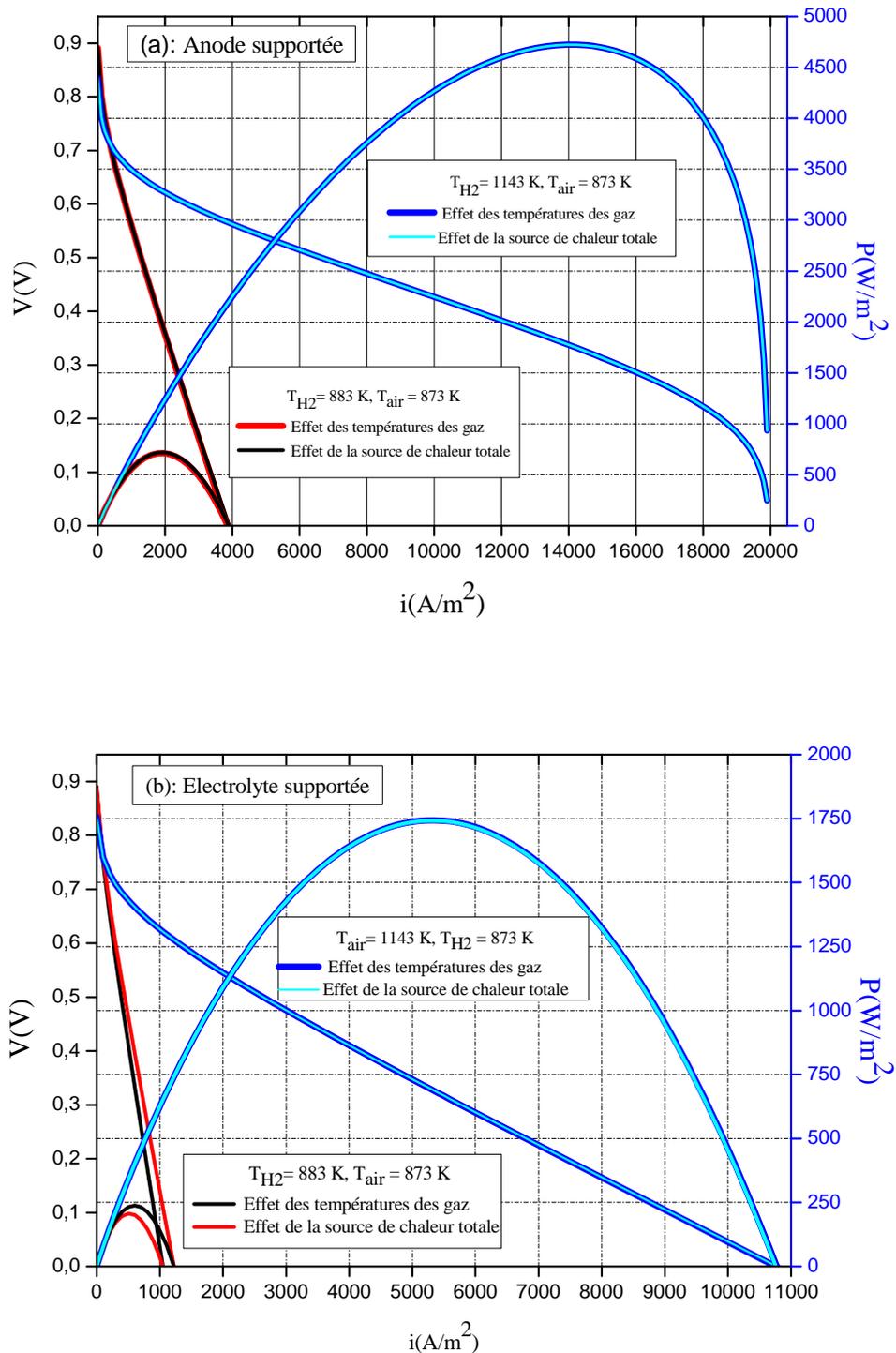


Fig. III.23: Performance d'une SOFC_P: $T_{H_2} > T_{air}$,
 (a): SOFC à AS et (b): SOFC à ES

Effet de la source totale de la chaleur

Sous l'effet de la source totale de chaleur et avec des valeurs moins élevées des températures de fonctionnement de la pile; (T_{H_2}/T_{air} 873/883 K), les températures maximales se localisent dans l'électrolyte loin des canaux. La valeur de l'élévation est de 2.7 K (**Fig. III.24.b**). Pour les valeurs de (T_{H_2}/T_{air}) comme suit; 873/923K, 1073/1123 K et 873/1143K, l'effet de la source totale de chaleur est négligeable sur le champ de température (**Fig. III. 24. d, f et h**).

III.2.2. Champ de température pour une cellule SOFC à électrolyte supporté

Effet de (T_{H_2}/T_{air})

Quelque soit les valeurs de (T_{H_2}/T_{air}) , un même champ de température est obtenue pour les SOFC_P à ES (**Fig. III.25.a, c, e et g**).

Effet de la source totale de la chaleur

C'est toujours aux valeurs moins élevées de (T_{H_2}/T_{air}) que l'effet de la source totale de la chaleur est remarquable pour les SOFC à ES. L'élévation de l'ordre de 8.6 K. Cette dernière occupe les endroits de l'électrolyte loin des canaux. (**Fig. III.25.b**). Aux plus hautes valeurs de (T_{H_2}/T_{air}) , la source de chaleur devient sans effet sur le champ de température (**Fig. III.25.d, f et h**).

III.2.3. Effet de la configuration géométrique

Une pile SOFC_P fonctionnant avec des (T_{H_2}/T_{air}) où T_{H_2} est inférieure à celle de T_{air} présente une même allure pour le champ de température. C'est seulement en présence de la source totale de la chaleur et aux valeurs de (T_{H_2}/T_{air}) moins élevées que la configuration géométrique présente un effet sur l'allure du champ de température ainsi que sur la valeur maximale de la température (**Fig. III.24 et fig. III.25**).

III.3.3. Performance de la pile

Pour une SOFC_P à AS ou SOFC_P à ES, fonctionnant à une $T_{H_2} < T_{air}$, aucun changement n'est porté aux valeurs de la densité de puissance trouvées dans le cas $(T_{H_2} > T_{air})$ quelque soient les valeurs de températures ($T_{H_2}/T_{air} = 873/883$) ou à $(T_{H_2}/T_{air} = 873/1143)$ avec ou sans effet de source totale de chaleur (**Fig. III.26**).

Les Tableaux récapitulatifs (**Tableau III. 5** et **Tableau III. 6**) donnant les valeurs de l'élévation maximale de température et celle de la densité de puissance englobent l'effet de la source totale de chaleur et celle des valeurs de T_{H_2} et de T_{air} dans les deux cas suivants; ($T_{H_2} > T_{air}$) et ($T_{H_2} < T_{air}$). Aux basses valeurs de (T_{H_2}/T_{air}) et pour les deux type de configuration, l'inversement dans les valeurs de (T_{H_2}/T_{air}) influence les valeurs de l'élévation maximale de température (ΔT_{max}). Une élévation de l'ordre de 2.7 K et de 8.6 K au lieu de 0.6 K et de 12.7 K pour les deux cellules à AS et ES respectivement. Dans les deux cas et aux basses valeurs de température, la SOFC à ES donne l'élévation maximale de température (ΔT_{max}). L'inversement dans les valeurs de (T_{H_2}/T_{air}) n'influe pas sur les valeurs de la densité de puissance quelque soit la configuration AS ou ES aux hautes ou basses valeurs de (T_{H_2}/T_{air}).

Tableau III.5: Élévation maximale des températures d'une SOFC_P à AS: $T_{H_2} \neq T_{air}$

T_{H_2} et T_{air} [K]		ΔT_{max} [K]	
		SOFC à AS	SOFC à ES
$T_{H_2} > T_{air}$	883/873	0.60	12.70
	1143/873	0	0
$T_{H_2} < T_{air}$	873/883	2.70	8.60
	873/1143	0	0

Tableau III.6: Densité de puissance d'une SOFC_P à AS: $T_{H_2} \neq T_{air}$

T_{H_2} et T_{air} [K]		Densité de puissance: P [W/cm^2]	
		SOFC à AS	SOFC à ES
$T_{H_2} > T_{air}$	883/873	0.08	0.03
	1143/873	0.47	0.17
$T_{H_2} < T_{air}$	873/883	0.08	0.03
	873/1143	0.47	0.17

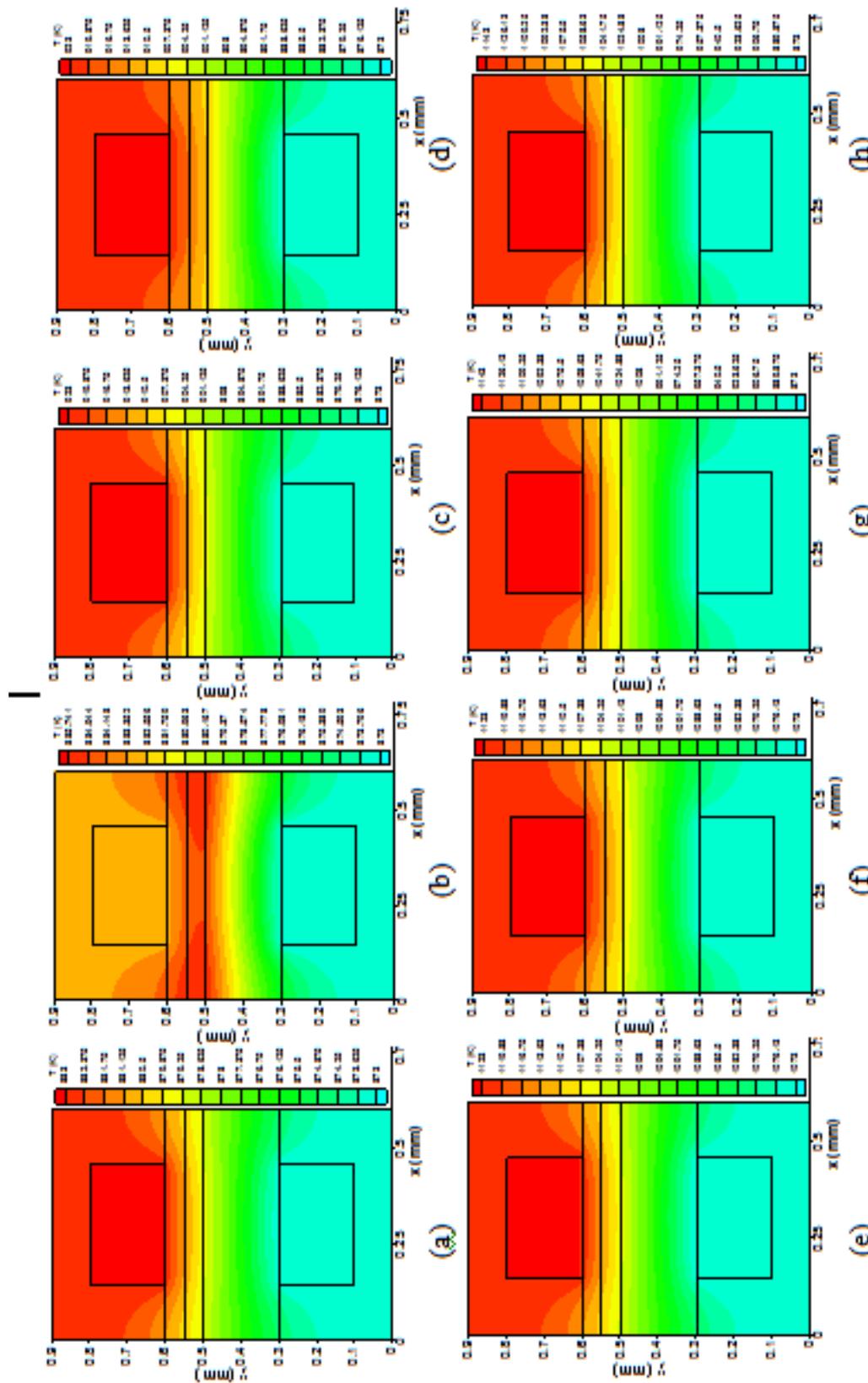


Fig. III.24: Champ de température pour une cellule SOFC à AS fonctionnant aux différentes températures de gaz ($T_{H_2} < T_{air}$) (a), (c), (e) et (g): Effet des température des gaz (b), (d), (f) et (h): Effet de la source totale de chaleur

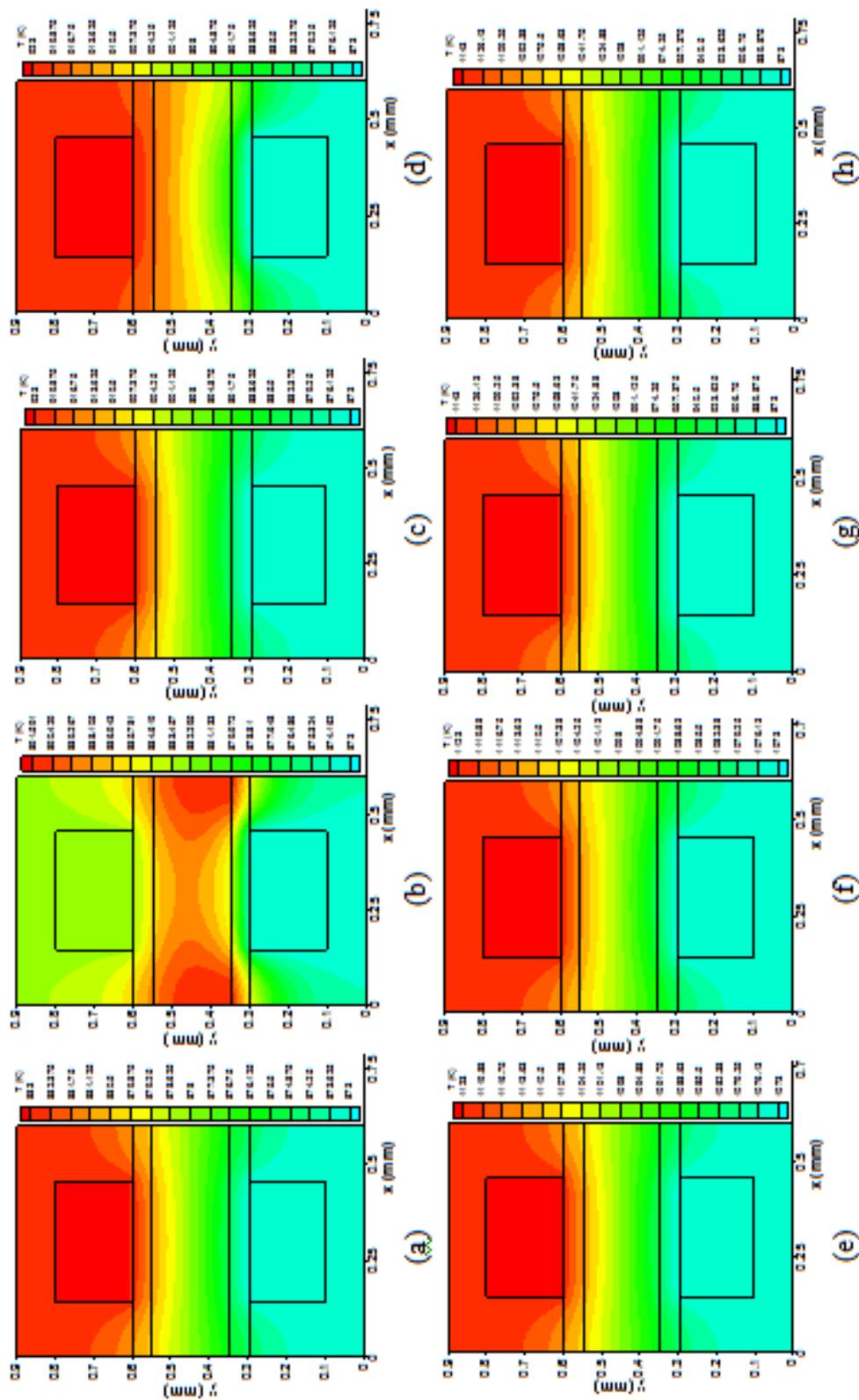


Fig. III.25: Champ de température pour une cellule SOFC à ES fonctionnant aux différentes températures de gaz ($T_{H_2} < T_{aic}$) (a), (c), (e) et (g): Effet des températures des gaz (b), (d), (f) et (h): Effet de la source de chaleur totale

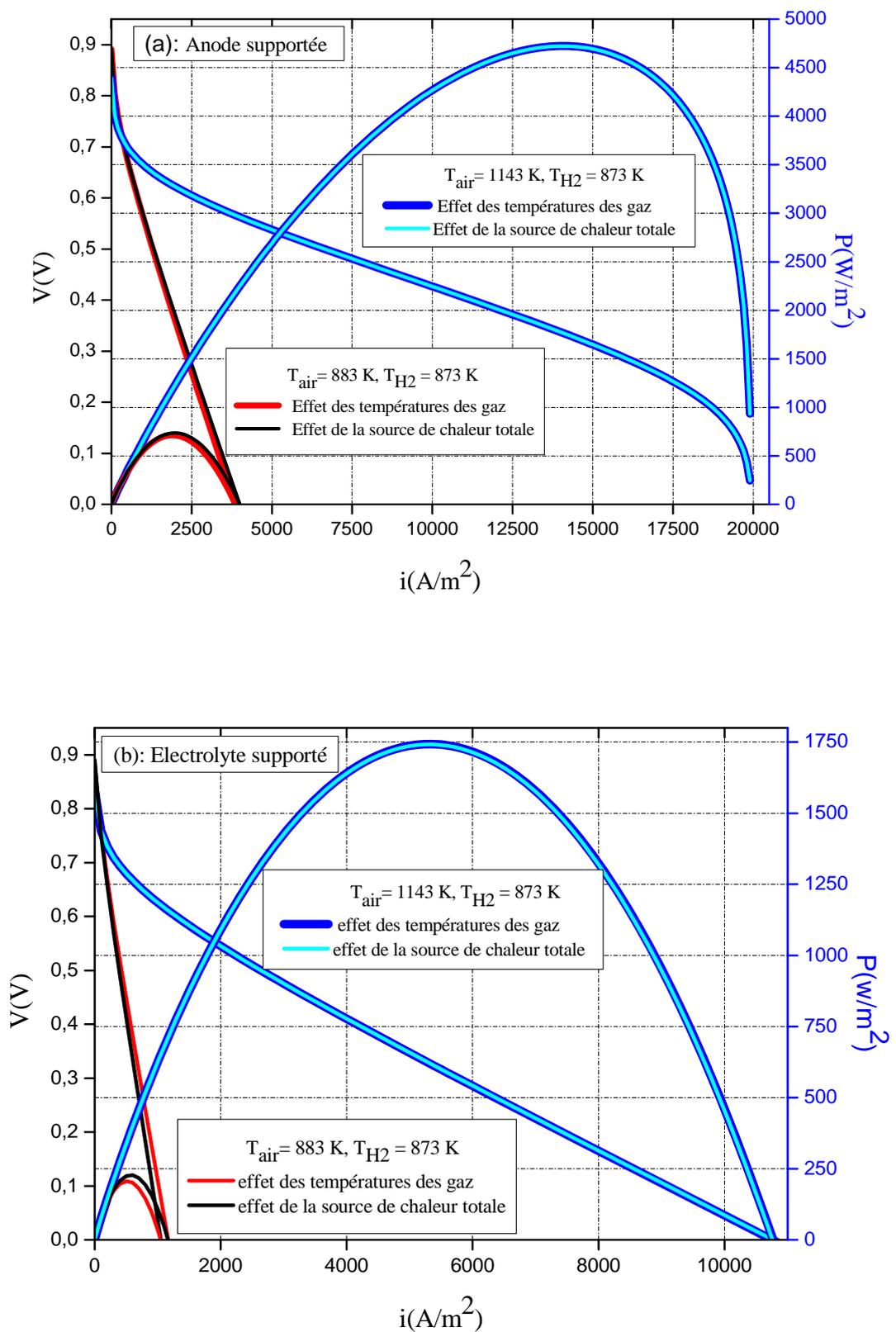


Fig. III.26: Performance d'une SOFC_P: $T_{H_2} < T_{air}$, (a) et (b)

Conclusion

La variété dans les expressions de la source chaleur due à la formation d'eau donne des élévations de température plus au moins élevées.

$T_{H_2} = T_{air}$: L'effet des différentes sources de chaleur est plus important dans une SOFC_P à ES fonctionnant aux mêmes températures de gaz.

C'est la réaction chimique qui dégage plus de chaleur. Les surtensions électriques (concentration et activation) donnent ensemble un minimum de chaleur contrairement à la surtension Ohmique qui donne une chaleur considérable.

$T_{H_2} \neq T_{air}$: A haute température des gaz, la SOFC à AS donne une meilleure densité de puissance ($0.52 \text{ [W/cm}^2\text{]}$ à 1173 K).

L'effet de la source de chaleur est visible aux basses températures des gaz qui ont une différence faible. Si l'une des températures des gaz est plus haute, quelque soit la différence existante entre les températures des gaz, la source totale de chaleur n'a aucun effet.

La plus grande densité de puissance ($0.47 \text{ [W/cm}^2\text{]}$ à $T_{H_2/air} = 873/1143$ et à $T_{H_2/air} = 1143/873$) est obtenue par la SOFC à AS.

Le fonctionnement des SOFC_P à AS ou ES aux températures de gaz plus élevées ($T_{H_2} = T_{air}$ ou $T_{H_2} \neq T_{air}$), élimine l'effet des sources de chaleur.

Ce mémoire s'inscrit dans le cadre des travaux de recherche sur la pile SOFC_P qui se déroule au département de mécanique. Dans cet axe de recherche, nos études portent dans leur majorité, sur la distribution de la température soit en 1-D ou en 2-D. Notre intérêt a été porté au cœur de cette pile où les sources de chaleur sont introduites partiellement. Dans le cas d'une étude portée à la totalité de la cellule SOFC_P, seulement la source de chaleur due à la surtension Ohmique est prise en considération. La porosité des électrodes n'est pas prise en considération.

Ce présent travail vient pour compléter les travaux précédents en prenant en considération:

- Une cellule SOFC complète; deux électrodes, un électrolyte et deux interconnexions.
- La porosité des électrodes.
- Les différents types de source de chaleur:
 - Source de chaleur due aux gaz.
 - Source de chaleur due aux surtensions Ohmiques.
 - Source de chaleur due aux surtensions d'activation et de concentration.
 - Source de chaleur due aux réactions chimiques.

L'étude porte principalement sur ce dernier type de source de chaleur. La bibliographie s'y rapportant révèle diverses expressions qui à leur tour influencent le champ de température et la densité de puissance. Également une investigation bibliographique est portée sur l'équation d'énergie.

A travers cette étude, un couplage des phénomènes de transport de masse, d'énergie en plus de la loi d'écoulement gouvernée par la loi de Darcy ainsi que la tension de la pile est présenté suivant un modèle mathématique bidimensionnel dans une pile SOFC. La méthode adoptée pour résoudre numériquement un tel problème est celle des différences finies. Le champ de température dans toute la pile (l'interconnexion, la cathode, l'anode et l'électrolyte) et la densité de puissance dans chaque cas ont été obtenus en développant un programme informatique (Fortran).

Les principaux résultats obtenus sont:

La diversité des expressions de la source de chaleur due à la formation d'eau donne des élévations de température fluctuante.

Suivant les valeurs de T_{H_2} et T_{air} on a :

1 – Cas $T_{H_2} = T_{air}$:

C'est la réaction chimique qui dégage plus de chaleur. Les surtensions électriques (concentration et activation) donnent un minimum de chaleur contrairement à la surtension Ohmique qui donne une chaleur considérable.

Sous l'action de sources de chaleur, l'élévation des températures est importante dans une SOFC_P à ES.

Aux températures de gaz hautes, l'effet des sources de chaleur est négligeable.

C'est aux températures de gaz hautes que SOFC_P à AS donne une meilleure densité de puissance ($0.52 [W/cm^2]$ à $1173 K$).

2 – Cas: $T_{H_2} \neq T_{air}$:

L'effet de la source de chaleur est lisible aux basses températures des gaz.

Si la valeur de l'une des deux températures de gaz T_{H_2} ou T_{air} est élevée, quelque soit la différence existant entre les températures des gaz, l'effet de la source totale de chaleur n'est pas visible.

C'est aux $T_{H_2/air}$ égale à $873/1143$ ou à $1143/873$ que SOFC_P à AS donne une meilleure densité de puissance ($0.47 [W/cm^2]$). Cette dernière reste inférieure à celle obtenue lorsque les valeurs de $T_{H_2/air}$ sont hautes et de mêmes valeurs.

Cette étude a été couronnée par trois communications orales acceptées par le troisième Workshop international de l'hydrogène (**WIH2'2009**). **29-30 Octobre 2009, Rabat – Morocco.**

H. Abdenebi, B. Zitouni, H. Ben Moussa, D. Haddad. *Etude numérique bidimensionnelle du champ thermique dans une pile à combustible du type SOFC planaire: Effet de la réaction chimique.*

H. Ben moussa, B. Zitouni, D. Haddad, S. Abdessamed, **H. Abdenebi.** *Performance d'une pile à combustible SOFC: Etat d'art et calcul*

B. Zitouni, H. Ben Moussa, D. Haddad, **H. Abdenebi, Y. Sahli.** *Valeur et localisation des températures maximales dans les piles à combustible type SOFC: Effet des surtensions électriques*

Comme perspective, cette étude sera poursuivie en tenant en compte du rayonnement.

-
- [1] Yixin Lu, Laura Schaefer, Peiwen Li. *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
- [2] Qiusheng Wang, Lijun Li, Cheng Wang, *Numerical Study of Thermoelectric Characteristics of a Planar Solid Oxide Fuel Cell with Direct Internal Reforming of Methane*. Journal of Power Sources 186, Issue 2 (2009) 399-407
- [3] Ferguson, J., Fiard, J., Herbin, R.. *Three-dimensional numerical simulation for various geometries of solid oxide fuel cells*. Journal of Power Sources 58 (1996) 109-222.
- [4] Chaisantikulwat, C. Diaz-Goano, E.S. Meadows. *Dynamic modeling and control of planar anode-supported solid oxide fuel cell*. Computers and Chemical Engineering 32 (2008) 2365–2381.
- [5] Anchasa Pramuanjaroenkij, Sadik Kakac, Xiang Yang Zhou. *Mathematical analysis of planar solid oxide fuel cells*. International Journal Of Hydrogen Energy 33 (2008) 2547-2565.
- [6] Xiongwen Zhang, Jun Li, Guojun Li, Zhenping Feng, *Numerical study on the thermal characteristics in a tubular solid oxide fuel cell with indirect internal reformer*. International Journal of Thermal Sciences 48, Issue 4 (2009) 805-814
- [7] K.J. Daun, S.B. Beale, F. Liu, G.J. Smallwood. *Radiation heat transfer in planar SOFC electrolytes*. Journal of Power Sources 157 (2006) 302–310.
- [8] Moussa CHNANI. *Modélisation Macroscopique de piles PEFC et SOFC pour l'étude de leur couplage*. Thèse de doctorat. Institut FEMTO-ST- Département ENISYS UMR CNRS 6174 – UFC – ENSMM – UTBM. 2008.
- [9] M.A. Khaleel, Z. Lin, P. Singh, W. Surdoval, D. Collin. *A finite element analysis modeling tool for solid oxide fuel cell development: coupled electrochemistry, thermal and flow analysis in MARC*. Journal of Power Sources 130 (2004) 136–148.
- [10] 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.
- [11] Masayuki Suzuki, Naoki Shikazono, Koji Fukagata, Nobuhide Kasagi. *Numerical analysis of coupled transport and reaction phenomena in an anode-supported flat-tube solid oxide fuel cel*. Journal of Power Sources 180 (2008) 29–40.
- [12] Vinod M. Janardhanan, Vincent Heuveline, Olaf Deutschmann. *Performance analysis of a SOFC under direct internal reforming conditions*. Journal of Power Sources 172 (2007) 296–307.
- [13] Subhash C Singhal et Kevin Kendall. *High Temperature Solid Oxide Fuel Cells: Fundamentals, Design and Applications*. Elsevier, livre. 2003
- [14] Ed. Frank Kreith. *Mechanical engineering Handbook*.1999
- [15] Suryanarayana Raju Pakalapati. *A new reduced order model for solid oxide fuel cells*. PhD thesis (2006) West Virginia.
- [16] David L. Damm, Andrei G. Fedorov. *Local thermal non-equilibrium effects in porous electrodes of the hydrogen-fueled SOFC*. Journal of Power Sources 159 (2006) 1153–1157.
- [17] 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.

- [18] Yingru Zhao, Congjie Ou, Jincan Chen. *A new analytical approach to model and evaluate the performance of a class of irreversible fuel cells*. International journal of hydrogen energy 33 (2008) 4161 – 4170.
- [19] Xiongwen Zhang, Guojun Li, Jun Li, Zhenping Feng. *Numerical study on electric characteristics of solid oxide fuel cells*. Energy Conversion and Management 48 (2007) 977–989.
- [20] Ying-Wei Kang, 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.
- [21] Yaneeporn Patcharavorachot, Amornchai Arpornwichanop, Anon Chuachuensuk. *Electrochemical study of a planar solid oxide fuel cell: Role of support structures*. Journal of Power Sources 177 (2008) 254–261.
- [22] D. S´anchez, R. Chacartegui, A. Mu˜noz, T. S´anchez. *Thermal and electrochemical model of internal reforming solid oxide fuel cells with tubular geometry*. Journal of Power Sources 160 (2006) 1074-1087.
- [23] Lijin Wang, Huisheng Zhang, Shilie Weng. *Modelling and simulation of solid oxide fuel cell based on the volume–resistance characteristic modeling technique*. Journal of Power Sources 177 (2008) 579–589.
- [24] Yunzhen Yang, Guilan Wang, Haiou Zhang, Weisheng Xia. *Comparison of heat and mass transfer between planar and MOLB-type SOFCs*. Journal of Power Sources 177 (2008) 426–433.
- [25] P. Aguiar, C.S. Adjiman, N.P. Brandon. *Anode-supported intermediate temperature direct internal reforming solid oxide fuel cell. I: model-based steady-state performance*. Journal of Power Sources 138, (2004) 120-136.
- [26] A.C. Burt, I.B. Celik, R.S. Gemmen, A.V. Smirnov. *A numerical study of cell-to-cell variations in a SOFC stack*. Journal of Power Sources 126, Issues 1-2 (2003) 76-87.
- [27] Frano Barbir, PEM Fuel Cells theory and practice, (P: 17-21)
- [28] Yixin Lu. *Numerical Simulation of a Flat Tube High Power Density Solid Oxide Fuel Cell*. PhD Thesis (2005) University of Pittsburgh.
- [29] P. Costamagna, A. Selimovic, M. Del Borghi and G. Agnew. *Electrochemical Model of the Integrated Planar Solid Oxide Fuel Cell (IP-SOFC)*. Chemical Engineering Journal 102 (2004) 61-69.
- [30] E. Hernández-Pacheco, M.D. Mann, P.N. Hutton, D. Singh and K.E. Martin. *A Cell-Level Model for a Solid Oxide Fuel Cell Operated with Syngas from a Gasification Process*. International Journal of Hydrogen Energy 30 N°11 (2005) 1221-1233.
- [31] R. Bove, P. Lunghi and N.M. Sammes. *SOFC Mathematic Model for Systems Simulations. Part One: From a Micro-Detailed to Macro-Black-Box Model*. International Journal of Hydrogen Energy 30 (2005) 181-187.