

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE
SCIENTIFIQUE
UNIVERSITE BATNA 2 Mostefa Benboulaïd
FACULTE DE TECHNOLOGIE
DEPARTEMENT DE GENIE MECANIQUE



THESE

Présentée pour l'obtention du diplôme de docteur en sciences

Spécialité : MÉCANIQUE
Option: ÉNERGÉTIQUE

PAR
TAMERABET Monsaf

THEME

**CONTRIBUTION A L'ETUDE DES TRANSFERTS DE
MASSE ET DE CHALEUR DANS UNE PILE A
COMBUSTIBLE DE TYPE PEMFC**

Soutenue publiquement le 14 / 12 / 2017 devant le jury composé de :

BOUGRIOU Chérif	Prof., Univ. Batna 2	Président
BEN MOUSSA Hocine	Prof., Univ. Batna 2	Rapporteur
ZITOUNI Bariza	Prof., Univ. Batna 1	Examinatrice
BOUGOUL Saadi	Prof., Univ. Batna 1	Examineur
ADOUANE Belgacem	Prof., Univ. Batna 1	Examineur
HADDAD Djamel	M.C.A., Univ. Batna 2	Examineur

*A la mémoire du docteur ZEROUAL
Mostefa*

Remerciements

Je tiens à remercier tous ceux qui ont contribué à ce travail parfois sans le savoir ou du moins, sans mesurer la portée de leur influence.

*Je souhaite d'abord remercier très fortement mon directeur de thèse le Professeur **BENMOUSSA Hocine**, de l'université de MOSTÉFA Benboulaïd-Batna2, pour sa rigueur scientifique, sa très haute qualité d'encadrement et son sens de justesse.*

*Je remercie le Professeur **BOUGRIOU Chérif**, de l'université de MOSTÉFA Benboulaïd-Batna2, de m'avoir fait l'honneur de présider le jury.*

*J'adresse également tous mes remerciements aux Professeurs **BOUGOUL Saadi**, **ADOUANE Belgacem** et **ZITOUNI Bariza**, de l'université HADJ Lakhdar-Batna1, et au Docteur **HADDAD Djamel**, de l'université de MOSTÉFA Benboulaïd-Batna2, d'avoir accepté d'être rapporteurs de ce travail, ainsi que pour leur lecture attentive de ce document.*

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

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

Je remercie infiniment ma famille pour leur soutien et leur encouragement durant ces longues années de mes études.

Monsaf.

Nomenclature

Lettres latine

b	rapport de largeur canal/nervure
C	concentration (kmole/m ³)
D	diffusivité (m ² /s)
E	potentiel (V)
i	densité de courant surfacique (A/m ²)
j	densité de courant volumique (A/m ³)
k	perméabilité (m ²)
N	nombre de tours du canal (Nbr de spires)
p	pression (Pa)
r	rayon(m)
S	terme source
T	température (K)
t	temps (s)
u	vitesse (m/s)

Lettres Grecs

σ	Conductivité électrique (1/ Ω m)
ε	porosité
μ	viscosité dynamique (kg/ms)
θ	angle (rad)
η	surtension (V)
λ	teneur en eau
δ	épaisseur

Indices

a	Anode
act	activation

c	Cathode
diff	diffusion
m	membrane
ohm	Ohmique
r	direction radiale
z	direction verticale
θ	direction angulaire

Abréviations

PEMFC	Pile à combustible à membrane échangeuse de protons (Proton Exchange Membrane Fuel Cell)
GDL	couche de diffusion des gaz (Gas Diffusion Layer)
CL	couche de catalyseur (Catalytic Layer)
H ₂	Hydrogène
H ₂ O	Eau
O ₂	Oxygène
MEA	Ensemble électrodes-membrane

Liste des figures

	page
Fig.1.1. Batterie de gaz voltaïque construite par Sir William Grove.....	05
Fig.1.2. Schéma de Principe de la cellule d'une Pile à Combustible PEMFC.....	11
Fig.1.3. Empilement des Cellules PEMFC.....	12
Fig.1.4. Composants d'une cellule PEMFC	12
Fig.1.5. structure d'une cellule PEMFC.....	12
Fig.1.6. Canal serpentin.....	16
Fig.1.7. Canal serpentin parallèle.....	16
Fig.1.8. Canal mixte Serpentin Parallèle.....	17
Fig.1.9. Plot en carré ou grille.....	17
Fig.1.10. Structure Parallèle.....	18
Fig.1.11. Canaux discontinus.....	19
Fig.1.12. Canal en spirale.....	19
Fig.1.13. Géométrie de section transversale trapézoïdale du canal.....	28
Fig.2.1. domaine d'étude.....	31
Fig.2.2. Directions possibles des écoulements.....	32
Fig.3.1. Présentation du maillage.....	52
Fig.3.2. Volume de contrôle.....	53
Fig.3.3. Maillage décalé ; a) plan (r, θ) .b) plan (r, z) .c) plan (θ, z)	55
Fig.3.4. Algorithme de création de la géométrie et du maillage.....	64

Fig.3.5. Programme de calcul.....	65
Fig.4.1. Plans de présentation des résultats.....	66
Fig.4.2. Vérification de la dépendance des résultats à la taille de la grille.....	67
Fig.4.3. Distributions axiale de la vitesse le long des canaux en spirale.....	68
Fig.4.4. Distributions de la vitesse dans la couche de diffusion.....	69
4.5.a. Distribution de la concentration d'hydrogène dans le MEA (n=6, b=3).....	70
Fig.4.5.b. Distribution de la concentration d'hydrogène à l'interface GDL/CL de l'anode (n=6, b=3)	70
Fig.4.6.a. Distribution axial de la concentration d'oxygène dans le MEA (n=6, b=3)	71
Fig.4.6.b. Distribution axial de la concentration d'oxygène à l'interface GDL/CL de la cathode (n=6, b=3)	71
Fig.4.7.a. Distribution axial de la concentration d'eau dans le MEA (n=6, b=3).....	73
Fig.4.7.b. Distribution de la concentration d'eau à l'interface GDL/CL de la cathode (n=6, b=3)	73
Fig.4.7.c. Distribution de la concentration d'eau dans les canaux (n=6, b=3).....	74
Fig.4.8.a. Distribution de la température dans le cœur de la cellule.....	75
Fig.4.8.b. Distribution de la température à l'interface GDL/CL de la cathode.....	75
Fig.4.9. Effet de la direction d'écoulement sur les performances de la cellule pour N=6, et b=3	77
Fig.4.10.a. Influence de la vitesse d'écoulement sur la répartition d'oxygène dans le MEA.	78
Fig.4.10.b. Influence de la vitesse d'écoulement sur la répartition à l'interface	79

GDL/CL du côté cathodique.

Fig.4.11.a. Influence de la vitesse d'écoulement sur la répartition d'hydrogène dans le MEA.	79
Fig.4.11.b. Influence de la vitesse d'écoulement sur la répartition d'Hydrogène à l'interface GDL/CL du côté anodique.	80
Fig.4.12.a. Influence de la vitesse d'écoulement sur la répartition de température dans le MEA	80
Fig.4.12.b. Influence de la vitesse d'écoulement sur la répartition de température à l'interface GDL/CL du côté cathodique.	81
Fig.4.13. Influence de la vitesse d'écoulement sur la répartition d'eau dans le MEA	82
Fig.4.14. Effet de la vitesse d'écoulement sur les performances de la cellule pour N=6.	82
Fig.4.15. Effet du rapport de largeur sur la répartition de la concentration d'Hydrogène dans la GDL anodique.	84
Fig.4.16. Effet du rapport de largeur sur la répartition de la concentration d'Oxygène à l'interface GDL/CL cathodique.	84
Fig.4.17. Effet du rapport de largeur sur la répartition de la concentration d'eau dans la GDL cathodique.	85
Fig.4.18. Effet du rapport de largeur sur la répartition de température dans le catalyseur cathodique.	85
Fig.4.19. Influence du rapport de la largeur sur les performances de la cellule	86
Fig.4.20. Effet du nombre de tours sur la répartition de la concentration d'Hydrogène dans la GDL anodique.	87
Fig.4.21. Effet du nombre de tours sur la répartition de la concentration	87

d'Oxygène dans la GDL cathodique.

Fig.4.22. Effet du nombre de tours sur la répartition de la concentration d'eau dans la GDL cathodique. **88**

Fig.4.23. Effet du nombre de tours sur la répartition de température dans le catalyseur cathodique. **88**

Fig.4.24. Influence du nombre de tours sur la performance de la cellule (b=3) **89**

Sommaire

	page
Introduction générale	
	1
Chapitre I	
Pile à combustible à membrane échangeuse de protons	
1.1. Introduction	4
1.2. Historique des piles à combustibles	5
1.3. Types de piles à combustibles	7
1.3.1. Piles à combustible alcalines (AFC)	8
1.3.2. piles à combustible à acide phosphorique (PAFC)	8
1.3.3. Piles à combustible à carbonate fondu (MCFC)	8
1.3.4. piles à combustible à oxyde solide (SOFC)	9
1.3.5. Piles à combustible à membrane échangeuse de protons (PEMFC)	9
1.3.6. pile à combustible directe au méthanol (DMFC)	10
1.4. Principe de fonctionnement d'une PEMFC	11
1.5. Structure de la pile à combustible PEMFC	12
1.5.1. Electrolyte	13
1.5.2. Couche Active (catalyseur)	13
1.5.3. Couche de diffusion	13
1.5.4. Plaques Bipolaires	14
1.6. Géométrie des Canaux	15
1.6.1. Canal en serpentin	15
1.6.2. Canal en serpentins parallèles	16
1.6.3. Canal mixte	17
1.6.4. Plot en carré ou grille	17
1.6.5 Structure Parallèle	18
1.6.6. Canaux discontinus	18
1.6.7 Canal en spirale	19
1.7. Performance	20
1.8. Effet de la configuration des plaques bipolaires sur les performances d'une PEMFC.	22

1.8.1.	Effet de la configuration géométrique du canal	22
1.8.2.	Effet de l'installation des obstacles dans le canal	24
1.8.3.	Effet de la largeur et de la profondeur du canal	25
1.8.4.	Effet de la direction d'écoulement	26
1.8.5.	Effet de la forme de la section droite du canal	27

Chapitre II

Formulation mathématique du Problème

2.1.	Introduction	30
2.2.	Domaine d'étude	30
2.3.	Hypothèses simplificatrices	32
2.4.	Formulation mathématique du problème	33
2.4.1.	Modèle hydrodynamique	33
2.4.1.1.	Equation de continuité	33
2.4.1.2.	Equations de la conservation de quantité de mouvement	33
2.4.1.3.	Equation de la conservation d'énergie	35
2.4.1.4.	Equation de la conservation des espèces	36
2.4.2.	Modèle électrochimique	37
2.4.2.1.	Densité de courant volumique	38
2.4.2.2.	Potentiel de la pile	39
2.4.2.3.	Pertes de tension	39
a.	Surtension d'activation	40
b.	Surtension ohmique	41
c.	Surtension de diffusion	43
2.5.	Conditions initiales et aux limites	44
2.5.1.	Conditions initiales	44
2.5.2.	Conditions d'entrée	45
2.5.3.	Conditions de sortie	45
2.5.4.	Surfaces externes	46

Chapitre III

Résolution Numérique

3.1.	Introduction	47
3.2.	Algorithme de Résolution des équations de Navier-Stocks	48

3.3. Maillage du domaine et discrétisation des équations	51
3.3.1. Principe de la méthode des volumes finis	51
3.3.2. maillage	52
3.3.3. Application à l'intégration d'une équation de transport-diffusion.....	55
3.3.4. Discrétisation des différents termes de l'équation de transport-diffusion	56
3.3.4.1. Discrétisation temporaire	56
3.3.4.2. Discrétisation spatiale	56
3.3.4.3. Terme source	58
3.3.5. Assemblage du système algébrique discret	59
3.3.6. Discrétisation de l'équation de transport	60
3.4 Résolution du système algébrique discret	61
3.4.1. Méthode ADI	61
3.4.2. Résolution de l'équation de pression	63

Chapitre IV

Résultats et discussions

4.1. Introduction	66
4.2 Influence du maillage sur les résultats de simulation	67
4.3. Distribution de la vitesse	68
4.4. Distribution des concentrations des réactifs	69
4.5. Distribution de la concentration d'eau	72
4.6. Distribution des températures	74
4.7 Effet des différents paramètres sur les performances de la cellule	76
4.7.1. Effet de la direction d'écoulement	76
4.7.2. Effet de la vitesse d'écoulement	78
4.7.3. Effet du rapport de largeur	83
4.7.4. Effet du nombre de tours	86

Conclusions et perspectives

90

Références bibliographiques

92

Introduction générale

Au cours du dernier siècle, à cause de l'augmentation de la population mondiale et de l'industrialisation massive, le monde a commencé de consommer les ressources d'énergie d'une manière croissante qui va entraîner, non seulement l'épuisement des gisements des énergies fossiles, mais elle va provoquer une crise environnementale : pollution et réchauffement climatique.

Afin de minimiser les effets des futures crises énergétique et environnementale, il est indispensable de développer d'autres alternatives énergétiques telles que les énergies renouvelables et nouvelles. Les piles à combustibles sont l'une des technologies efficaces de la production d'énergie d'une manière propre ; ce sont des dispositifs qui convertissent directement l'énergie d'une réaction chimique en énergie électrique sans le passage par l'énergie mécanique. La filière des piles à combustibles contient plusieurs types qui peuvent être classés selon la nature de leur électrolyte ou leur température de fonctionnement. Parmi ces types, on trouve les piles à combustibles à membrane échangeuse de proton (PEMFC) qui fait l'objectif de notre travail.

La configuration des plaques bipolaires est l'un des facteurs les plus importants qui influent sur les performances d'une pile à combustible PEMFC. L'optimisation des paramètres géométriques des canaux tels que la longueur, la largeur et la profondeur du canal, ainsi que la forme de sa section transversale, peut améliorer les performances de la pile à combustible.

L'objectif de notre travail est de développer un modèle numérique tridimensionnel en régime transitoire pour les phénomènes de transfert de masse et de chaleur, et d'étudier l'influence de la vitesse d'écoulement des gaz dans les canaux ainsi que l'influence de la forme géométrique des canaux eux-mêmes sur les performances d'une cellule de pile de type PEMFC. La forme des canaux en spirale est employée pour

réaliser cette étude paramétrique. Ce travail est une continuité de nos travaux de recherche sur la pile à combustible à membrane échangeuse de proton PEMFC planaire effectués dans le cadre du mémoire de magistère.

Après l'introduction, on trouve un premier chapitre qui est consacré à la présentation des généralités sur les piles à combustible, le principe de fonctionnement des piles de type PEMFC et finalement, une étude bibliographique sur l'influence de la configuration des plaques bipolaires sur les phénomènes de transfert de masse et de chaleur dans une PEMFC.

Le deuxième chapitre étudie en détail la formulation mathématique des phénomènes de transfert de masse et de chaleur dans une pile à combustible de type PEMFC. Ainsi, un modèle tridimensionnel, non isotherme, monophasique et instationnaire d'une pile à combustible à membrane échangeuse de protons (PEMFC) avec des canaux d'écoulements en spirale est employé pour décrire les effets des paramètres géométriques des plaques bipolaires sur la distribution des températures, les concentrations des réactifs, ainsi que sur les performances de la cellule.

Le troisième chapitre est dédié à la présentation de la méthode numérique employée pour la résolution numérique. Les équations gouvernantes du problème ont été discrétisées en utilisant la méthode des volumes finis en coordonnées cylindriques avec un schéma en puissance pour l'espace et un schéma implicite pour le temps. Afin de diminuer l'ordre des systèmes d'équations algébriques résultants de la discrétisation des équations de conservation, on a employé la méthode ADI (alternating direction implicit). Les systèmes tri-diagonaux ainsi obtenus, ont été résolus à l'aide de la méthode de Thomas. Le problème de couplage pression-vitesse a été résolu par la méthode des projections. La méthode de Gauss-Seidel a été employée pour résoudre l'équation de pression discrétisée qui prend la forme de l'équation de Poisson. Enfin, un programme FORTRAN a été développé pour construire la géométrie, générer le maillage du domaine de calcul et résoudre les systèmes d'équations algébriques obtenus de la discrétisation des équations gouvernantes du problème.

Enfin, dans le quatrième chapitre, la présentation et l'analyse des résultats ont été faites. Les effets de la vitesse d'écoulement, la largeur des canaux, le nombre de tours du canal en spirale et la direction d'écoulement sur les processus de transfert de masse et de chaleur ont été discutés.

Les résultats de ce travail ont fait l'objet de plusieurs publications et participations dans des conférences de la part de :

- 1- **M. Tamerabet**, H. Ben Moussa, Y. Sahli, A. Mohammedi/ Unsteady three-dimensional numerical study of mass transfer in PEM fuel cell with spiral flow field/ International Journal of Hydrogen Energy 42(2017)1237-1251.
- 2- **M. Tamerabet**, A. Mohammedi, H. Ben Moussa/ Effect of the Channel cross Section Shape on the Mass Transfer in a Tubular PEM Fuel Cell with Twisted Flow Field/ International Symposium on Sustainable Hydrogen (ISSHZ' 2016), Algiers-Algeria, October 05-06-2016.
- 3- M. Zeroual, H. Ben Moussa, **M. Tamerabet** / Effect of gas flow velocity in the channels on consumption reactants in a fuel cell type (PEMFC)/ Energy Procedia 18(2012)317-326.
- 4- M. Zeroual , **M. Tamerabet**, H. Benmoussa , H. Bougettaia/ Effect of the chicane installed in the flow channel on the reactants consumption in a protons exchange membrane fuel cell (PEMFC)/ International Journal of Chemical and Environmental Engineering / December 2011, Volume 2, No.6.
- 5- **M. Tamerabet**, M. Zeroual, H. Ben Moussa, M. Zereg / Influence des écoulements dans les canaux sur la consommation des réactifs dans une pile à combustible de type (PEMFC). / WERA'10, 28-29 septembre 2010 à l'université de Batna-Algerie.

CHAPITRE I

Pile à combustible à membrane échangeuse de protons

1.1. Introduction

Les piles à combustible sont des dispositifs électrochimiques qui convertissent en continu et directement l'énergie libre d'une réaction chimique en énergie électrique; les sous-produits sont la chaleur et la vapeur d'eau si les réactifs sont l'hydrogène et l'oxygène [1-3]. Dans certains types de piles à combustible, les sous-produits supplémentaires peuvent être du dioxyde de carbone et d'autres formes d'hydrocarbures en fonction des combustibles fossiles utilisés [2]. La pile à combustible est intéressante non seulement par son rendement plus élevé par rapport aux convertisseurs thermiques conventionnels (moteur à combustion interne, turbine) mais encore par son faible impact environnemental.

Une pile à combustible se compose de deux électrodes poreuses, l'anode et la cathode, séparées par un électrolyte permettant un transfert d'ions entre les électrodes. L'anode est alimentée par un combustible gazeux, à savoir l'hydrogène, et la cathode par un oxydant qui généralement, l'oxygène. À l'anode, le carburant se dissocie en ions et en électrons. Ces derniers passent par le circuit externe pour fournir le courant électrique tandis que les ions se déplacent à travers l'électrolyte vers l'électrode opposée, selon la nature de l'électrolyte. La chaleur et l'eau sont obtenues grâce aux différentes réactions

produites aux électrodes. Puisqu'une cellule produit approximativement un volt au chargement complet, les cellules sont empilées en série pour produire des tensions utilisables.

1.2. Historique des piles à combustibles

Au début du XIX^{ème} siècle, M. Henry David a annoncé le principe de l'électrolyse inverse, mettant en évidence la possibilité de générer de l'électricité par le processus d'une réaction chimique entre l'oxygène et l'hydrogène. La première pile à combustible de base a été inventée par Sir William Grove en 1839 et a été appelée une "batterie voltaïque gazeuse". Dans son expérience, Grove a utilisé des électrodes en platine et l'acide sulfurique comme électrolyte, avec de l'hydrogène et de l'oxygène comme réactifs [4-6]. Le principe de base de cette première pile à combustible était d'obtenir de l'électricité et de l'eau en inversant la procédure d'électrolyse comme le montre la figure 1.1.

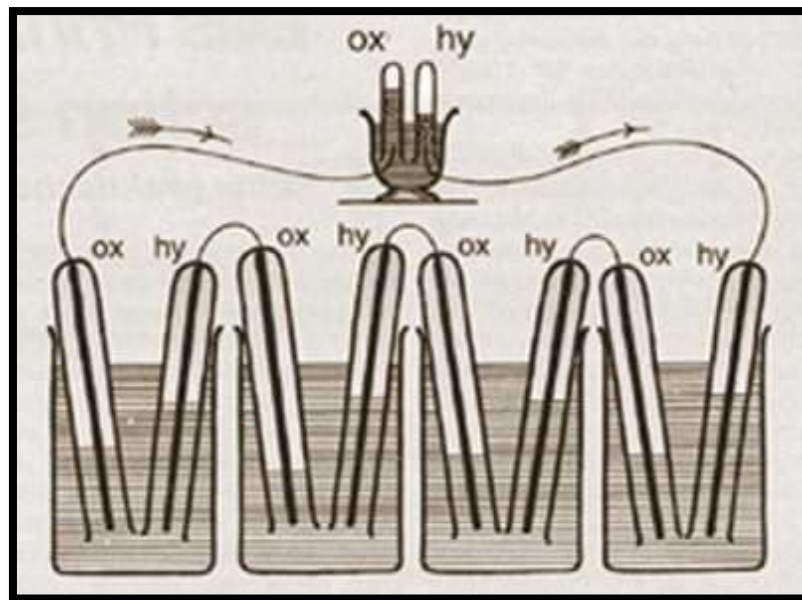


Figure. 1.1 : Batterie de gaz voltaïque construite par Sir William Grove.

Grove a conclu que la pile à combustible alimentée en oxygène et en hydrogène donne la meilleure performance, qui peut s'améliorer en augmentant la concentration

d'oxygène. En 1845, il a présenté les résultats d'expériences supplémentaires et a suggéré d'utiliser un appareil à piles à combustible en tant que compteur d'humidité de l'air [4,6]. En 1854, après de nombreuses tentatives avec d'autres gaz et liquides livrés à l'anode, Grove a proposé d'utiliser un petit dispositif alimenté par de l'hydrogène gazeux comme source d'électricité. Le dispositif proposé était comparable à une batterie ordinaire.

En 1882, Lord Rayleigh a proposé un changement technique pour améliorer l'efficacité de la batterie de gaz en augmentant considérablement la surface de contact entre l'électrode de platine et les gaz livrés. Rayleigh a utilisé deux mailles de platine d'une superficie d'environ 130 cm², exposant l'électrolyte cathodique à l'air libre. En 1889 [4], Mond et Langer ont apporté des perfectionnements dans la pile, notamment avec l'introduction de catalyseurs en noir de platine et des électrolytes à base de matrices poreuses en plâtre ou en amiante [6]. Ce sont eux qui ont donné le nom actuel à cet appareil : "la pile à combustible". En 1937, Francis T. Bacon a commencé à travailler sur les piles pratiques à combustible et à la fin des années cinquante, il avait développé une pile de 40 cellules capable de produire une puissance de 5 kW. Ainsi, la pile a pu alimenter une machine à souder, une scie circulaire et un chariot élévateur [3]. Au début des années 1960, la pile à combustible à membrane échangeuse de proton (PEMFC) a été inventée, grâce aux travaux de Thomas Grubb et Leonard Niedrach. Au début, ils ont utilisé des membranes de polystyrène sulfonées comme électrolytes solides, mais celles-ci ont été rapidement remplacées par des membranes Nafion en 1966. La membrane Nafion s'était révélée supérieure en performance et durabilité et elle est encore la membrane la plus populaire actuellement utilisée. La technologie des piles à combustible PEM a servi dans le cadre du programme Gemini (1950-1970) de la NASA, dont l'objectif principal était de tester l'équipement et les procédures d'Apollo. Les piles à combustible PEM de "General Electric" ont été sélectionnées, mais la première cellule modèle PB2 a rencontré plusieurs fois des difficultés techniques, y compris la contamination cellulaire interne et la fuite d'oxygène à travers la membrane. Gemini I à

IV ont volé avec des batteries au lieu des piles à combustible PEM. En raison des dysfonctionnements et des mauvaises performances du PB2, un nouveau modèle le P3, a été conçu. La première mission d'utilisation des PEMFC a été Gemini V. Cependant, ils ont été remplacés par des piles à combustible alcalines dans le programme Apollo et dans la navette spatiale. Ce qui a eu pour conséquence, un retard dans le développement des piles à combustible PEM pendant une décennie [3]. En raison de leur coût élevé, les systèmes de piles à combustible étaient limités aux missions spatiales et à d'autres applications spéciales. Ce n'est qu'à la fin des années 1980 et au début des années 1990 que la recherche de "Ballard Power Systems", société fondée en 1979, a donné lieu à une résurgence de l'intérêt porté aux PEMFC. Les piles à combustible ont commencé à être commercialisées dans diverses applications en 2007, quand elles ont commencé à être vendues à des utilisateurs finaux avec des garanties écrites et une capacité de service tout en répondant aux codes et aux normes des marchés dans lesquels elles ont été vendues.

1.3. Types de piles à combustibles

Les différents types de piles peuvent être classés selon la nature de leur électrolyte qui détermine les caractéristiques clés de la cellule, telle que la température de fonctionnement, le temps de mise sous tension, le type de carburant, les ions de migration et la résistance aux chocs. Toutefois, Une exception dans cette classification est faite pour la pile de type DMFC (Direct Methanol Fuel Cell) qui est en fait une PEMFC mais utilisant comme carburant du méthanol qui est directement envoyé à l'anode. Les principaux types de piles à combustible sont :

- Les piles à combustible à membrane à échange de protons (PEMFC),
- Les piles à combustible au méthanol direct (DMFC);
- Les piles à combustible alcalin (AFC)
- Les piles à combustible à acide phosphorique (PAFC) ;
- Les piles à combustible à base de carbonate fondu (MCFC) et

- Les piles à combustible à oxyde solide (SOFC).

Une autre caractéristique utilisée pour classifier les piles est leur température de fonctionnement; haute, moyenne ou basse température.

1.3.1. Les piles à combustible alcalines (AFC)

L'électrolyte utilisé dans les piles à combustible alcalines est une solution alcaline comme son nom indique. Il en existe trois types: les piles à électrolyte mobile, à électrolyte statique et à combustible dissous. Les deux premiers sont utilisés dans le programme spatial. Les AFC présentent des avantages majeurs tels que leur faible potentiel d'activation à la cathode, leur tension de fonctionnement relativement élevée (0,875 V), leur matériau d'électrolyte peu coûteux et les électrodes qui peuvent être fabriquées à partir de métaux non précieux et ne nécessitant pas de plaques bipolaires. En outre, le problème de gestion de l'eau est plus simple que le dans les PEMFC. Parmi les inconvénients majeurs des AFC, on cite: la faible densité de puissance et l'empoisonnement de la pile à combustible par le CO₂.

1.3.2. piles à combustible à acide phosphorique (PAFC)

Les PAFC utilisent de l'acide phosphorique concentré comme électrolyte. La matrice utilisée pour retenir l'acide est habituellement du carbure de silicium, le platine est utilisé comme électro-catalyseur dans les deux électrodes. Les piles à acide phosphorique fonctionnent généralement à une température variant entre 150 °C et 220 °C [1].

1.3.3. Piles à combustible à carbonate fondu (MCFC)

Elles ont un électrolyte composé d'une combinaison de carbonates alcalins (Li, Na, K), qui est retenu dans une matrice céramique de LiAlO_i. A des températures de fonctionnement comprises entre 600 °C et 700 °C, les carbonates forment un sel fondu hautement conducteur, avec des ions carbonate fournissant une conduction ionique. A

de telles températures élevées de fonctionnement, les catalyseurs de métaux nobles ne sont généralement pas nécessaires [1].

1.3.4. piles à combustible à oxyde solide (SOFC)

Les SOFC utilisent un oxyde métallique solide non poreux, généralement ZrO₂ stabilisé au Y₂O₃ (YSZ) comme électrolyte. Ces cellules fonctionnent à des températures comprises entre 800 °C et 1000 °C où se produit la conduction ionique par des ions d'oxygène. De façon similaire à la MCFC, ces piles à combustible sont destinées à la production d'électricité stationnaire.

1.3.5. Piles à combustible à membrane échangeuse de protons (PEMFC)

Elles utilisent une membrane polymère conductrice de protons comme électrolyte. Le catalyseur est typiquement du platine supporté sur du carbone avec des charges d'environ 0,3 mg/cm² et leur température de fonctionnement est généralement comprise entre 80°C et 90°C. Les piles à combustible PEM sont un candidat sérieux pour les applications automobiles, d'alimentation d'appareils portables et pour la production d'électricité stationnaire distribuée à petite échelle [1].

La pile du type PEMFC présente plusieurs avantages par rapport aux autres types de piles: sa basse température de fonctionnement, sa densité de puissance relativement élevée (1.3 kw/l de combustible) [7], sa taille relativement réduite, son temps de démarrage relativement court, ainsi que l'intérêt potentiel qu'elle présente dans de multiples applications.

De grands efforts de recherche et de développement dans le monde sont actuellement concentrés sur la technologie des PEMFC. Les objectifs sont d'améliorer les performances, le rendement, la fiabilité et la durée de vie, et de diminuer le coût des composants qui contiennent des métaux précieux. Le choix s'est porté sur cette technologie pour plusieurs raisons [8]:

- La densité de puissance élevée qui est de l'ordre de 1W/cm²;

- Le rendement qui peut aller jusqu'à 60% pour la pile et à 40% pour le système;
- La basse température de fonctionnement, inférieure à 100°C, laisse envisager une technologie simplifiée pour assurer un démarrage rapide;
- Ce type de piles est insensible à la présence de CO₂ dans l'air contrairement à la filière alcaline;
- L'utilisation d'un électrolyte solide présente l'avantage de l'absence du liquide corrosif, ce qui peut envisager une durée de vie sensiblement supérieure aux filières à électrolyte liquide.

1.3.6. Pile à combustible au méthanol direct (DMFC)

Parfois, une pile DMFC est classée comme un type différent de pile à combustible. Cependant et selon la catégorisation précédente basée sur l'électrolyte, c'est essentiellement une pile à combustible à membrane polymère qui utilise du méthanol au lieu de l'hydrogène comme combustible.

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

1.4. Principe de fonctionnement d'une PEMFC

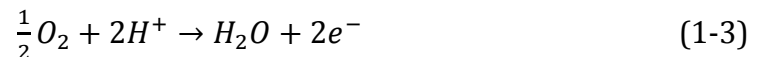
Il s'agit d'une combustion électrochimique d'hydrogène et d'oxygène, avec production simultanée d'électricité, d'eau et de chaleur (figure1.2) selon la réaction chimique de fonctionnement de la pile :



L'hydrogène H_2 amené sur l'anode, se transforme en protons H^+ et libère des électrons qui seront captés par l'anode :



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



Le transfert de protons et d'électrons vers la cathode produit un courant électrique continu. Cependant, la tension produite par cellule ne dépasse pas 1 V. Ce qui nous conduit à conclure qu'il faut un grand nombre de cellules placées en série pour obtenir la tension requise (figure1.3).

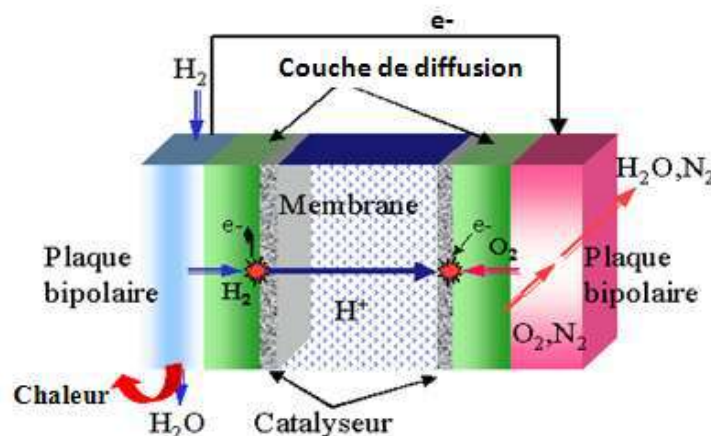


Figure. 1.2 : Schéma de principe de la cellule d'une Pile à Combustible PEMFC [8].

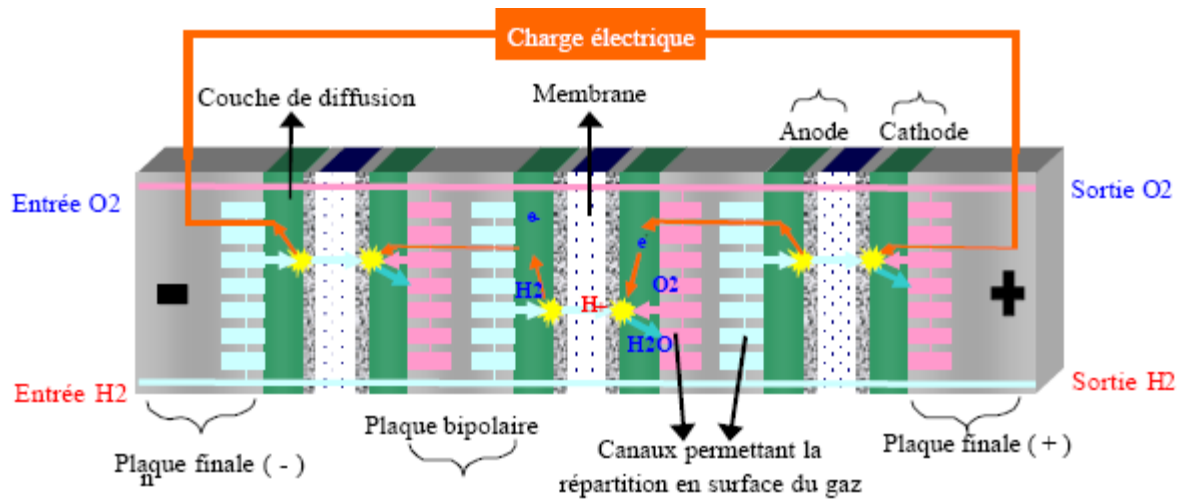


Figure. 1.3: Empilement des cellules PEMFC [8].

1.5. Structure de la pile à combustible PEMFC

La cellule de type PEMFC est constituée d'une membrane qui joue le rôle d'électrolyte, de deux couches catalytiques qui représentent les électrodes, de deux couches de diffusion et de deux plaques bipolaires.

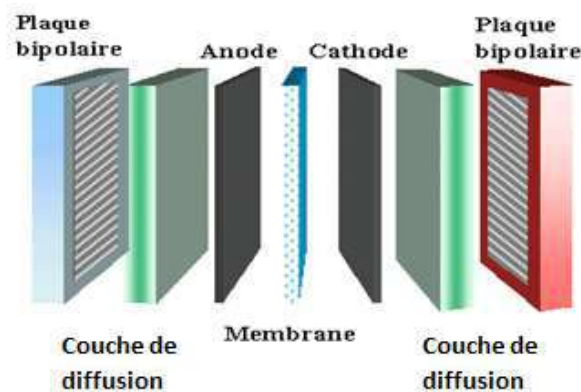


Figure. 1.4: Composants d'une cellule PEMFC

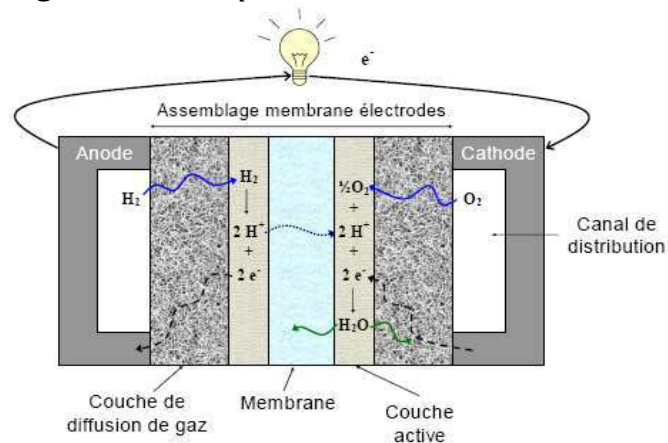


Figure. 1.5 : Structure d'une cellule PEMFC

1.5.1. Électrolyte

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

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

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

1.5.2. Couche Active (catalyseur)

La zone active, qui est le siège des deux demi-réactions d'oxydoréduction, est celle du couplage des phénomènes électrique, chimique et de transfert de masse. La condition nécessaire pour que se produisent les réactions, est la coexistence au même point du gaz réactif, des protons et des électrons. La zone active est donc un milieu polyphasique constitué des pores qui permettent l'alimentation en gaz, de l'électrolyte qui assure la continuité ionique, du carbone qui garantit la conductivité électronique et du platine qui agit comme catalyseur de la réaction électrochimique [1, 8].

1.5.3. Couche de diffusion

La couche de diffusion des gaz dans les piles à combustible PEM est une couche poreuse située entre celle du catalyseur et la plaque bipolaire. Elle est constituée soit d'un papier carboné poreux ou bien, d'un tissu de carbone d'une épaisseur comprise entre 0.1 et 0.3 mm. La couche de diffusion des gaz contribue à la gestion de l'eau en

permettant à une quantité appropriée d'eau d'atteindre la membrane et de la maintenir en état d'hydratation. Elle a plusieurs fonctions [1, 7]:

- fournir un chemin pour les réactifs des canaux d'écoulement pour atteindre la couche de catalyseur ;
- fournir un chemin pour l'eau produite dans la couche de catalyseur pour arriver aux canaux d'écoulement ;
- fournir un appui mécanique au cœur de la pile, constitué des deux couches de catalyseur et la membrane, dans le but de l'empêcher de fléchir dans les canaux d'écoulement ;
- elle sert également à transporter la chaleur produite par les réactions électrochimiques dans la couche de catalyseur vers la plaque bipolaire.

En outre, la couche de diffusion des gaz relie électriquement la couche de catalyseur à la plaque bipolaire jouant ainsi le rôle du conducteur électrique qui transporte les électrons vers et depuis la couche de catalyseur pour accomplir le circuit électrique.

1.5.4. Plaques Bipolaires

La plaque bipolaire qui constitue une barrière étanche qui sépare les cellules d'un empilement, doit être inerte chimiquement dans ce milieu très acide et étanche et avoir une bonne conductivité électrique et thermique. Les plaques bipolaires ont plusieurs fonctions [7, 8]:

- elles relient les cellules en série entre elles;
- elles doivent être imperméables aux gaz afin de les séparer des cellules adjacentes ;
- elles doivent être légères et avoir une certaine rigidité pour pouvoir fournir un appui structurel pour la pile ;

- elles doivent avoir une bonne conductivité thermique permettant un refroidissement de la pile ;
- elles servent de logement aux canaux d'écoulement.

1.6. Géométrie des Canaux

La géométrie des plaques bipolaires est très importante pour définir les performances d'une pile à combustible. Les piles PEMFC fonctionnent à des niveaux de pression et de température réduits, favorisant ainsi l'apparition d'écoulements diphasiques eau/gaz à l'intérieur des structures de distribution des réactifs aux électrodes. Ces distributeurs sont constitués de canaux usinés dans les plaques bipolaires. Leur rôle est d'assurer une répartition homogène des gaz sur les électrodes, afin de garantir une utilisation optimale de leur surface active [2]. Les expériences effectuées jusqu'à présent ont permis d'identifier les régimes d'écoulement qui se rencontrent à l'intérieur des canaux de distribution et de mettre en évidence les effets sur la réponse électrique. Ainsi, les principaux modes d'écoulement diphasiques habituellement rencontrés dans une conduite horizontale se retrouvent ici, mais avec quelques spécificités liées à la taille réduite des canaux qui favorise les effets capillaires. En fonction de la nature du fluide, gaz ou liquide, et de la concentration des réactifs, la géométrie du canal peut être différente sur l'anode et sur la cathode. Ainsi, différentes géométries de canaux de circulation peuvent être définies [1].

1.6.1. Canal en serpent

La structure en serpent représentée dans la figure. 1.6 est largement utilisée car elle assure un chemin préférentiel à travers le système. Aucun canal n'est fermé, ce qui rend la formation d'un bouchon dans le fluide plus difficile. Cependant, cette structure qui est plus difficile à fabriquer, est responsable des chutes de pression. Les résultats des travaux d'optimisation sur les canaux serpents ont été révélés par Watkins et al. (1991). Ils prétendent que les gammes les plus préférées sont de: 1.14 à 1.4 millimètres pour la largeur du canal, de 0.89 à 1.4 millimètres pour l'épaisseur des

nervures et de 1.02 à 2.04 millimètres pour la profondeur du canal. L'inconvénient des systèmes à serpentins réside dans la longueur du chemin parcouru ainsi que le grand nombre de coudes, ce qui nécessite un travail supplémentaire pour faire passer les gaz dans les canaux [2].

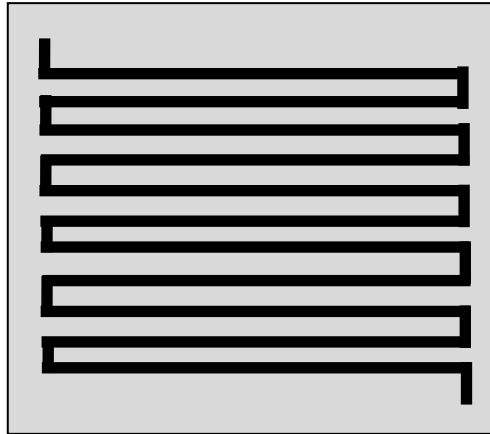


Figure. 1. 6: Canal en serpentin

1.6.2. Canal en serpentins parallèles

La structure serpentine parallèle (Figure. 1.7), qui force les gaz à traverser une couche de diffusion, peut être avantageuse pour les gaz purs. Cependant, elle n'est pas celle préférée à cause des blocages dus à la formation des gouttelettes d'eau et à la perte de charge importante. La formation des bouchons dans les canaux, due à l'évacuation inefficace de l'eau à cause de la distribution inégale des flux entre les canaux parallèles, présente l'inconvénient majeur de cette configuration.

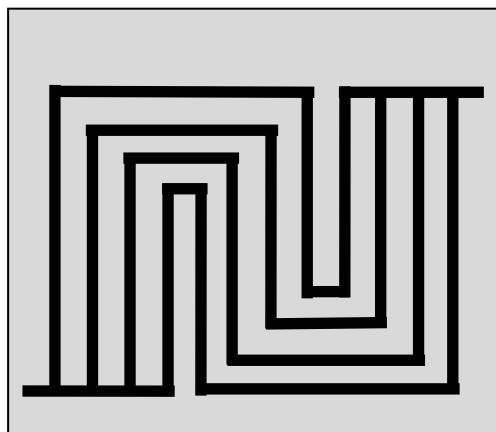


Figure. 1. 7 : Canal Serpentin Parallèle

1.6.3. Canal mixte

Cette configuration permet aux gaz de se mélanger au niveau des coudes afin de minimiser l'effet du blocage dans le canal. Cependant, elle n'élimine pas la possibilité du bouchage de ce dernier, mais limite seulement son effet. (Figure. 1.8) [1].

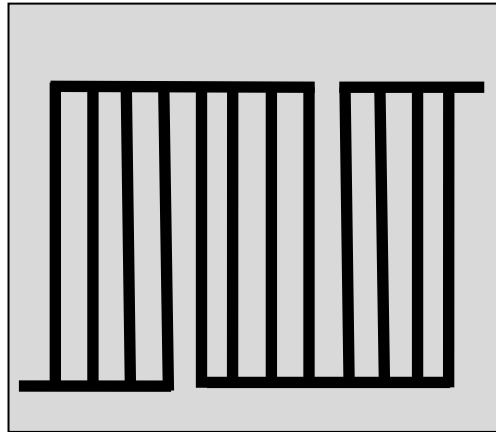


Figure. 1. 8 : Canal mixte Serpentin Parallèle

1.6.4. Plot en carré ou grille

Cette structure, constituée de plots régulièrement disposés, n'est pas optimale pour une distribution égale des gaz qui peuvent circuler à travers la pile par n'importe quel chemin. Il en résulte que certains chemins peuvent être bloqués par la formation d'un bouchon de liquide produisant ainsi une distribution hétérogène du courant électrique dans l'électrode. L'avantage de cette géométrie est que la chute de pression est minimale le long du trajet (Figure. 1.9).

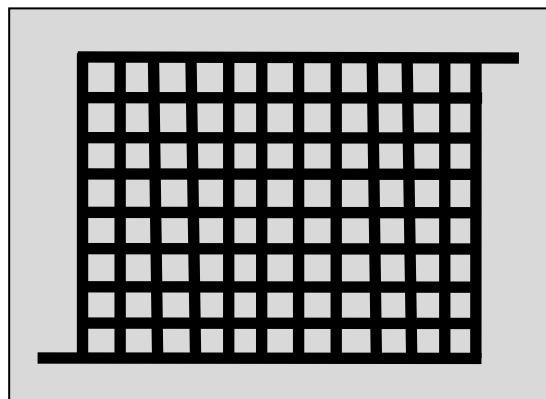


Figure. 1. 9: Plot en carré ou grille

1.6.5. Structure Parallèle

Cette structure utilise des canaux fermés pouvant provoquer des bouchons par formation de gouttelettes d'eau. Cette structure souffre aussi d'une forte chute de pression.

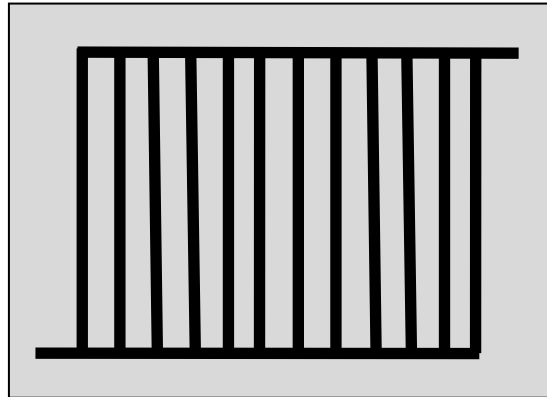


Figure. 1.10: Structure Parallèle

1.6.6. Canaux discontinus

Cette géométrie est une solution au problème de la diffusion décroissante du gaz dans la couche de diffusion : comme les canaux sont discontinus, le gaz est obligé, pour passer des canaux d'admission aux canaux de sortie, de traverser la couche de diffusion poreuse (Figure 1.11). Le processus d'évacuation d'eau liquide et du transport des réactifs à travers la couche de diffusion est plus efficace par rapport aux autres configurations à cause de la convection forcée dans la GDL. Cette configuration a une bonne performance, mais la perte de charge est également élevée [1, 7].

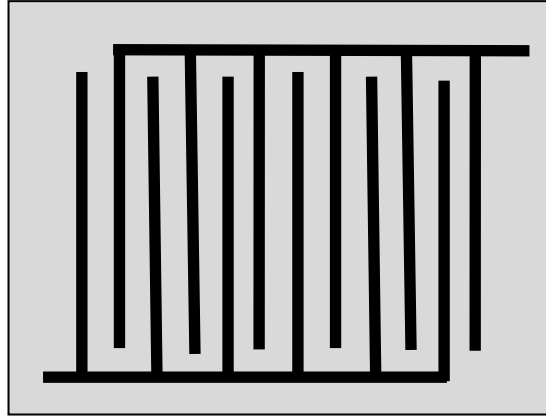


Figure. 1.11 : Canaux discontinus

1.6.7. Canal en spirale

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

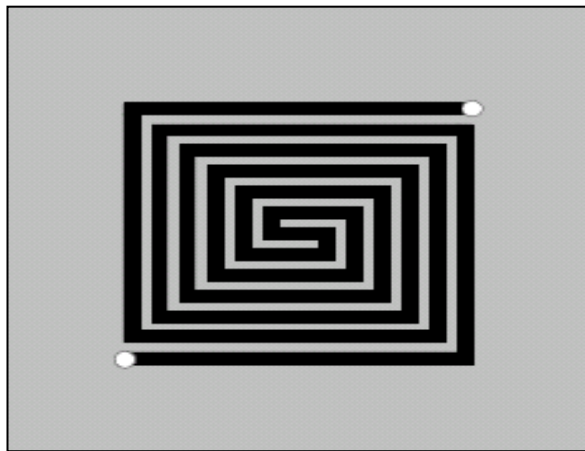


Figure. 1.12 : Canal en spirale

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

- la diminution de la largeur des nervures entre les canaux facilite le passage de l'eau et des gaz dans les différentes parties du cœur de la pile;
- la chute de pression dans un canal du gaz aide à éliminer les gouttelettes d'eau;

- l'augmentation de la largeur des canaux baisse la chute de pression dans ces derniers, mais peut aboutir à une distribution non uniforme;
- l'augmentation de la largeur des canaux baisse aussi la chute de pression, mais augmente l'épaisseur des plaques bipolaires et baisse ainsi la densité de puissance de la pile ;
- les chutes de pression de toutes les cellules individuelles doivent être évidemment égales.

1.7. Performances

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

$$W_{elec} = -\Delta G \quad (1-4)$$

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

$$W_{elec} = -nF(E_a - E_c) \quad (1-5)$$

avec : F est la constante de Faraday.

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

$$W_{MAX} = -\Delta G = nF(E_a - E_c)_{MAX} \quad (1-6)$$

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

$$(E_a - E_c)_{MAX} = -\Delta G/nF \quad (1-7)$$

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

$$\eta_{elec} = W_{elec}/\Delta H \quad (1-8)$$

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

$$\eta_{rev} = -W_{MAX}/\Delta H \quad (1-9)$$

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

$$\eta_{elec} = -nFU/\Delta H \quad (1-10)$$

Cette expression peut être ramenée à un rapport de tension. Par exemple, à 25°C :

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

Où 1,48 V correspondent à la tension qui devrait être obtenue si le système était efficace à 100%. Ainsi, si la tension de la pile est la plus élevée, le rendement sera le meilleur. Au contraire, si la quantité de chaleur produite par la pile augmente, c'est-à-dire celle qui représente l'énergie non convertie en électricité, la tension produite par cette dernière diminue. Ceci pose de nombreux problèmes pour la conception des cellules puisqu'il est nécessaire d'évacuer une grande quantité de chaleur dans un système que l'on souhaite le plus compact possible.

1.8. Effet de la configuration des plaques bipolaires sur les performances d'une PEMFC.

La configuration des plaques bipolaires est l'un des facteurs importants qui influent sur les phénomènes de transfert de masse et de chaleur dans une PEMFC. L'optimisation des paramètres géométriques du champ d'écoulement tel que la longueur, la largeur, la profondeur et la forme de la section transversale du canal ainsi que la forme du canal lui-même, peut améliorer la performance de la pile à combustible [9-19]. De même, la performance de la cellule peut être améliorée en augmentant la zone de contact entre le canal d'écoulement et la couche de diffusion des gaz [20]. Durant les dernières décennies, plusieurs travaux de recherche ont été réalisés pour étudier l'influence des paramètres géométriques des canaux d'écoulement sur la performance des piles de type PEMFC.

1.8.1. Effet de la forme géométrique du canal

L'utilisation d'un canal en serpentin qui contient une entrée dans chaque branche peut améliorer la densité de courant et la production d'eau en raison de l'obtention d'une distribution plus uniforme des réactifs [13].

Ferng et al. [21] ont réalisé une étude comparative entre deux types de canaux : en serpentin et en parallèle ; ils ont trouvé que la première configuration donne une performance plus élevée. Ils ont également constaté que pour la configuration parallèle, la profondeur des canaux affecte les performances de la cellule, alors qu'elle n'a aucune influence dans le cas de la configuration de canaux en serpentin pour laquelle l'augmentation de la vitesse d'écoulement et de la perméabilité de la GDL améliore le taux d'infiltration des réactifs dans cette dernière. Ceci représente un avantage par rapport à la configuration à canaux parallèles. Pour le canal en serpentin, l'écoulement devient turbulent en aval des coudes même à des nombres de Reynolds relativement faibles, ce qui représente une singularité dans cette région [22].

Si on compare une configuration à canaux discontinus par rapport à celle à canaux parallèles, on trouve que la première génère un flux transversal dans la GDL qui améliore le transfert de chaleur par convection et l'évacuation de l'eau de la zone sous les nervures [23,24]. Cependant, un gradient de pression important est nécessaire pour générer ce flux transversal [24,25]. Une configuration à canaux parallèles produit une puissance plus élevée sous de faibles densités de courant en raison de la faible production d'eau. Cependant, un champ d'écoulement discontinu peut être avantageux à forte densité de courant en raison du gain de performance à partir du flux transversal [26]. Les deux configurations sont sensibles au rapport largeur de canal-nervure [27]. La comparaison entre la configuration à canaux en serpentins et celle à canaux discontinus permet de conclure que plus l'humidification des réactifs est importante, plus la performance de la cellule avec des canaux discontinus est meilleure [28].

Jang et al. [29] ont étudié numériquement et expérimentalement la performance d'une pile à combustible PEM avec des canaux en spirale, et l'ont comparée à celle d'une cellule à canaux en serpentins. Ils ont constaté que la forme des canaux en spirale améliore la performance des piles à combustible en réduisant la chute de pression (perte de charge) et en augmentant le taux du transfert de masse et de chaleur.

Juarez-Robles et al. [30] ont développé un modèle tridimensionnel et non-isotherme de pile à combustible PEM avec des canaux d'écoulement en spirale concentriques, afin d'étudier l'influence du nombre de canaux sur la performance de la cellule. Ils ont constaté que le modèle à quatre canaux produit les meilleures performances avec relativement, une faible baisse de pression, et des distributions de réactifs et de densité de courant uniformes. La plus grande puissance est obtenue en utilisant cette configuration. Le modèle à huit canaux ayant généré la pire des performances.

Rangel-Hernandez et al. [31] ont construit un modèle numérique d'une pile à combustible PEM avec un canal en spirale pour étudier les origines des irréversibilités.

Pour faciliter l'étude, ils ont également introduit un paramètre adimensionnel, qui est le rapport de la génération d'entropie due au transfert de masse à la génération d'entropie totale. Ils ont constaté que les pertes de concentration sont la principale cause des irréversibilités dans une pile à combustible.

1.8.2. Effet de l'installation des obstacles dans le canal

Dans les piles à combustible à membrane échangeuse de protons (PEMFC), le flux laminaire à l'intérieur des canaux de gaz de l'anode et de la cathode peut être perturbé en utilisant des obstacles ou des chicane. Il est confirmé que la présence d'une chicane dans le canal d'écoulement peut pousser les réactifs à s'infiltrer dans les couches de diffusion et dans celles du catalyseur. Ceci améliore le taux de réaction électrochimique dans cette région et entraîne une augmentation de la densité de courant locale. En aval de la chicane, la consommation des réactifs est relativement faible en raison du phénomène de déflexion du flux qui amène les réactifs à l'extérieur de la GDL [17, 32,34, 34,26]. Le remplacement de la chicane par un obstacle réduit l'effet de la déflexion et provoque une infiltration d'une quantité plus grande de réactifs à la GDL. [32]. La réduction de la section de sortie des canaux peut bloquer partiellement le flux de gaz et les forcer à pénétrer dans la couche poreuse [29]. La disposition des obstacles près de la sortie des canaux de gaz, diminue les pertes de concentration dues à la consommation d'hydrogène et d'oxygène à l'intérieur du canal [35].

Muhittin Bilgili et al. [35] ont utilisé un modèle de calcul tridimensionnel, pour simuler et étudier la performance des PEMFC contenant des obstacles dans les canaux d'écoulement des gaz de l'anode et de la cathode. Ces simulations ont été réalisées à différentes conditions de fonctionnement : la stœchiométrie, l'humidité relative et la température pour clarifier les effets des obstacles aux conditions spécifiées. Les simulations montrent que les obstacles à l'intérieur des canaux d'écoulement de gaz améliorent la distribution des concentrations des réactifs le long des canaux et le transport des réactifs à travers les couches de diffusion des gaz. En conséquence, la

réaction électrochimique est améliorée et une tension cellulaire plus élevée est obtenue à des densités de courant élevées.

Shiang-Wuu Perng et al. (2008) [33] ont effectué une étude numérique bidimensionnelle sur les performances d'une pile à combustible à membrane échangeuse de protons (PEMFC) en employant la méthode des éléments finis. Le facteur étudié dans ce travail est l'influence d'une chicane installée transversalement dans le canal d'écoulement sur la consommation d'oxygène et la production de la densité de courant. Les résultats prouvent que l'installation transversale d'une chicane ou d'un obstacle dans le canal d'écoulement peut efficacement augmenter la performance locale (autour de la chicane) d'une PEMFC. En outre, l'effet d'un obstacle sur la performance globale de la cellule est plus favorable que celui d'une chicane. En 2009 [34], ils ont étudié numériquement l'effet de la position et des dimensions d'un obstacle rectangulaire, installé dans le canal d'écoulement du côté cathodique, sur les performances d'une cellule d'une pile à combustible à membrane échangeuse de protons en utilisant un modèle bidimensionnel stationnaire, isotherme, et monophasique. Les champs de distribution de vitesse, de pression, et de concentration d'oxygène, ainsi que le profil de la densité de courant local ont été présentés et analysés. En 2015 [36], ils ont effectué une simulation numérique tridimensionnelle non isotherme pour étudier l'effet de l'installation des chicanes, de forme trapézoïdale, dans le canal d'écoulement sur le transport de réactifs et la densité de puissance générée. Les résultats ont montré que la présence des chicanes trapézoïdales améliore les performances de la cellule. Les meilleures densités de puissance locale des cellules PEMFC sont obtenues autour des trapèzes installés dans le canal d'écoulement, en particulier pour les plus grandes valeurs des angles et des hauteurs.

1.8.3. Effet de la largeur et de la profondeur du canal

A l'état stationnaire, l'utilisation d'un canal étroit avec des nervures plus larges peut améliorer la performance des cellules [12, 19], tandis que pour le cas transitoire, un

canal plus large et des nervures plus étroites améliorent les performances de la cellule [12,32]. L'utilisation d'un canal en serpentín plus étroit avec des branches droites plus longues améliore le processus de transfert de masse et de chaleur par convection : cette configuration augmente le gradient de pression entre les branches adjacentes du canal, ce qui produit des forces convectives relativement importantes dans la GDL [17].

Mohammad Hadi Akbari et al. [37] développent un modèle complet tridimensionnel d'une PEMFC. Les équations de conservation de masse, de quantité de mouvement, d'énergie, de charge et des espèces sont résolues par la méthode des volumes finis en tenant compte de la cinétique chimique basée sur l'équation de Butler-Volmer. Dans cette étude, les effets des dimensions du canal d'écoulement sur le fonctionnement de la cellule sont étudiés. Les résultats de simulation indiquent que l'augmentation de la largeur du canal améliore la densité de courant.

1.8.4. Effet de la direction d'écoulement

Chang-Whan Lee et al. [38] ont étudié l'effet de la direction d'écoulement sur la performance d'une cellule unique. Ils ont constaté que la configuration en contre-courant a donné lieu à une distribution plus uniforme de la densité de courant, ce qui améliore la performance de la cellule.

Shan-Hai Ge et al. [39] ont étudié l'influence de la direction d'écoulement des réactifs dans les canaux sur la performance d'une pile à combustible PEMFC. Les résultats de ce travail ont montré une amélioration de l'humidification des membranes lorsqu'une disposition en contre-courant a été proposée. De plus, une répartition uniforme de la densité de courant sur toute la zone active de l'AEM a été développée, augmentant ainsi les performances de la pile à combustible.

Scholta et al. [40] ont analysé la performance de PEMFC pour différentes configurations des plaques bipolaires dans les deux côtés anodique et cathodique en utilisant un gaz sec dans l'anode et un gaz humide dans la cathode. Les configurations

utilisées sont en co-courant, en contre-courant et croisé. Des plaques bipolaires, avec 100 cm² de surface active et des champs d'écoulement parallèles et en serpentin ont été utilisées dans ce travail. La configuration en contre-courant a également montré une meilleure performance de la PEMFC principalement due à une répartition plus uniforme de l'humidité dans la cellule. En ce qui concerne la performance d'une pile à combustible avec une configuration à canaux parallèles, en établissant une configuration en contre-courant similaire, on a constaté que les canaux ayant une plus grande profondeur présentaient également des tensions de cellule plus élevées si des densités de courant élevées étaient appliquées. Ce comportement est attribué à une réduction du transport transversal de matière par rapport aux différences de pression plus faibles.

1.8.5. Effet de la forme de la section droite du canal

Dewan Hasan Ahmed et al. [41] ont utilisé le code commercial CFD pour simuler la performance d'une cellule PEMFC avec inclusion des électrodes pour différentes géométries des canaux sous une haute densité de courant électrique. Un modèle en trois dimensions a été développé avec un canal de géométrie rectiligne. Les résultats de la simulation montrent qu'un canal de section rectangulaire donne des tensions plus ou moins élevées par rapport à celui de section trapézoïdale ou parallélogramme; cependant la forme trapézoïdale facilite la diffusion des réactifs ce qui conduit à une distribution uniforme de ces derniers et de la densité de courant. La simulation des trois géométries en utilisant les mêmes conditions aux limites, montre que la largeur des nervures est l'un des paramètres les plus importants; la diminution de la largeur des nervures facilite la distribution des réactifs et permet de réduire les pertes de concentration.

Lan Sun et al. [42] ont développé un modèle numérique tridimensionnel d'une pile à combustible PEM avec un canal en serpentin à trois passages de section transversale de forme trapézoïdale (figure 1.13). Ils ont trouvé que le rapport de forme de la section transversale trapézoïdale ($R=B/A$) a un effet significatif sur le

flux dans la GDL et sur la variation de pression dans le champ d'écoulement ; une augmentation du rapport R est associée à une augmentation de la vitesse d'écoulement dans la GDL et à une diminution de la chute de pression le long du canal.

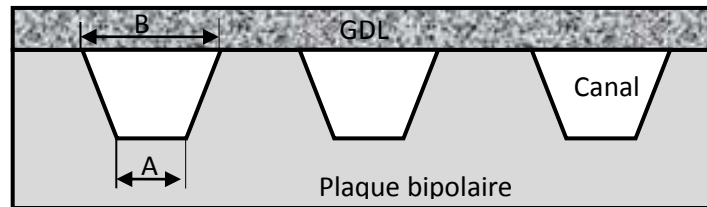


Figure. 1.13 : Géométrie de section transversale trapézoïdale du canal [42].

J.P. Owejan et al. [43] ont effectué une étude expérimentale pour évaluer les effets des propriétés de la GDL et des canaux d'écoulement sur l'accumulation d'eau liquide. Ils ont trouvé que les canaux à géométrie triangulaire conservent moins d'eau que les canaux rectangulaires de même section transversale ; l'eau est principalement piégée dans les deux coins adjacents à la couche de diffusion.

I. Khazaei et al. [44-46] ont étudié la performance d'une pile à combustible PEM expérimentalement et numériquement en modifiant la forme de la section transversale des canaux. Trois différentes formes de section transversale ont été utilisées : rectangulaire, elliptique et triangulaire. Le modèle numérique proposé pour étudier l'effet de l'utilisation de cette géométrie des canaux sur la performance de la cellule est un modèle tridimensionnel, monophasique, non-isotherme et instationnaire. Les équations gouvernantes du problème ont été résolues à l'aide d'un code de calcul basé sur la méthode des volumes finis. Les résultats montrent que :

- la forme rectangulaire donne une meilleure performance de la cellule par rapport aux autres formes. Ceci est dû au faible taux de pénétration des gaz dans la couche de diffusion des gaz. Dans le cas des canaux de section elliptique ou triangulaire, le taux des réactions électrochimiques aux surfaces des couches de catalyseur diminue.

- l'augmentation de la température de la cellule de 40°C à 60°C entraîne une amélioration des performances de la cellule d'environ 17%, 11% et 9% respectivement pour les canaux triangulaires, rectangulaires et elliptiques en raison de la diminution de la surtension d'activation et de l'augmentation du taux de réaction électrochimique.

CHAPITRE II

Formulation mathématique du Problème

2.1. Introduction

Le modèle tridimensionnel non isotherme, monophasique et instationnaire d'une pile à combustible à membrane échangeuse de protons (PEMFC), et à champs d'écoulements en spirale est employé dans ce travail pour décrire l'effet des paramètres géométriques des plaques bipolaires sur la distribution des températures et des concentrations des réactifs, ainsi que sur les performances de la cellule. Dans ce chapitre, on va essayer de présenter d'une manière simple, le modèle physique, les équations gouvernantes de chaque phénomène dans chaque partie de la cellule, et les conditions initiales et aux limites du problème.

2.2. Domaine d'étude (modèle physique)

Le domaine d'étude représenté sur la figure 2.1 est celui de cellule d'une pile planaire à combustible à membrane échangeuse de protons qui se compose de deux couches poreuses de diffusion, à l'intérieur desquelles se trouvent deux zones de réactions électrochimiques actives ou catalytiques, situées de part et d'autre d'une membrane échangeuse de protons ou électrolyte, communément appelée MEA

(Membrane Electrode Assembly). Ce sandwich (MEA) est situé entre deux canaux d'écoulement de gaz de forme spirale.

Les deux couches de diffusion et la membrane sont modélisées en tant que trois disques minces superposés.

A cause de leur épaisseur négligeable par rapport aux autres éléments, les couches de catalyseur sont considérées comme des interfaces situées entre la membrane et les couches de diffusion.

L'étude de l'influence de la largeur des canaux et de l'épaisseur des nervures sur les performances de la cellule est faite à l'aide d'une étude paramétrique basée sur l'utilisation de trois valeurs du rapport $b = (\text{largeur du canal} / \text{largeur de nervure})$: $b = 1$, $b = 2$ et $b = 3$.

La variation du nombre de tours du canal en spirale permet d'analyser l'effet de la longueur du canal d'écoulement sur les performances de la cellule. Une comparaison entre trois différentes configurations a été réalisée dans ce travail ($N = 4, 5, 6$. N étant le nombre de tours du canal). Les directions possibles des écoulements des réactifs sont représentées sur la figure 2.2. La première direction correspond au cas où les réactifs sont injectés par la branche intérieure du canal en spirale et éjectés par la branche extérieure. Par contre, la deuxième direction correspond au cas où les réactifs sont injectés par la branche extérieure et éjectés par la branche intérieure.

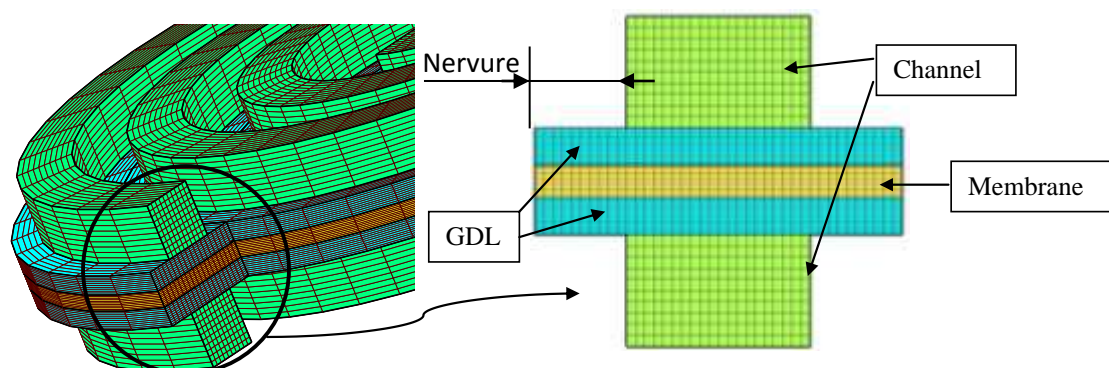


Figure 2.1. *Domaine d'étude*

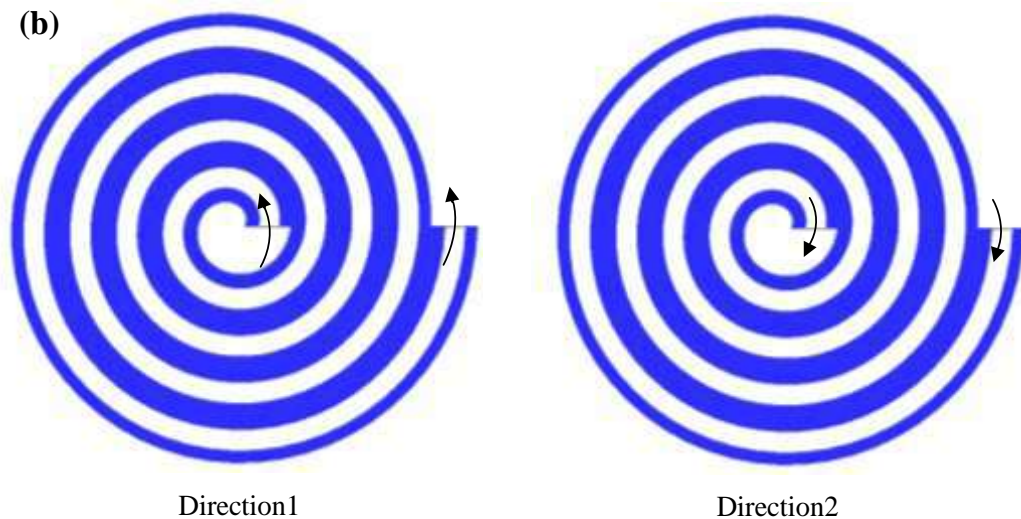


Figure 2.2. Directions possibles des écoulements

2.3. Hypothèses simplificatrices

Le modèle présenté ici est basé sur les hypothèses suivantes:

- la pile à combustible fonctionne en régime transitoire ;
- l'écoulement dans les canaux est considéré comme incompressible;
- L'écoulement dans les canaux est considéré comme laminaire ;
- les gaz sont supposés être bien mélangés au niveau moléculaire, de sorte que tous les composants partagent les mêmes champs de vitesse, de pression et de température ;
- la membrane est supposée être entièrement humidifiée de sorte que la conductivité ionique soit constante ;
- les gaz de l'anode et de la cathode ne sont pas autorisés à se croiser, c'est-à-dire, que la membrane est imperméable aux gaz réactifs ;
- le modèle est limité au transport monophasique de l'eau dans les éléments de la cellule ;
- l'eau est supposée être un produit en phase de vapeur ;
- la couche de diffusion des gaz est supposée homogène et isotrope ;
- la couche de catalyseur est traitée comme une interface mince entre la membrane et les électrodes.

2.4. Formulation mathématique du problème

L'étude de la performance d'une pile à combustible exige la modélisation de nombreux phénomènes couplés dans les différentes parties de la cellule tels que, le flux des réactifs, le transfert de chaleur, le transport et la consommation des réactifs et la production d'eau, de chaleur, et d'énergie électrique. Afin de simuler tous ces phénomènes, le modèle mathématique employé dans ce travail se constitue de deux parties : le modèle hydrodynamique et le modèle électrochimique. Le premier gouverne les phénomènes de transfert de quantité de mouvement, de chaleur et des espèces dans les différentes parties de la cellule (canaux, couches de diffusion des gaz, et membrane). Le second gouverne le processus des réactions d'oxydoréduction des réactifs dans les couches catalytiques et sert également à quantifier les termes sources des équations du modèle hydrodynamique.

2.4.1. Modèle hydrodynamique

Pour étudier les différents phénomènes, on utilise un modèle tridimensionnel instationnaire contenant les équations de conservation de la quantité de mouvement de l'énergie et des espèces, exprimées en coordonnées cylindriques comme suit :

2.4.1.1. Equation de continuité

$$\frac{\partial(\rho u_r)}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial(\rho u_\theta)}{\partial \theta} + \frac{\partial(\rho u_z)}{\partial z} = 0 \quad (2-1)$$

2.4.1.2. Equations de la conservation de quantité de mouvement

Généralement, le mouvement des réactifs dans les canaux est décrit par les équations de Navier-Stokes alors que l'équation de Darcy est adoptée pour modéliser le processus d'infiltration des gaz dans les milieux poreux (GDL). Ces équations doivent être liées entre elles pour éviter d'examiner différents systèmes d'équations aux dérivées partielles dans chaque élément de la cellule et de chercher les conditions de

compatibilité aux interfaces. L'équation de Darcy peut être introduite dans les équations de Navier-Stockes comme un terme source. L'équation de quantité de mouvement utilisée pour décrire le flux à travers les canaux et les milieux poreux peut être écrite comme suit:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \varepsilon \rho u_r}{\partial t} + u_r \frac{\partial \varepsilon \rho u_r}{\partial r} + \frac{u_\theta}{r} \frac{\partial \varepsilon \rho u_r}{\partial \theta} + u_z \frac{\partial \varepsilon \rho u_r}{\partial z} = \\ \quad - \varepsilon \frac{\partial P}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \varepsilon \mu \frac{\partial u_r}{\partial r} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\varepsilon \mu \frac{1}{r} \frac{\partial u_r}{\partial \theta} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\varepsilon \mu \frac{\partial u_r}{\partial z} \right) + S_r \\ \frac{\partial \varepsilon \rho u_\theta}{\partial t} + u_r \frac{\partial \varepsilon \rho u_\theta}{\partial r} + \frac{u_\theta}{r} \frac{\partial \varepsilon \rho u_\theta}{\partial \theta} + u_z \frac{\partial \varepsilon \rho u_\theta}{\partial z} = \\ \quad - \varepsilon \frac{\partial P}{r \partial \theta} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \varepsilon \mu \frac{\partial u_\theta}{\partial r} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\varepsilon \mu \frac{1}{r} \frac{\partial u_\theta}{\partial \theta} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\varepsilon \mu \frac{\partial u_\theta}{\partial z} \right) + S_\theta \\ \frac{\partial \varepsilon \rho u_z}{\partial t} + u_r \frac{\partial \varepsilon \rho u_z}{\partial r} + \frac{u_\theta}{r} \frac{\partial \varepsilon \rho u_z}{\partial \theta} + u_z \frac{\partial \varepsilon \rho u_z}{\partial z} = \\ \quad - \varepsilon \frac{\partial P}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \varepsilon \mu \frac{\partial u_z}{\partial r} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\varepsilon \mu \frac{1}{r} \frac{\partial u_z}{\partial \theta} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\varepsilon \mu \frac{\partial u_z}{\partial z} \right) + S_z \end{array} \right. \quad (2-2)$$

Le canal d'écoulement pouvant être considéré comme un milieu poreux de porosité $\varepsilon=1$ et de perméabilité infinie. Ceci qui permet d'éliminer le terme de Darcy dans cette partie. Les couches de diffusion des gaz et la membrane sont modélisées en tant que milieux poreux ayant les propriétés physiques présentées dans le tableau 2.1. Les termes source S_r , S_θ et S_z des équations de Navier-Stockes dans les différentes parties de la cellule sont donnés par les formules (2-3), (2-4) et (2-5).

$$\text{Dans les canaux : } \left\{ \begin{array}{l} S_r = - \left(\frac{\mu}{r^2} \right) u_r - \left(\frac{\rho u_\theta^2}{r} + \mu \frac{2}{r^2} \frac{\partial u_\theta}{\partial \theta} \right) \\ S_\theta = - \left(\frac{\rho u_r}{r} + \frac{\mu}{r^2} \right) u_\theta - \left(\mu \frac{2}{r^2} \frac{\partial u_r}{\partial \theta} \right) \\ S_z = 0 \end{array} \right. \quad (2-3)$$

$$\text{Dans les couches de diffusion:} \begin{cases} S_r = -\left(\frac{\mu}{r^2} + \frac{\varepsilon_d^2 \mu}{k}\right) u_r - \left(\frac{\varepsilon_d \rho u_\theta^2}{r} + \mu \varepsilon_d \frac{2}{r^2} \frac{\partial u_\theta}{\partial \theta}\right) \\ S_\theta = -\left(\frac{\varepsilon_d \rho u_r}{r} + \frac{\mu \varepsilon_d}{r^2} + \frac{\varepsilon_d^2 \mu}{k}\right) u_\theta - \left(\mu \varepsilon_d \frac{2}{r^2} \frac{\partial u_r}{\partial \theta}\right) \\ S_z = -\frac{\varepsilon_d^2 \mu}{k} u_z \end{cases} \quad (2-4)$$

$$\text{Dans la membrane:} \begin{cases} S_r = -\left(\frac{\mu}{r^2} + \frac{\varepsilon_m^2 \mu}{k}\right) u_r - \left(\frac{\varepsilon_m \rho u_\theta^2}{r} + \mu \varepsilon_m \frac{2}{r^2} \frac{\partial u_\theta}{\partial \theta}\right) \\ S_\theta = -\left(\frac{\varepsilon_m \rho u_r}{r} + \frac{\mu \varepsilon_m}{r^2} + \frac{\varepsilon_m^2 \mu}{k}\right) u_\theta - \left(\mu \varepsilon_m \frac{2}{r^2} \frac{\partial u_r}{\partial \theta}\right) \\ S_z = -\frac{\varepsilon_m^2 \mu}{k} u_z \end{cases} \quad (2-5)$$

Tableau 2.1 : Propriétés physiques des différents milieux poreux [30].

	ε	k
canaux	1	∞
GDL	0.4	2.10^{-10} m^2
membrane	0.4	2.10^{-18} m^2

2.4.1.3. Equation de la conservation d'énergie

En réalité, le transfert de chaleur dans une pile à combustible se fait par les trois modes : par conduction, convection et par rayonnement. Mais comme notre pile fonctionne à de basses températures, le mode de transfert par rayonnement peut être négligé. Le processus de transfert d'énergie peut être régi par l'équation (2-6).

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varepsilon T}{\partial t} + u_r \frac{\partial \varepsilon T}{\partial r} + \frac{u_\theta}{r} \frac{\partial \varepsilon T}{\partial \theta} + u_z \frac{\partial \varepsilon T}{\partial z} = \\ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \varepsilon D_k \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\varepsilon D_k \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial \theta} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\varepsilon D_k \frac{\partial T}{\partial z} \right) + S_T \end{aligned} \quad (2-6)$$

Afin de modéliser avec précision le transfert de chaleur dans une pile à combustible PEMFC, on doit accorder une attention particulière à l'évaluation des sources de chaleur dans la cellule qui sont directement liées aux chutes de tension dues à l'énergie chimique fournie par les gaz qui n'est pas transformée en électricité et qui sera libérée sous forme de chaleur. Le terme source S_T de l'équation d'énergie (2-6) est donné par [49]:

$$S_T = (\eta_{act} - \eta_{ohm}) i \quad (2-7)$$

Les divers phénomènes qui sont responsables de la production de chaleur dans les cellules des piles à combustible sont: l'effet Joule dû à la résistivité protonique de la membrane, les réactions électrochimiques aux électrodes, et la sorption ou la désorption d'eau [47].

2.4.1.4. Equation de la conservation des espèces

La cellule est alimentée en hydrogène et en oxygène qui réagissent entre eux pour produire de l'électricité, de l'eau et de la chaleur. Les réactions sont accompagnées de transfert de masse et de variations de concentrations des espèces. Le processus de transfert de masse est décrit par l'équation de conservation des espèces (2-8).

$$\frac{\partial \varepsilon C_k}{\partial t} + u_r \frac{\partial \varepsilon C_k}{\partial r} + \frac{u_\theta}{r} \frac{\partial \varepsilon C_k}{\partial \theta} + u_z \frac{\partial \varepsilon C_k}{\partial z} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \varepsilon D_k \frac{\partial C_k}{\partial r} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\varepsilon D_k \frac{1}{r} \frac{\partial C_k}{\partial \theta} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\varepsilon D_k \frac{\partial C_k}{\partial z} \right) + S_k \quad (2-8)$$

S_k : terme source pour l'espèce k , qui peut être l'oxygène, l'hydrogène ou la vapeur d'eau.

Afin d'expliquer les contraintes géométriques du milieu poreux, les diffusivités sont corrigées en utilisant la formule de Bruggemann [14, 35,36, 38, 39]:

$$D_k^{ef} = D_k \varepsilon^{1.5} \quad (2-9)$$

Les diffusivités de l'oxygène, de l'hydrogène et de l'eau sont calculées en utilisant l'équation [13, 36, 38, 30]:

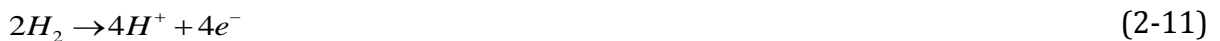
$$D_k = D_k^0 \left(\frac{T}{T_0} \right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{P_0}{P} \right) \quad (2-10)$$

2.4.2. Modèle électrochimique

La couche de catalyseur est traitée comme une interface mince entre la membrane et les électrodes où le terme source de l'équation de conservation des espèces est pris en compte. En raison de son épaisseur infinitésimale, le terme source est réellement pris en compte dans la dernière cellule de la grille du milieu poreux (couche de diffusion) [30].

Les réactions électrochimiques se produisent sur les surfaces des électrodes (couche de catalyseur), l'oxydation se produit à la couche catalytique de l'anode (équation 2-11) et la réduction à celle de la cathode (équation 2-12). La réduction électrochimique se produit dans une réaction qui consomme des électrons réduisant ainsi l'état de la valence. Par contre, l'oxydation électrochimique entraîne une perte d'électrons et une augmentation de l'état de la valence [7].

N.B: *La valence d'un élément chimique est le nombre maximal de liaisons covalentes ou ioniques qu'il peut former en fonction de sa configuration électronique.*



Le déplacement des protons H^+ et des électrons e^- vers la cathode produit un courant électrique continu dont la densité est en relation directe avec le taux de consommation des réactifs. Dans le côté cathodique, le taux de consommation d'oxygène et celui de la production d'eau, sont donnés respectivement par :

$$\begin{cases} S_{O_2} = -\frac{j_c}{4F} \\ S_{H_2O} = \frac{j_c}{2F} \end{cases} \quad (2-13)$$

Le taux de consommation l'hydrogène au niveau du catalyseur du côté anodique, est donné par :

$$S_{H_2} = -\frac{j_a}{2F} \quad (2-14)$$

2.4.2.1. Densité de courant volumique

La densité de courant produite lors des réactions électrochimiques dépend de la concentration, de la température et de la densité de courant de référence. Elle est également fonction des propriétés physiques du catalyseur. Si la densité de courant de référence est connue, la densité de courant effective à une température donnée peut être définie par la formule de Butler-Volmer [48]:

$$\begin{cases} j_c = j_{0,c}^{ref} \left(\frac{C_{O_2}}{C_{O_2}^{ref}} \right)^{\gamma_{O_2}} \left(e^{\frac{\alpha_a F}{RT} \eta_{act,c}} + e^{-\frac{\alpha_c F}{RT} \eta_{act,c}} \right) \\ j_a = j_{0,a}^{ref} \left(\frac{C_{H_2}}{C_{H_2}^{ref}} \right)^{\gamma_{H_2}} \left(e^{\frac{\alpha_a F}{RT} \eta_{act,a}} + e^{-\frac{\alpha_c F}{RT} \eta_{act,a}} \right) \end{cases} \quad (2-15)$$

2.4.2.2. Potentiel de la pile

Le potentiel théorique de la cellule ou de la force électromotrice (EMF) dépend non seulement de la température, mais aussi de la pression. Cette dépendance est en général décrite par l'équation de Nernst qui, pour la réaction électrochimique H_2/O_2 , s'écrit [49, 50] :

$$E = 1.229 - 0.85 \times 10^{-3} (T - 298.15) + 4.3085 \times 10^{-5} T \left[\ln \left(P_{H_2} + \frac{1}{2} P_{O_2} \right) \right] \quad (2-16)$$

où :

T : la température

P_{H_2} , et P_{O_2} : sont respectivement, la pression d'hydrogène et d'oxygène. Cependant, cette tension n'est pas celle du fonctionnement de la pile à combustible.

2.4.2.3. Pertes de tension

Si une pile à combustible est alimentée avec des gaz réactifs en circuit électrique ouvert, elle ne génère aucun courant et le potentiel de la cellule est égal au potentiel théorique déterminé par l'équation (2-16).

Cependant, et en pratique, ce potentiel appelé potentiel en circuit ouvert, est significativement inférieur au potentiel théorique. Cela suggère qu'il y a des pertes dans la pile à combustible, même si aucun courant externe n'est généré. Lorsque le circuit électrique est fermé, le potentiel diminue en fonction du courant généré en raison de pertes inévitables. Il existe différents types de pertes de tension dans une pile à combustible causée par les facteurs suivants [1, 51] :

- surtension d'activation : cinétique des réactions électrochimiques;
- surtension ohmique : résistance électrique et ionique interne;

- surtension de concentration : difficultés à obtenir les réactifs sur les sites de réaction;
- parasites : courants internes;
- croisement des réactifs.

La tension de fonctionnement de la cellule est déterminée par la formule suivante:

$$E_{cell} = E - \eta_{act} - \eta_{ohm} - \eta_{Diff} \quad (2-17)$$

a. Surtension d'activation

Les phénomènes d'activation sont dus à la cinétique des réactions électrochimiques qui se déroulent dans la couche catalytique de la cellule. Le transfert de la charge électrique entre les espèces chimiques et les électrodes implique une demande d'énergie due à la variation de l'énergie libre de Gibbs se produisant aux différents stades du processus [52]. Cette barrière d'énergie, que la charge doit surmonter pour passer des réactifs aux électrodes et vice-versa, est appelée 'énergie d'activation' et se manifeste sous forme de surtension aux électrodes. Les surtensions causées par ce phénomène sont connues sous le nom de 'tensions d'activation'. Dans la pile à combustible PEM, la surtension d'activation est le potentiel nécessaire pour que l'hydrogène se divise en électrons et en protons, et que les protons se déplacent par l'électrolyte puis se combinent avec l'oxygène. Dans ce type de piles, le potentiel d'activation de l'anode est négligeable par rapport à celui de la cathode [50]. La surtension d'activation dépend de la température de la cellule, des concentrations des réactifs et de la densité de courant électrique et est donnée par [39, 30] :

$$\eta_{act} = - \left[\xi_1 + \xi_2 T + \xi_3 T \ln(C_{O_2}) + \xi_4 T \ln(i) \right] \quad (2-18)$$

Où :

T : est la température de la cellule ;

i : est la densité de courant et ;

ξ_1, ξ_2, ξ_3 et ξ_4 sont des coefficients semi-empiriques, définis par les équations suivantes:

$$\left\{ \begin{array}{l} \xi_1 = \frac{-\Delta G_e}{a_c z F} + \left(\frac{-\Delta G_{ec}}{2F} \right) \\ \xi_2 = \frac{R}{a_c z F} \ln \left(z F A k_c^0 (C_{H^+}^*)^{1-a_c} (C_{H_2O}^*)^{a_c} \right) + \frac{R}{2F} \ln \left(4 F A k_a^0 C_{H_2}^* \right) \\ \xi_3 = \frac{R}{a_c z F} (1 - a_c) \\ \xi_4 = - \left(\frac{R}{a_c z F} + \frac{R}{2F} \right) \end{array} \right. \quad (2-19)$$

L'utilisation de ces coefficients qui peuvent être obtenus par une procédure de fixation basée sur la courbe de polarisation de la pile [49], donne un degré de flexibilité significatif lorsque le modèle est appliqué à la simulation d'un type spécifique de pile à combustible. Les valeurs des coefficients ξ_i utilisées dans ce travail sont celles proposées dans les références [49, 50, 53-55] et sont présentées comme:

$$\left\{ \begin{array}{l} \xi_1 = -0.948 \\ \xi_2 = 0.00286 + 0.0002 \ln(A_{MEA}) + 4.310^{-5} \ln(C_{H_2}) \\ \xi_3 = 7.610^{-5} \\ \xi_4 = -1.9310^{-4} \end{array} \right. \quad (2-20)$$

b. Surtension ohmique

Comme dans tous les appareils électriques, les pertes ohmiques sont répandues dans les piles à combustible où deux types de pertes se produisent : les pertes de tensions dues à la résistance au flux d'électrons à travers les électrodes et les plaques bipolaires, et celles dues à la résistance au flux de protons à travers la membrane.

Elles sont généralement écrites en fonction de la densité de courant et de la résistance de la zone considérée [56]. La perte ohmique de la membrane est donnée par l'expression suivante:

$$\eta_{ohm} = i \frac{\delta_m}{\sigma_m} \quad (2-21)$$

La membrane doit être humidifiée pour que sa conductivité ionique atteigne une valeur souhaitable. En pratique, la membrane n'est pas toujours saturée en eau ce qui cause des pertes de conductivité protonique, surtout dans le cas des densités de courant élevées. La conductivité ionique de la membrane σ_m est liée directement à la température. Elle peut être définie par l'expression empirique suivante [19, 39, 31, 49, 57-59]:

$$\sigma_m = [0.5139 \lambda - 0.326] \exp \left[1268 \left(\frac{1}{303} - \frac{1}{T} \right) \right] \quad (2-22)$$

λ est la teneur en eau dans la membrane donnée par [12, 13, 19, 23, 25, 27, 39]:

$$\begin{cases} \lambda = 0.043 + 17.10a - 39.85a^2 + 36.00a^3 \text{ si } a \leq 1 \\ \lambda = 14.0 + 1.4(a-1) \text{ si } a > 1 \end{cases} \quad (2-23)$$

L'eau contenue dans la membrane se déplace continuellement entre les deux électrodes de la cellule. Elle est initialement transportée de l'anode vers la cathode à travers la membrane par une traction électro-osmotique et son taux de transfert est directement proportionnel à la densité de courant. L'eau transportée et produite à la cathode génère une concentration en eau et une pression hydraulique élevées dans la couche de catalyseur cathodique, ce qui entraîne le retour de l'eau de la cathode à l'anode par un mécanisme de rétrodiffusion [60, 61]. Le transport net de l'eau à travers la membrane est déterminé par le coefficient « a » nommé 'coefficient net de transport de l'eau' ou 'activité de l'eau' [27]:

$$a = \frac{C_{H_2O} RT}{P_{sat}} \quad (2-24)$$

La pression de saturation de la vapeur d'eau P_{sat} peut être déterminée en utilisant la formule suivante [29, 31, 36, 50]

$$\log_{10} P_{sat} = -2.1794 + 0.02953(T - 273.15) - 9.183710^{-5} (T - 273.15)^2 + 1.445410^{-7} (T - 273.15)^3 \quad (2-25)$$

c. Surtension de diffusion

La perte de concentration devient significative lorsque la pile à combustible fonctionne à haute densité de courant. Ceci est créé par le gradient de concentration en raison de la consommation d'oxygène aux électrodes. La perte de concentration à l'anode peut être négligeable par rapport à la cathode. À la densité de courant limite, l'oxygène à la couche de catalyseur est épuisé et le courant électrique ne peut plus être obtenu à partir de la pile à combustible. Ceci est responsable de la forte baisse du potentiel aux fortes densités de courant. Pour réduire la perte de transport de masse, la cathode fonctionne généralement à haute pression [56]. La surtension de Diffusion est donnée par [49]:

$$\eta_{Diff} = \frac{RT}{2F} \ln \left(1 - \frac{i}{i_{max}} \right) \quad (2-26)$$

Les valeurs des paramètres électrochimiques sont présentées dans le tableau 2.2

Tableau 2.2. Paramètres électrochimiques de la cellule [30].

Propriété	Valeur
Conductivité de la GDL et du catalyseur	$53 \Omega^{-1} m^{-1}$
Porosité de la GDL	0.4
Porosité du catalyseur	0.4
Exposant de Concentration (γ_{O_2}).	0.5
Exposant de Concentration (γ_{H_2}).	1
Coefficient de transfert (anode)	2
Densité de courant de référence (anode)	$10^9 A m^{-3}$
Coefficient de transfert (cathode)	2
Densité de courant de référence (cathode)	$3 \times 10^5 A m^{-3}$
diffusivité de référence de l'Hydrogène	$1.1 \times 10^{-4} m^2 s^{-1}$
diffusivité de référence d'oxygène	$3.2 \times 10^{-5} m^2 s^{-1}$
diffusivité de référence de la vapeur d'eau	$7.35 \times 10^{-5} m^2 s^{-1}$
Perméabilité de la GDL	$2 \times 10^{-10} m^2$
Perméabilité de la membrane	$2 \times 10^{-18} m^2$

2.5. Conditions initiales et aux limites

2.5.1. Conditions initiales

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

$$\left\{ \begin{array}{l} P_0 = 10^5 Pa \\ u_{r0} = u_{\theta 0} = u_{z0} = 0 \\ T_0 = 353k \\ C_{k0} = 0 \end{array} \right. \quad (2-27)$$

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

2.5.2. Conditions d'entrée

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

$$\begin{cases} P = 2.10^5 \text{ Pa} \\ u_\theta = u_{\text{entrée}} = 0.5 \text{ m/s} \\ u_r = u_z = 0 \\ C_{H_2O} = 0 \\ T = 353 \text{ K} \end{cases}$$

(2-28)

sur le côté cathodique on a :

$$\begin{cases} C_{O_2} = 24 \text{ kmole/m}^3 \\ C_{H_2} = 0. \end{cases} \quad (2-29)$$

et sur le côté anodique on a :

$$\begin{cases} C_{O_2} = 0. \\ C_{H_2} = 24 \text{ kmole/m}^3. \end{cases} \quad (2-30)$$

2.5.3. Conditions de sortie

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

$$\frac{\partial T}{\partial \theta} = \frac{\partial u_r}{\partial \theta} = \frac{\partial u_\theta}{\partial \theta} = \frac{\partial u_z}{\partial \theta} = \frac{\partial P}{\partial \theta} = \frac{\partial C_{O_2}}{\partial \theta} = \frac{\partial C_{H_2}}{\partial \theta} = \frac{\partial C_{H_2O}}{\partial \theta} = 0 \quad (2-31)$$

2.5.4. Surfaces externes

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

$$\left\{ \begin{array}{l} u_r = u_\theta = u_z = \frac{\partial P}{\partial r} = \frac{\partial T}{\partial r} = \frac{\partial C_{O_2}}{\partial r} = \frac{\partial C_{H_2}}{\partial r} = \frac{\partial C_{H_2O}}{\partial r} = 0 \\ u_r = u_\theta = u_z = \frac{\partial P}{\partial \theta} = \frac{\partial T}{\partial \theta} = \frac{\partial C_{O_2}}{\partial \theta} = \frac{\partial C_{H_2}}{\partial \theta} = \frac{\partial C_{H_2O}}{\partial \theta} = 0 \\ u_r = u_\theta = u_z = \frac{\partial P}{\partial z} = \frac{\partial T}{\partial z} = \frac{\partial C_{O_2}}{\partial z} = \frac{\partial C_{H_2}}{\partial z} = \frac{\partial C_{H_2O}}{\partial z} = 0 \end{array} \right. \quad (2-32)$$

CHAPITRE III

Résolution Numérique Du Problème

3.1. Introduction

Le modèle mathématique présenté dans le chapitre précédent contient un système d'équations aux dérivées partielles, non-linéaires dont on ne connaît pas la solution analytique et doit, par conséquent être résolu numériquement. Le fait que ces équations soient couplées, rend le problème encore plus complexe. Les équations continues régissant les phénomènes physiques doivent être transformées en un système d'équations discrètes sur le domaine de calcul qui doit être maillé. Dans la littérature, on trouve trois grandes familles de méthodes numériques de discrétisation des équations aux dérivés partielles : la méthode des différences finies, la méthode des volumes finis et celle des éléments finis.

Dans ce travail, nous allons employer la méthode des volumes finis dont les étapes à suivre sont: l'élaboration d'un maillage, la discrétisation des équations gouvernantes, le choix des méthodes de résolution numérique et la programmation des équations discrétisées.

Ce chapitre sera consacré à la présentation de la méthode numérique utilisée pour la discrétisation et la résolution des équations du modèle mathématique présenté dans le chapitre précédent.

3.2. Algorithme de résolution des équations de Navier-Stockes

La résolution des équations de Navier-Stockes présente une difficulté particulière qui réside dans la présence de la pression dans les équations des vitesses avec l'absence d'une équation de pression. Il existe plusieurs algorithmes de résolution du problème de couplage pression-vitesses. L'astuce numérique que nous allons mettre en œuvre pour pallier à cette difficulté repose sur une méthode de projection introduite par Chorin (1967, 1968) [61]. Elle est basée sur le fractionnement du pas de temps en deux sous-intervalles, et de supposer que le gradient de pression n'existe que dans le second. Cette méthode est valable uniquement dans le cas d'un écoulement instationnaire.

Les équations de conservation de la quantité de mouvement peuvent être écrites comme suit:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \varepsilon \rho u_r}{\partial t} = -u_r \frac{\partial \varepsilon \rho u_r}{\partial r} - \frac{u_\theta}{r} \frac{\partial \varepsilon \rho u_r}{\partial \theta} - u_z \frac{\partial \varepsilon \rho u_r}{\partial z} - \varepsilon \frac{\partial P}{\partial r} \\ \quad + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \varepsilon \mu \frac{\partial u_r}{\partial r} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\varepsilon \mu \frac{1}{r} \frac{\partial u_r}{\partial \theta} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\varepsilon \mu \frac{\partial u_r}{\partial z} \right) + S_r \\ \frac{\partial \varepsilon \rho u_\theta}{\partial t} = -u_r \frac{\partial \varepsilon \rho u_\theta}{\partial r} - \frac{u_\theta}{r} \frac{\partial \varepsilon \rho u_\theta}{\partial \theta} - u_z \frac{\partial \varepsilon \rho u_\theta}{\partial z} - \varepsilon \frac{\partial P}{r \partial \theta} \\ \quad + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \varepsilon \mu \frac{\partial u_\theta}{\partial r} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\varepsilon \mu \frac{1}{r} \frac{\partial u_\theta}{\partial \theta} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\varepsilon \mu \frac{\partial u_\theta}{\partial z} \right) + S_\theta \\ \frac{\partial \varepsilon \rho u_z}{\partial t} = -u_r \frac{\partial \varepsilon \rho u_z}{\partial r} - \frac{u_\theta}{r} \frac{\partial \varepsilon \rho u_z}{\partial \theta} - u_z \frac{\partial \varepsilon \rho u_z}{\partial z} - \varepsilon \frac{\partial P}{\partial z} \\ \quad + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \varepsilon \mu \frac{\partial u_z}{\partial r} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\varepsilon \mu \frac{1}{r} \frac{\partial u_z}{\partial \theta} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\varepsilon \mu \frac{\partial u_z}{\partial z} \right) + S_z \end{array} \right. \quad (3-1)$$

En décomposant le pas de temps en deux sous-intervalles, de t à $t + \Delta t / 2$ et de $t + \Delta t / 2$ à $t + \Delta t$, et en posant que le gradient de pression n'existe que dans le deuxième sous-intervalle du temps $\left[t + \frac{\Delta t}{2}; t + \Delta t \right]$, les équations de conservation de la quantité de mouvement peuvent être exprimées dans le premier sous-intervalle par :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{\rho u_r^{t+\Delta t} - \rho u_r^{t+\frac{\Delta t}{2}}}{\Delta t} \right) = -\frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{\partial P}{\partial r} \right) \\ \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{\rho u_\theta^{t+\Delta t} - \rho u_\theta^{t+\frac{\Delta t}{2}}}{\Delta t} \right) = -\frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{\partial P}{\partial \theta} \right) \\ \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\rho u_z^{t+\Delta t} - \rho u_z^{t+\frac{\Delta t}{2}}}{\Delta t} \right) = -\frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial P}{\partial z} \right) \end{array} \right. \quad (3-4)$$

La sommation des équations (3-4) nous donne :

$$\frac{\partial^2 p}{\partial r^2} - \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 p}{\partial \theta^2} - \frac{\partial^2 p}{\partial z^2} = \frac{\frac{\partial}{\partial r}(\rho u_r^{t+\Delta t}) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta}(\rho u_\theta^{t+\Delta t}) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho u_z^{t+\Delta t})}{\Delta t} - \frac{\frac{\partial}{\partial r}(\rho u_r^{t+\frac{\Delta t}{2}}) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta}(\rho u_\theta^{t+\frac{\Delta t}{2}}) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho u_z^{t+\frac{\Delta t}{2}})}{\Delta t} \quad (3-5)$$

D'après l'équation de continuité on a :

$$\frac{\partial}{\partial r}(\rho u_r^{t+\Delta t}) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta}(\rho u_\theta^{t+\Delta t}) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho u_z^{t+\Delta t}) = 0 \quad (3-6)$$

L'équation de pression sera :

$$-\frac{\partial^2 p}{\partial r^2} - \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 p}{\partial \theta^2} - \frac{\partial^2 p}{\partial z^2} = -\left(\frac{\partial}{\partial r}(\rho u_r^{t+\frac{\Delta t}{2}}) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta}(\rho u_\theta^{t+\frac{\Delta t}{2}}) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho u_z^{t+\frac{\Delta t}{2}}) \right) / \Delta t \quad (3-7)$$

La dernière étape de la méthode consiste évidemment à réinjecter le champ de pression calculé ci-dessus dans les équations (3-8), ce qui permet d'obtenir les champs des vitesses $u_r^{t+\Delta t}$, $u_\theta^{t+\Delta t}$ et $u_z^{t+\Delta t}$, qui satisfont aussi bien à l'équation de quantité de mouvement et à l'équation de continuité. L'étape de projection a donné son nom à cette méthode.

$$\begin{cases} u_r^{t+\Delta t} = u_r^{t+\frac{\Delta t}{2}} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial r} \Delta t \\ u_\theta^{t+\Delta t} = u_\theta^{t+\frac{\Delta t}{2}} - \frac{1}{\rho} \frac{1}{r} \frac{\partial P}{\partial \theta} \Delta t \\ u_z^{t+\Delta t} = u_z^{t+\frac{\Delta t}{2}} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial z} \Delta t \end{cases} \quad (3-8)$$

3.3. Maillage du domaine et discrétisation des équations

3.3.1. Principe de la méthode des volumes finis

La méthode des volumes finis (FVM) a été décrite pour la première fois en 1971 par Patankar et Spalding et publiée en 1980 par Patankar. C'est une technique de discrétisation des équations différentielles aux dérivées partielles, en particulier celles qui découlent des lois physiques de conservation.

La méthode des volumes finis est une technique qui convertit les équations de conservation aux dérivées partielles en systèmes d'équations algébriques qui peuvent être résolus numériquement. La technique des volumes finis consiste à intégrer les équations aux dérivées partielles sur chaque volume de contrôle, pour obtenir les équations discrétisées qui conservent toutes les grandeurs physiques sur le volume de contrôle considéré [63,64].

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

$$\frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon \rho \phi) + \text{div}(\varepsilon \rho u \phi) = \text{div}(\Gamma \text{grad}(\phi)) + S_\phi \quad (3-9)$$

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

La méthode des volumes finis comporte les étapes suivantes:

- décomposition du domaine du problème en un nombre fini de volumes de contrôle ;
- approximation des valeurs des fonctions et des dérivés par interpolation avec des valeurs nodales et ;
- assemblage et solution du système algébrique discret.

3.3.2. Maillage (Décomposition du domaine en volumes de contrôle)

Comme toutes les méthodes de discrétisation, la méthode des volumes finis nécessite d'abord une décomposition spatiale du domaine de calcul. Cela se fait généralement par la définition d'une structure de grille appropriée couvrant le domaine du problème. Une grille est définie par ses cellules élémentaires (volume de contrôle). Dans notre cas le domaine de calcul représenté dans la figure 3.1, est divisé en un nombre fini de volumes de contrôle de la forme présentée dans la figure 3.2.

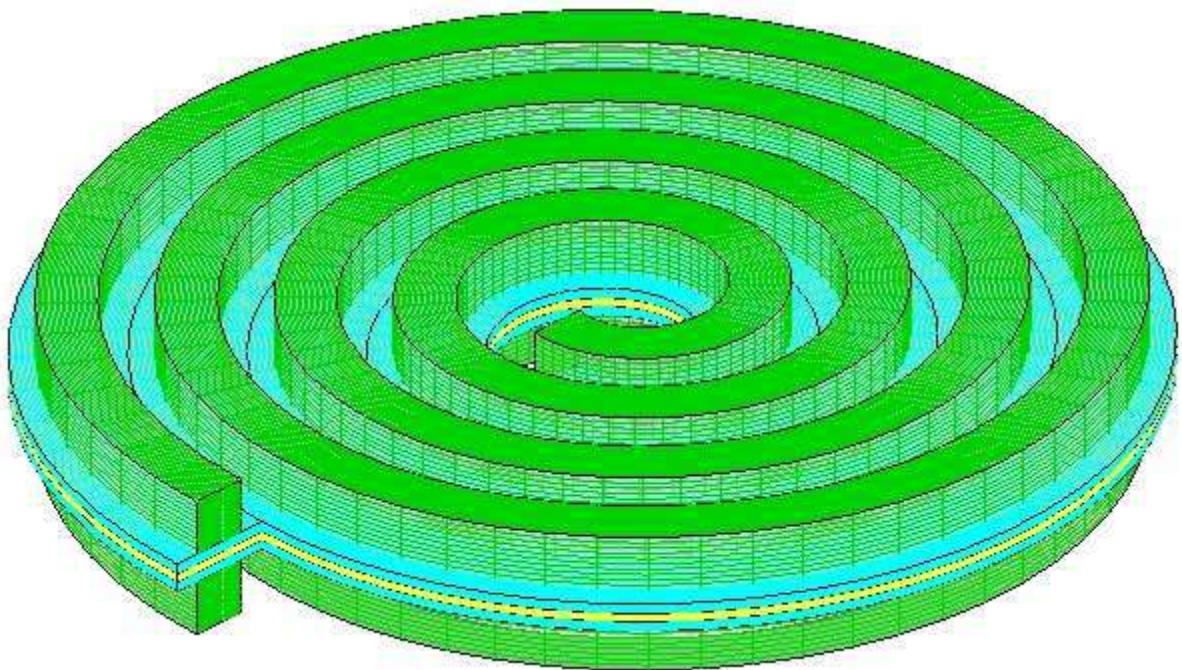


Figure 3.1. Présentation du maillage

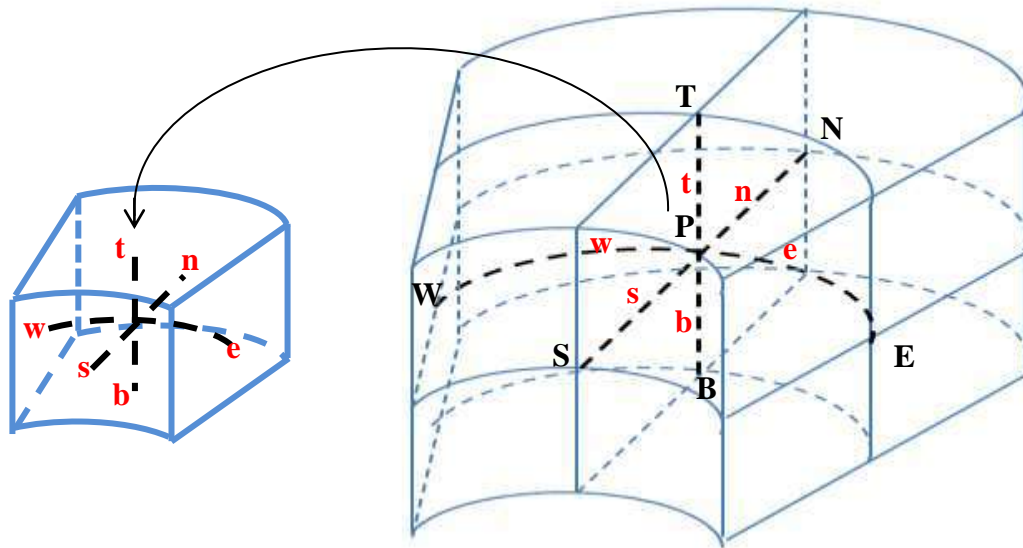
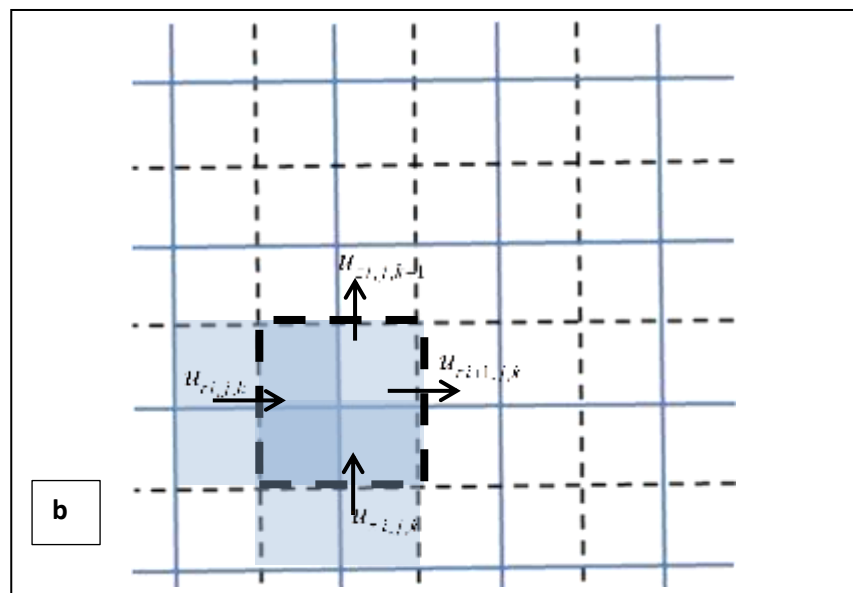
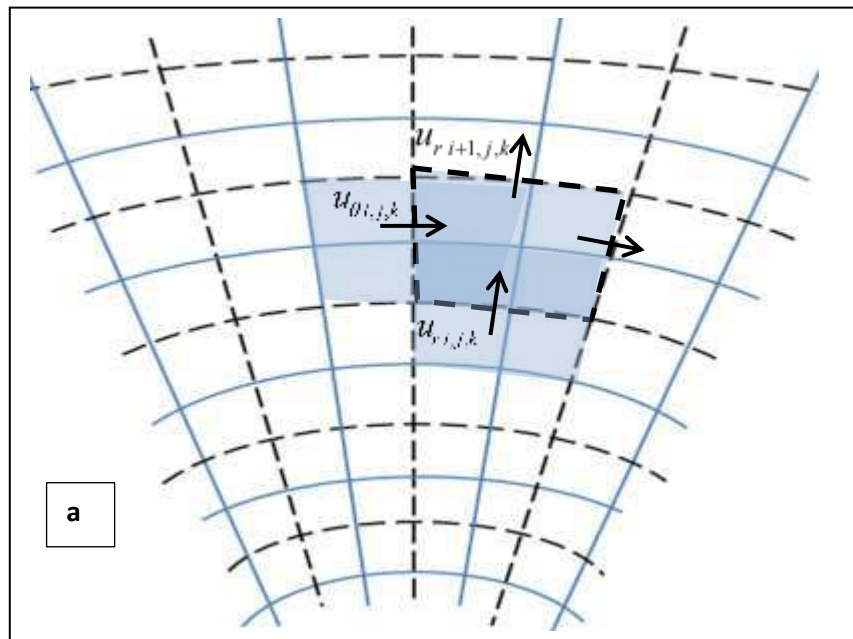


Figure 3.2 : *Volume de contrôle.*

La procédure de résolution de l'équation de transport d'une propriété scalaire ϕ peut être employée pour résoudre les équations de quantité de mouvement. Cependant, nous devons tout d'abord, décider où stocker les vitesses. Il semble logique de les définir dans les mêmes endroits que les variables scalaires telles que la pression et la température. Cependant, si les vitesses et les pressions sont définies aux nœuds d'un volume de contrôle ordinaire, un champ de pression hautement non uniforme peut agir comme un champ uniforme dans les équations de quantité de mouvement discrétisées. Autrement dit, si on définit les vitesses dans les nœuds centraux des volumes de contrôle (dans les mêmes endroits que la pression), l'influence de la pression ne sera pas correctement représentée dans les équations de quantité de mouvement discrétisées.

Un remède à ce problème consiste à d'utiliser une grille décalée pour chaque composante de la vitesse. Cette idée a été proposée par Harlow et Welch en 1965 en utilisant un système de coordonnées cartésiennes [65]. Ils ont proposé d'évaluer les variables scalaires telles que la pression, la température, et les concentrations des espèces aux points nodaux ordinaires, et calculer les composantes de la vitesse sur des grilles décalées centrées autour des faces des cellules de la grille principale.

L'arrangement du maillage pour un calcul tridimensionnel en coordonnée cylindriques est illustré dans la figure 3.3.



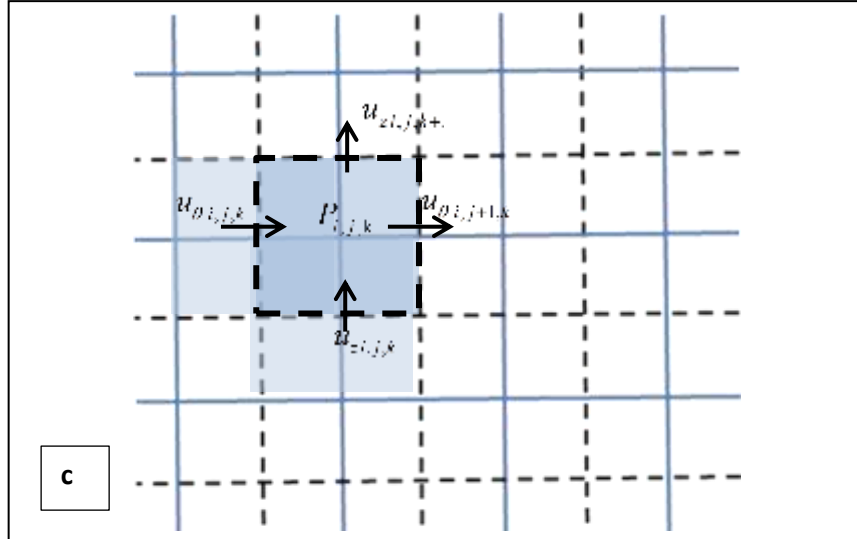


Figure 3.3 : Maillage décalé ; a) plan (r, θ) .b) plan (r, z) .c) plan (θ, z) .

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

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

$$\begin{aligned} \iiint_{VC} \int_t^{t+\Delta t} \left(\frac{\partial}{\partial t}(\rho \varepsilon \phi) + \frac{\partial}{\partial r}(\rho \varepsilon u_r \phi) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta}(\rho \varepsilon u_\theta \phi) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho \varepsilon u_z \phi) \right) dt dV = \\ \iiint_{VC} \int_t^{t+\Delta t} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\Gamma r \frac{\partial}{\partial r}(\phi) \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\Gamma \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta}(\phi) \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\Gamma \frac{\partial}{\partial z}(\phi) \right) + S_\phi \right) dt dV \end{aligned} \quad (3-10)$$

Avec : $dV = dr.r d\theta.dz$ (3-11)

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

Une approche de type volume de contrôle exige que l'on définisse autour du point P_{ijk} un volume élémentaire, comme représenté sur figure 3.2, sur lequel on va intégrer l'équation aux dérivées partielles. Pour deux points voisins, les volumes de contrôle

respectifs doivent posséder une facette commune. Il s'ensuit que la réunion de tous les volumes de contrôle couvre l'ensemble du domaine de calcul représenté dans la figure 3.1.

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

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

3.3.4.1. Discrétisation temporelle

Les équations de conservation seront discrétisées en temps sur un nombre fini d'intervalles de longueur constante $[t_n, t_n + \Delta t]$, $0 \leq n \leq N$ selon un schéma implicite. La discrétisation implicite permet de s'affranchir des conditions de stabilité mais exige la résolution de systèmes algébriques à chaque pas de temps contrairement à la discrétisation explicite qui permet d'éviter la résolution des systèmes d'équations algébriques mais elle exige la vérification des conditions de stabilité [66]. L'intégration du terme d'accumulation de l'équation de transport sur un pas de temps et sur un volume de contrôle peut être exprimée par l'équation (3-12) :

$$\begin{aligned} \iiint_{VC} \int_t^{t+\Delta t} \left(\frac{\partial}{\partial t} (\rho \varepsilon \phi) \right) dt dV &= \left((\rho \varepsilon \phi_p)^{t+\Delta t} - (\rho \varepsilon \phi_p)^t \right) \frac{(r_n^2 - r_s^2)}{2} \Delta \theta \Delta z \\ &= \left((\rho \varepsilon \phi_p)^{t+\Delta t} - (\rho \varepsilon \phi_p)^t \right) \Delta V \end{aligned} \quad (3-12)$$

3.3.4.2. Discrétisation spatiale

L'intégration des différents termes convectifs et diffusifs sur le volume de contrôle est présentée dans les tableaux 3.1 et 3.2.

Le problème principal de la discrétisation spatiale de l'équation de transport réside dans l'évaluation des termes convectifs, autrement dit comment calculer la valeur

de la propriété transportée " ϕ " aux faces du volume de contrôle et ses flux convectifs à travers ses faces. Une méthode de différences centrées est introduite pour la discrétisation des termes de diffusion ce qui, pratiquement, ne fonctionne pas pour les termes convectifs. Pour assurer ainsi la stabilité du calcul numérique, il faut chercher autres schémas de discrétisation pour le terme de convection. Le schéma qu'on a choisi dans ce travail est le schéma en puissance.

Tableau 3.1. Discrétisation des termes convectifs

Terme convectif radial	
$\int_t^{t+\Delta t} \iiint_{VC} \left(\frac{\partial}{\partial r} (\rho \varepsilon u_r \phi) \right) r dr d\theta dz dt = (F_n \phi_n - F_s \phi_s) \Delta t$	
$F_s = \rho \varepsilon u_r r_s \Delta \theta \Delta z$	$F_n = \rho \varepsilon u_r r_n \Delta \theta \Delta z$
Terme convectif angulaire (tangential)	
$\int_t^{t+\Delta t} \iiint_{VC} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} (\rho \varepsilon u_\theta \phi) \right) r dr d\theta dz dt = (F_e \phi_e - F_w \phi_w) \Delta t$	
$F_w = \varepsilon \rho u_w \Delta r \Delta z$	$F_e = \varepsilon \rho u_e \Delta r \Delta z$
Terme convectif vertical	
$\int_t^{t+\Delta t} \iiint_{VC} \left(\frac{\partial}{\partial z} (\rho \varepsilon u_z \phi) \right) dv dt = (F_t \phi_t - F_b \phi_b) \Delta t$	
$F_b = \frac{1}{2} \varepsilon \rho u_{zb} (r_n^2 - r_s^2) \Delta \theta$	$F_t = \frac{1}{2} \varepsilon \rho u_{zt} (r_n^2 - r_s^2) \Delta \theta$

Tableau 3.2. Discrétisation des termes diffusifs

Terme diffusif radial	
$\int_t^{t+\Delta t} \iiint_{VC} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\Gamma r \frac{\partial}{\partial r} (\phi) \right) r dr d\theta dz dt = (D_n (\phi_N - \phi_P) - D_s (\phi_P - \phi_S)) \Delta t$	
$D_n = \Gamma_n \frac{r_n \Delta \theta \Delta z}{\delta r_{PN}}$	$D_s = \Gamma_s \frac{r_s \Delta \theta \Delta z}{\delta r_{SP}}$
Terme diffusif angulaire (tangential)	
$\int_t^{t+\Delta t} \iiint_{VC} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\Gamma \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} (\phi) \right) r dr d\theta dz dt = (D_e (\phi_E - \phi_P) - D_w (\phi_P - \phi_W)) \Delta t$	

$D_e = \Gamma_e \frac{\Delta r \Delta z}{r_p \delta \theta_{EN}}$	$D_w = \Gamma_w \frac{\Delta r \Delta z}{r_p \delta \theta_{WP}}$
Terme diffusif vertical	
$\int_t^{t+\Delta t} \iiint_{VC} \frac{\partial}{\partial z} \left(\Gamma \frac{\partial}{\partial z} (\phi) \right) r dr d\theta dz dt = (D_i (\phi_T - \phi_P) - D_b (\phi_P - \phi_B)) \Delta t$	
$D_i = \Gamma_t \frac{(r_n^2 - r_s^2) \Delta \theta}{2 \delta z_{PT}}$	$D_b = \Gamma_b \frac{(r_n^2 - r_s^2) \Delta \theta}{2 \delta z_{BP}}$

3.3.4.3. Terme source

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

$$\int_t^{t+\Delta t} \iiint_{VC} S_\phi dv dt = (S_p \phi_p + S_u) \Delta V \tag{3-13}$$

Lors de la linéarisation du terme source $S = S_p \phi_p + S_u$ la pente S_p doit être négative ou nulle car sinon on peut avoir $a_p < 0$, et tous les coefficients doivent avoir le même signe dans l'équation discrétisée

Tableau 3.3. Termes source des différentes équations de conservation

	S_p	S_u
u_r	$-\left(\frac{\mu}{r^2} + \frac{\varepsilon^2 \mu}{k} \right)$	$-\left(\frac{\varepsilon \rho u_\theta^2}{r} + \mu \varepsilon \frac{2}{r^2} \frac{u_{\theta e} - u_{\theta w}}{\Delta \theta} \right)$
u_θ	$-\left(\frac{\varepsilon \rho u_r}{r} + \frac{\mu \varepsilon}{r^2} + \frac{\varepsilon^2 \mu}{k} \right)$	$-\left(\mu \varepsilon \frac{2}{r^2} \frac{u_{re} - u_{rw}}{\Delta \theta} \right)$
u_z	$-\frac{\varepsilon^2 \mu}{k}$	0
T	0	$(\eta_{act} - \eta_{ohm}) i$
C_{O_2}	0	$-\frac{j_c}{4F}$
C_{H_2}	0	$-\frac{j_a}{2F}$
C_{H_2O}	0	$\frac{j_c}{2F}$

3.3.5. Assemblage du système algébrique discret.

En appliquant le schéma implicite pour le temps, après une substitution dans l'équation transport, on obtient la forme discrétisée suivante :

$$\begin{aligned}
 a_p^0 (\phi_p^{t+\Delta t} - \phi_p^t) &+ (F_e \phi_e - F_w \phi_w) + (F_n \phi_n - F_s \phi_s) + (F_t \phi_t - F_b \phi_b) \\
 &= (D_e (\phi_e - \phi_p) - D_w (\phi_p - \phi_w)) \\
 &+ (D_n (\phi_n - \phi_p) - D_s (\phi_p - \phi_s)) \\
 &+ (D_t (\phi_t - \phi_p) - D_b (\phi_p - \phi_b)) + (S_p \phi_p + S_u) r \Delta r \Delta \theta \Delta z
 \end{aligned} \tag{3-14}$$

Avec :

$$a_p^0 = \varepsilon \rho \frac{\Delta V}{\Delta t} \tag{3-15}$$

a) Le schéma de discrétisation spatial

On trouve dans la littérature Plusieurs schémas qui traite les termes de convection et de diffusion ensemble :

- Le schéma centré qui est valable pour $|Pe| < 2$
- Le schéma "upwind" qui est non approprié pour les faibles valeurs de $|Pe|$;
- Le schéma exponentiel qui a un coût (au point de vue numérique) élevé ;
- Le schéma hybride est acceptable mais ceci donne une erreur maximale pour $|Pe| \approx 2$
- Et le schéma en puissance "Power Law" qui est recommandé pour les problèmes de convection-diffusion.

Donc, le schéma en puissance est choisi pour la discrétisation des termes convectifs, Ce schéma a l'avantage qu'il est moins coûteux que le schéma exponentiel, tout en reproduisant son comportement. Après un réarrangement de la formule (3-14) on aura la forme finale:

$$ap.\phi_P^{t+\Delta t} = aw.\phi_W^{t+\Delta t} + ae.\phi_E^{t+\Delta t} + as.\phi_S^{t+\Delta t} + an.\phi_N^{t+\Delta t} + ab.\phi_B^{t+\Delta t} + at.\phi_T^t + a_p^0.\phi_P^{t+\Delta t} + S_u.\Delta V \quad (3-16)$$

Les coefficients de l'équation (3-16) sont donnés par :

$$\left\{ \begin{array}{l} a_w = D_w \cdot \max \left[0, (1 - 0.1 |Pe_w|)^5 \right] + \max [+F_w, 0] \\ a_s = D_s \cdot \max \left[0, (1 - 0.1 |Pe_s|)^5 \right] + \max [+F_s, 0] \\ a_b = D_b \cdot \max \left[0, (1 - 0.1 |Pe_b|)^5 \right] + \max [+F_b, 0] \\ a_e = D_e \cdot \max \left[0, (1 - 0.1 |Pe_e|)^5 \right] + \max [-F_e, 0] \\ a_n = D_n \cdot \max \left[0, (1 - 0.1 |Pe_n|)^5 \right] + \max [+F_n, 0] \\ a_t = D_t \cdot \max \left[0, (1 - 0.1 |Pe_t|)^5 \right] + \max [+F_t, 0] \\ ap = aw + ae + as + an + ab + at + a_p^0 + S_p \cdot \Delta V \end{array} \right. \quad (3-17)$$

L'intégration de l'équation de transport sur un nombre fini de volumes de contrôle donne un système d'équations de conservation discrétisées impliquant des flux de la propriété transportée " ϕ " à travers les faces des volumes de contrôle.

Pour assurer la conservation de " ϕ " sur tout le domaine de la solution, le flux de " ϕ " quittant un volume de contrôle sur une certaine face doit être égal au flux de " ϕ " entrant dans le volume de contrôle adjacent par la même face. Pour ce faire, le flux à travers une face commune doit être représenté de manière cohérente (par une seule et même expression) dans des volumes de contrôle adjacents :

$$ap.\phi_{i,j,k}^{t+\Delta t} = aw.\phi_{i,j-1,k}^{t+\Delta t} + ae.\phi_{i,j+1,k}^{t+\Delta t} + as.\phi_{i-1,j,k}^{t+\Delta t} + an.\phi_{i+1,j,k}^{t+\Delta t} + ab.\phi_{i,j,k-1}^{t+\Delta t} + at.\phi_{i,j,k+1}^t + a_p^0.\phi_{i,j,k}^{t+\Delta t} + S_{ui,j,k} \cdot \Delta V$$

Discrétisation de l'équation de pression

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

$$\nabla(\Gamma \cdot \nabla(\phi)) + S_\phi = 0 \quad (3-18)$$

Sa forme discrétisée devient :

$$ap\phi_P^{t+\Delta t} = aw\phi_W^{t+\Delta t} + ae\phi_E^{t+\Delta t} + as\phi_S^{t+\Delta t} + an\phi_N^{t+\Delta t} + ab\phi_B^{t+\Delta t} + at\phi_T^{t+\Delta t} + S_p \Delta V \quad (3-19)$$

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

3.4. Résolution du système algébrique discret.

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

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

3.4.1. Méthode ADI

Cette méthode est proposée par *Peaceman* et *Rachford* en 1955 [67]. C'est une méthode à schéma implicite, elle est stable quelle que soit les valeurs des pas de temps et d'espace [68]. Cette méthode est largement utilisée dans la résolution des problèmes de la convection naturelle en régime transitoire. Le domaine de calcul est discrétisé selon un maillage uniforme suivant les trois directions de l'espace. Pour chaque pas de temps l'ADI donne lieu à trois systèmes matriciels tridiagonaux. Chaque système est un résultat d'une discrétisation implicite selon une direction et une discrétisation explicite selon les deux autres directions; autrement dit, pour chaque étape de temps [69], la solution est obtenue en balayant le domaine de calcul dans la direction radiale " r ", puis dans la direction tangentielle " θ " et enfin dans la direction verticale " z ".

– 1^{er} direction

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

$$-aw_{i,j,k} \phi_{i-1,j,k}^{t+\frac{1}{3}\Delta t} + ap_{i,j,k} \phi_{i,j,k}^{t+\frac{1}{3}\Delta t} - ae_{i,j,k} \phi_{i+1,j,k}^{t+\frac{1}{3}\Delta t} = +as_{i,j,k} \phi_{i,j-1,k}^t + an_{i,j,k} \phi_{i,j+1,k}^t + ab_{i,j,k} \phi_{i,j,k-1}^t + at_{i,j,k} \phi_{i,j,k+1}^t + ap_{i,j,k}^0 \phi_{i,i,k}^t + S_{Pi,j,k} \Delta V \quad (3-20)$$

– 2ème direction

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

$$-as_{i,j,k} \phi_{i,j-1,k}^{t+\frac{2}{3}\Delta t} + ap_{i,j,k} \phi_{i,j,k}^{t+\frac{2}{3}\Delta t} - an_{i,j,k} \phi_{i,j+1,k}^{t+\frac{2}{3}\Delta t} = +aw_{i,j,k} \phi_{i-1,j,k}^{t+\frac{1}{3}\Delta t} + ae_{i,j,k} \phi_{i+1,j,k}^{t+\frac{1}{3}\Delta t} + ab_{i,j,k} \phi_{i,j,k-1}^{t+\frac{1}{3}\Delta t} + at_{i,j,k} \phi_{i,j,k+1}^{t+\frac{1}{3}\Delta t} + ap_{i,j,k}^0 \phi_{i,i,k}^{t+\frac{1}{3}\Delta t} + S_{Pi,j,k} \Delta V \quad (3-21)$$

– 3ème direction

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

$$-ab_{i,j,k} \phi_{i,j,k-1}^{t+\Delta t} + ap_{i,j,k} \phi_{i,j,k}^{t+\Delta t} - at_{i,j,k} \phi_{i,j,k+1}^{t+\frac{2}{3}\Delta t} = +aw_{i,j,k} \phi_{i-1,j,k}^{t+\frac{2}{3}\Delta t} + ae_{i,j,k} \phi_{i+1,j,k}^{t+\frac{2}{3}\Delta t} + as_{i,j,k} \phi_{i,j-1,k}^{t+\frac{2}{3}\Delta t} + an_{i,j,k} \phi_{i,j+1,k}^{t+\frac{2}{3}\Delta t} + ap_{i,j,k}^0 \phi_{i,i,k}^{t+\frac{2}{3}\Delta t} + S_{Pi,j,k} \Delta V \quad (3-22)$$

La résolution des systèmes (3-20), (3-21) et (3-22) se fait en utilisant l'algorithme de Thomas. Cet algorithme permet de calculer la solution d'un système algébrique linéaire lorsque la matrice est tridiagonale.

3.4.2. Résolution de l'équation de pression (Méthode de Gauss-Seidel)

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

$$\phi_{i,j,k}^{n+1} = (aw\phi_{i-1,j,k}^n + ae\phi_{i+1,j,k}^n + as\phi_{i,j-1,k}^n + an\phi_{i,j+1,k}^n + ab\phi_{i,j-1,k}^n + at\phi_{i,j,k+1}^n + b_{i,j,k}) / ap \quad (3-23)$$

La condition de convergence est :

$$|\phi_{i,j,k}^{n+1} - \phi_{i,j,k}^n| \leq \varepsilon \quad (3-24)$$

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

La phase finale du travail, pour obtenir les résultats, est de développer un programme de calcul en se basant sur ces équations discrétisées. Un programme FORTRAN a été développé sur la base de l'algorithme de calcul présenté dans la figure 3.5. Les étapes principales de création de la géométrie et de génération du maillage sont présentées dans la figure 3.4.

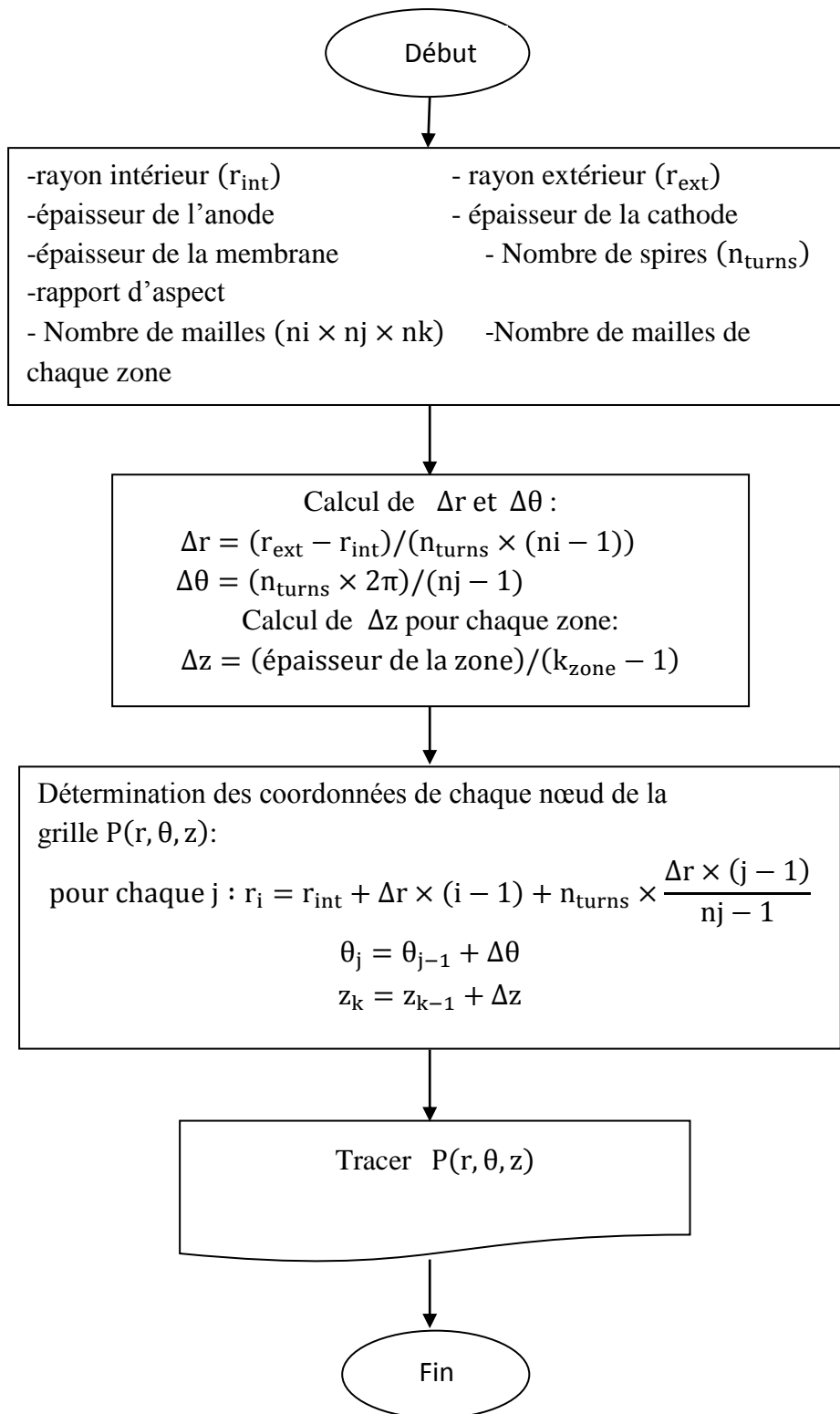


Figure3.4 : Algorithme de création de la géométrie et du maillage.

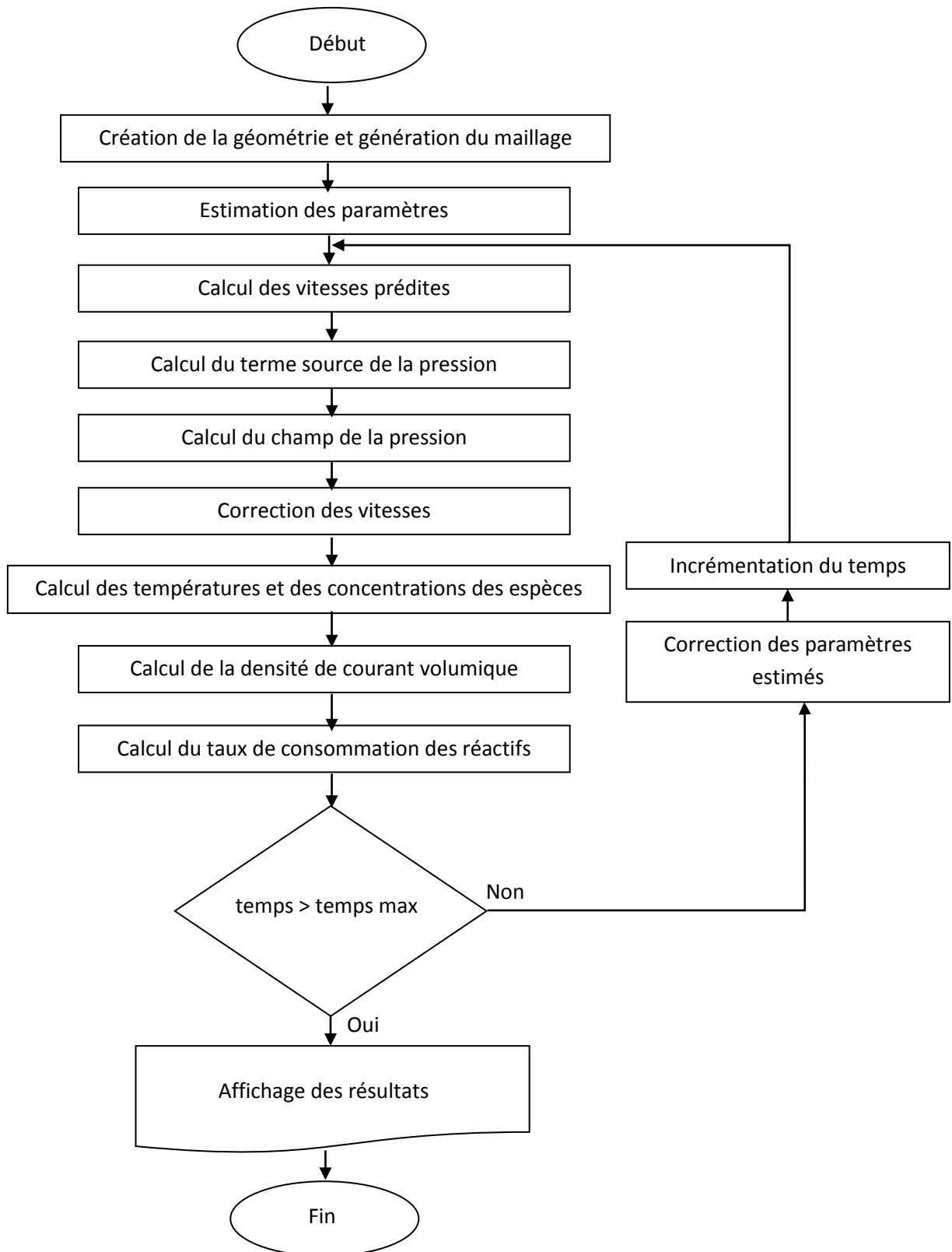


Figure 3.5. Programme de calcul.

CHAPITRE IV

Résultats et interprétations

4.1. Introduction

Après avoir défini le modèle mathématique régissant les phénomènes de transfert de chaleur et de masse dans le cas de la cellule d'une pile planaire à canaux en spirale de type PEMFC, et après avoir discrétisé les équations gouvernantes du problème, nous avons développé un programme en utilisant le langage FORTRAN afin d'étudier l'influence des paramètres physiques et géométriques tels que, la vitesse d'écoulement, la largeur et la longueur du canal, et la direction d'écoulement sur la distribution des températures et des concentrations des réactifs. L'écoulement a été supposé laminaire incompressible, monophasique et instationnaire. Dans ce chapitre, on va présenter et discuter les résultats de la simulation dans l'un des plans représentés sur la figure 4.1:

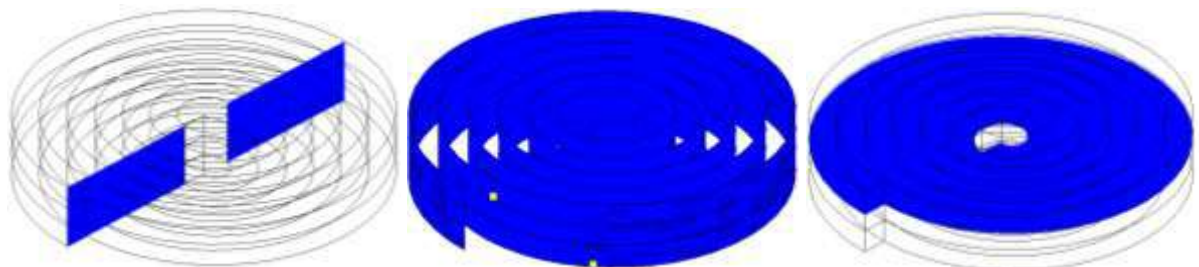


Fig. 4.1 : Plans de présentation des résultats

4.2. Influence du maillage sur les résultats de la simulation

Afin de vérifier l'influence du maillage sur les résultats obtenus, plusieurs grilles de différentes tailles caractérisées par le nombre de mailles utilisées ont été testées comme le montre la figure 4.2. Celle représentant la plus faible différence dans la densité de puissance a été sélectionnée pour résoudre les équations gouvernantes du problème. On a constaté que la grille adéquate est celle obtenue pour un nombre de 432000 nœuds avec une erreur inférieure à 1,5%.

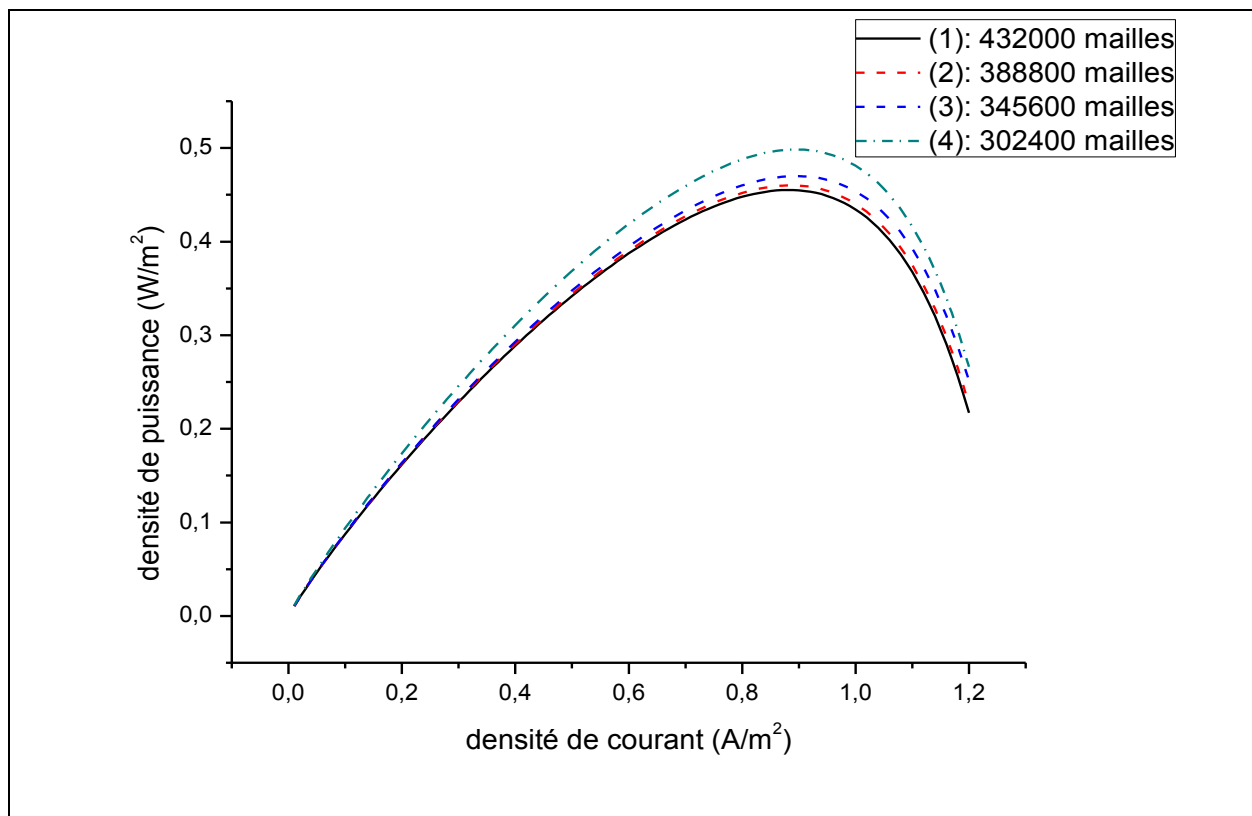


Fig. 4.2. Vérification de la dépendance des résultats à la taille de la grille.

(1) : 40*30*270 pour les milieux poreux et 20*20*270 pour les canaux

(2) : 36*30*270 pour les milieux poreux et 18*20*270 pour les canaux

(3) : 32*30*270 pour les milieux poreux et 16*20*270 pour les canaux

(4) : 28*30*270 pour les milieux poreux et 04*20*270 pour les canaux

4.3. Distribution des vitesses

Les profils des vitesses, dont la distribution est représentée dans la figure 4.3, sont laminaires et prennent la forme du profil de Poiseuille où la vitesse la plus élevée dans chaque canal est située en son centre. Ce profil est maintenu tout le long du canal en spirale. Les vitesses des côtés cathodique et anodique sont égales comme le montre la figure 4.3. La vitesse d'écoulement dans les couches de diffusion est négligeable par rapport à celle dans les canaux, ce qui nous ramène à conclure que les processus de transfert de masse et de chaleur sont faits respectivement par diffusion et par conduction. Le transfert convectif devient négligeable à cause de la faible vitesse d'écoulement dans la GDL.

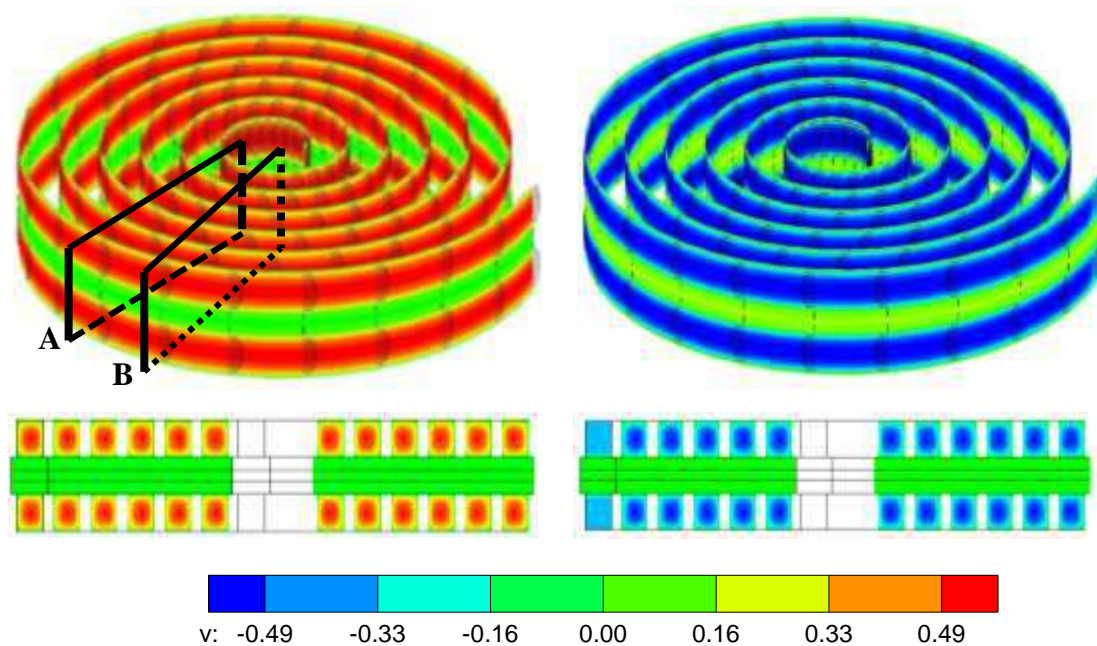


Fig. 4.3. Distributions axiales de la vitesse le long des canaux en spirale (m/s).

Les vecteurs de vitesse dans la GDL du côté de l'anode sont représentés sur la figure 4.4 qui montre le champ des vitesses dans deux plans verticaux (A) et (B) perpendiculaires au sens d'écoulement comme indiqué sur la figure 4.3. La figure 4.4.a. montre que les vitesses dans le plan (A) sont dirigées du canal vers la couche de catalyseur afin d'alimenter les réactions électrochimiques en réactifs. Cependant, la figure 4.4.b. montre que le retour de l'écoulement se fait vers le canal, ce

qui explique que les vitesses soient dirigées de la couche de catalyseur vers le canal. Ce retour d'écoulement permet d'évacuer l'eau et la chaleur produites dans la couche de catalyseur.

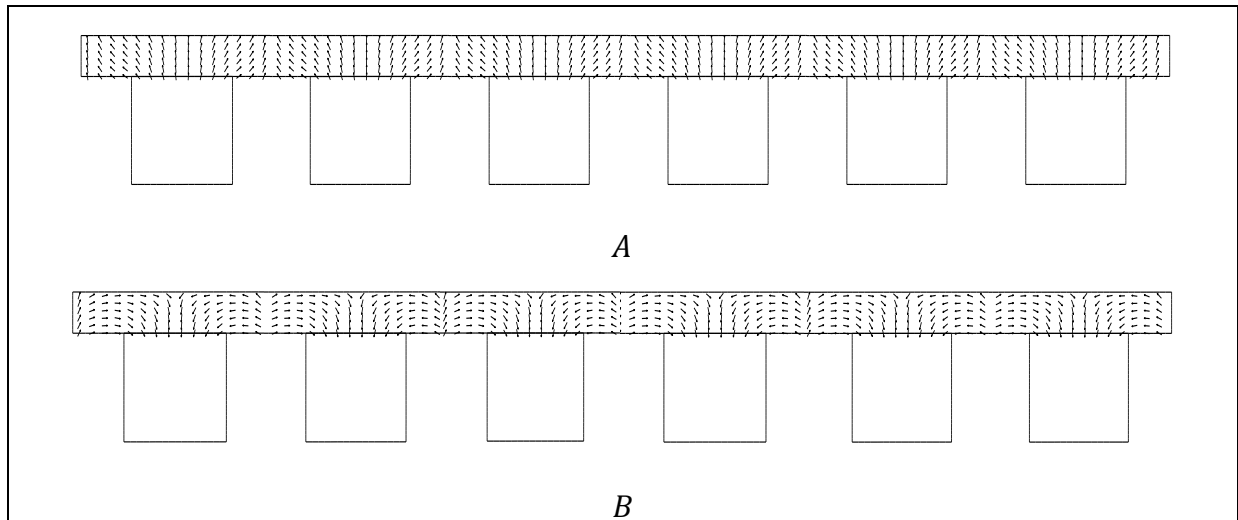


Fig. 4.4. Distribution de la vitesse dans la couche de diffusion.

4.4. Distribution des concentrations des réactifs

Les distributions des concentrations molaires en hydrogène et en oxygène dans le cœur de la cellule et aux interfaces GDL/CL sont montrées sur les figures 4.5 et 4.6. On remarque que les concentrations des réactifs diminuent graduellement en allant de l'entrée vers la sortie de la cellule à cause de la consommation des réactifs dans les couches de catalyseur le long du chemin en spirale. Dans les GDL, les concentrations des réactifs sous les parties pleines (nervures) des plaques bipolaires sont plus faibles que celles sous les parties creuses (canaux). Au niveau des couches catalytiques, où les réactions électrochimiques se déroulent, les réactifs sont consommés pour produire l'eau, la chaleur et la densité de courant électrique. Au niveau des interfaces GDL/CL, les concentrations des réactifs atteignent des valeurs très proches de zéro, ce qui engendre un gradient de concentrations entre les canaux d'écoulements et les couches de catalyseur. Ce gradient assure le déplacement des réactifs, par diffusion, à travers les couches de diffusion des gaz pour approvisionner les réactions électrochimiques.

La concentration d'eau est maximale au niveau de la couche catalytique de la cathode où elle se produit (figure 4.7).

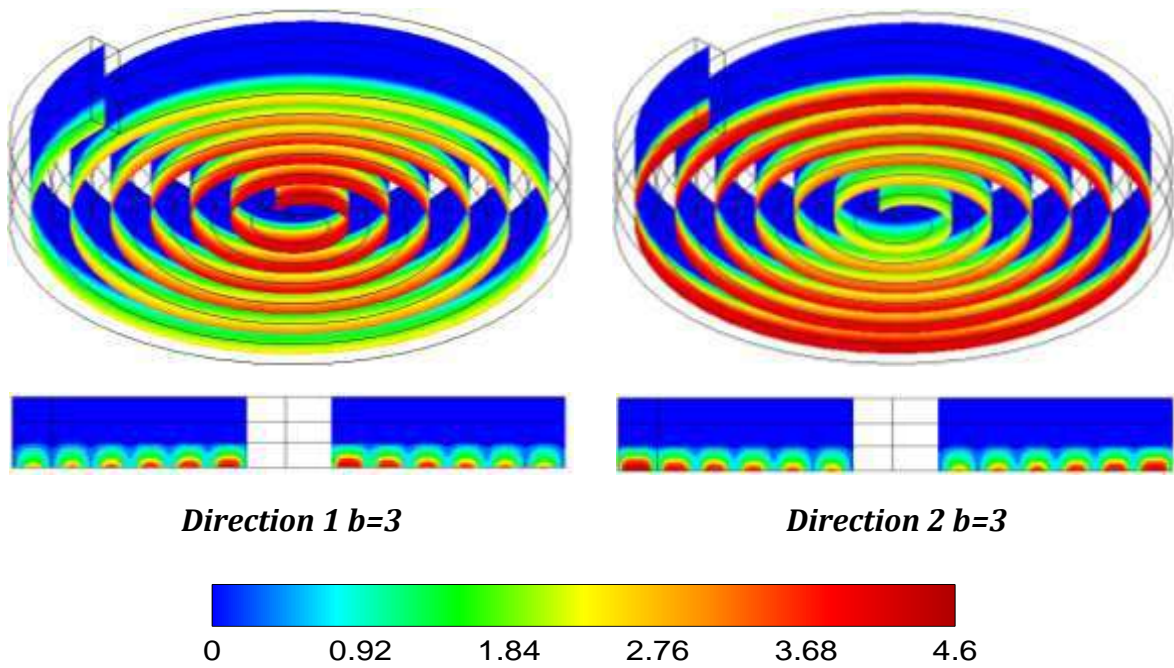


Fig. 4.5.a. Distribution de la concentration d'hydrogène dans le MEA ($n=6$, $b=3$) (kmole/m^3)

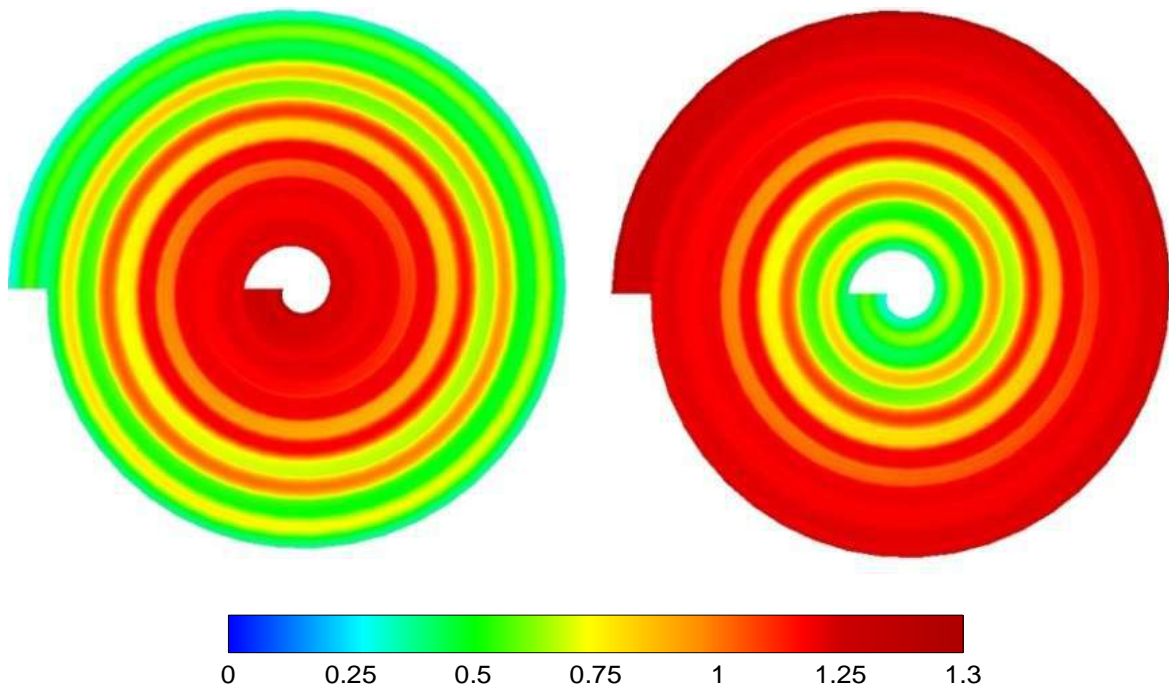


Fig. 4.5.b. Distribution de la concentration d'hydrogène à l'interface GDL/CL de l'anode ($n=6$, $b=3$) (kmole/m^3)

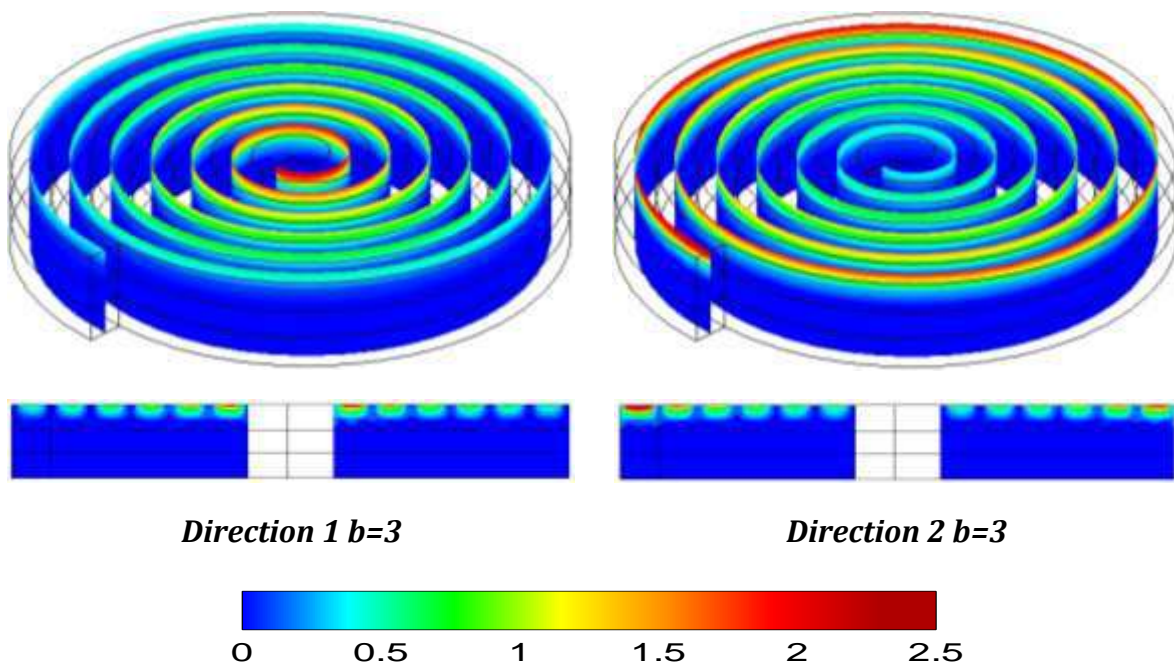


Fig. 4.6.a. Distribution axiale de la concentration d'oxygène dans le MEA ($n=6, b=3$) (kmole/m^3)

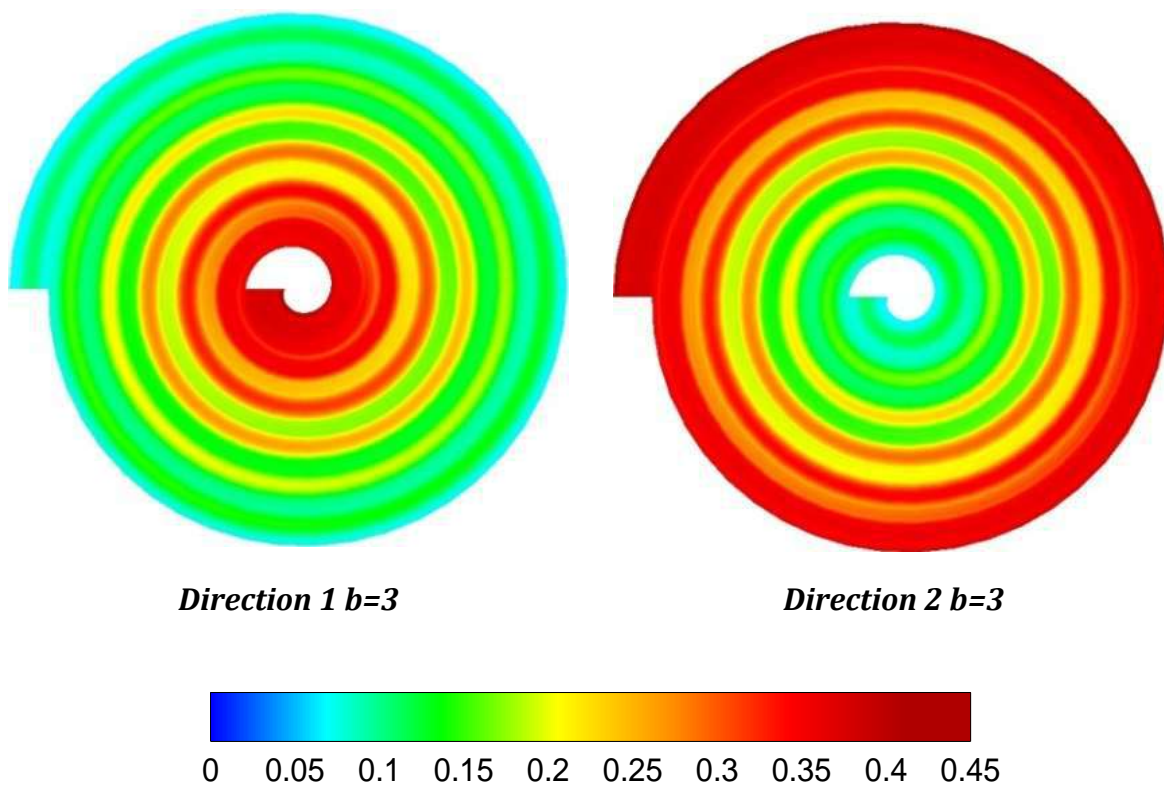


Fig. 4.6.b. Distribution de la concentration d'oxygène à l'interface GDL/CL de la cathode ($n=6, b=3$) (kmole/m^3).

4.5. Distribution de la concentration d'eau

L'étude de la répartition de la concentration d'eau est requise afin d'éviter en même temps, l'assèchement et la submersion de la membrane et d'assurer le bon fonctionnement de la cellule. Si l'eau produite dans le catalyseur de la cathode ne parvient pas à sortir de la cellule elle va s'accumuler, se condenser et bloquer les couches poreuses provoquant un effet néfaste sur le processus de transport des réactifs vers les couches actives. Ce phénomène entraîne une diminution des performances de la cellule et même entrainer son dysfonctionnement.

La distribution détaillée de la concentration molaire d'eau dans la cellule est montrée sur la Figure 4.7. L'eau est produite au niveau de la couche catalytique du côté cathodique, où on peut voir que sa concentration atteint des valeurs maximales. Par contre, elle décroît graduellement en s'éloignant de cette couche, ce qui engendre un déplacement d'eau par diffusion dans le sens de la décroissance de concentration.

L'eau produite au niveau de la cathode se divise en deux parties : la première traverse la membrane et la couche de diffusion vers le canal anodique, et la deuxième traverse la GDL vers le canal cathodique. L'eau dans les canaux est entraînée par les forces de convection dans le sens d'écoulement pour qu'elle soit évacuée vers l'extérieur : c'est la raison pour laquelle la concentration d'eau dans les canaux croît graduellement de l'entrée vers la sortie de la cellule comme montré sur la figure 4.7.c.

L'eau étant produite dans le côté cathodique, sa concentration y est plus importante que celle du côté anodique à cause de la faible perméabilité de la membrane.

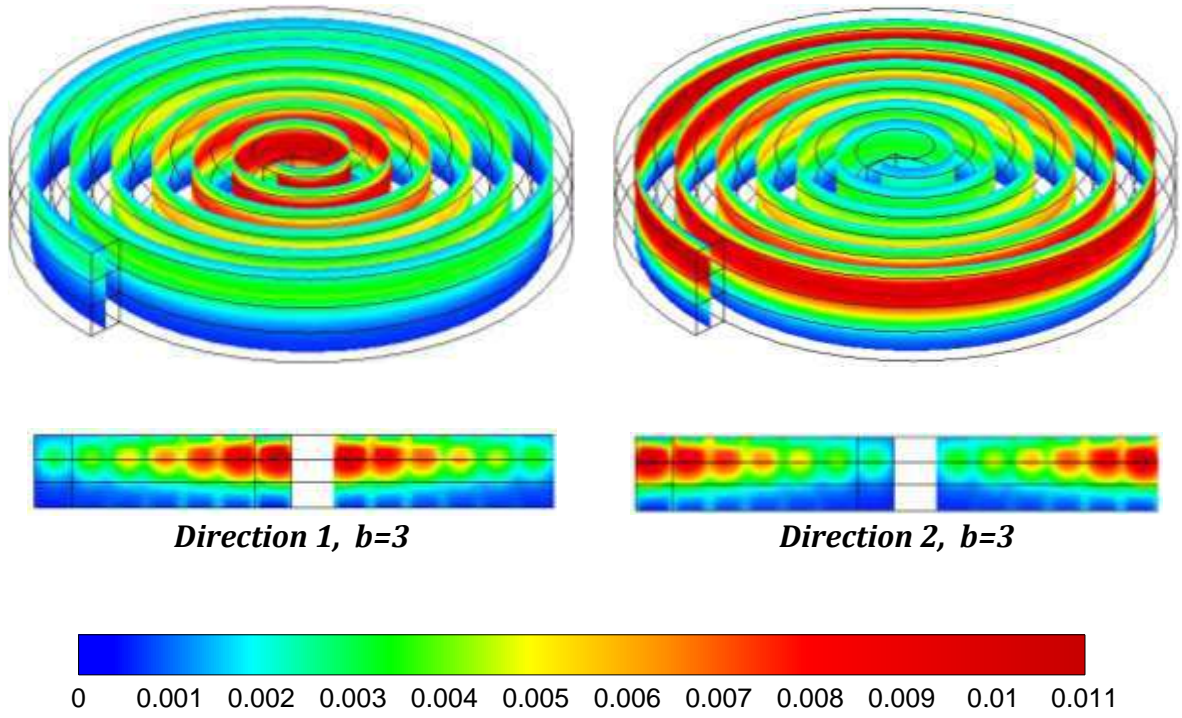


Fig. 4.7.a : Distribution axiale de la concentration d'eau dans le MEA ($n=6, b=3$) (kmole/m^3)

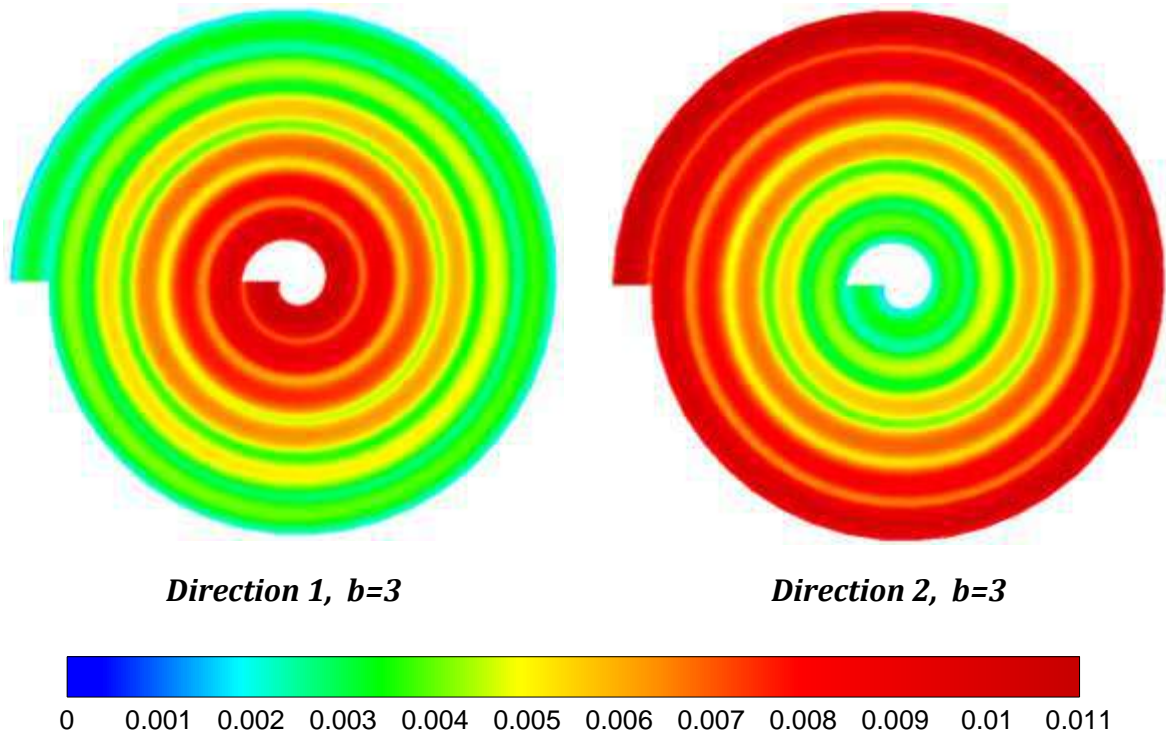


Fig. 4.7.b : Distribution de la concentration d'eau à l'interface GDL/CL de la cathode ($n=6, b=3$) (kmole/m^3)

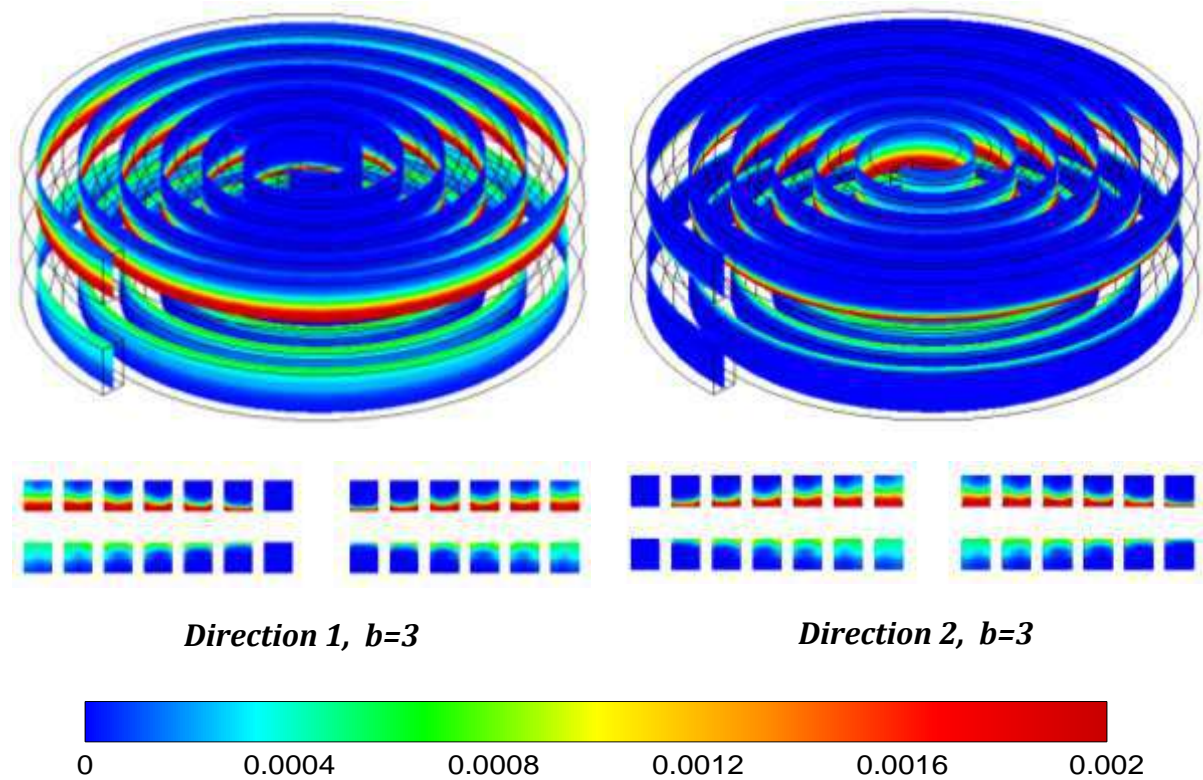


Fig. 4.7.c : Distribution de la concentration d'eau dans les canaux ($n=6$, $b=3$) (kmole/m^3)

4.6. Distribution des températures

L'étude thermique d'une PEMFC est indispensable, car l'augmentation de la température peut sécher la membrane et même entraîner sa rupture alors que sa diminution favorise la condensation de l'eau qui peut la noyer. La Figure 4.8 montre la répartition de la température à l'intérieur du cœur de la cellule et à l'interface GDL/CL du côté cathodique. Il est clair que la distribution de la température ressemble à celle de la concentration d'eau. En effet, la température la plus élevée est enregistrée au niveau de la cathode et plus on s'éloigne de la couche catalytique, la température s'abaisse. Ce gradient de température génère un flux de chaleur entre la couche catalytique contenant la source de chaleur, et les autres éléments plus froids.

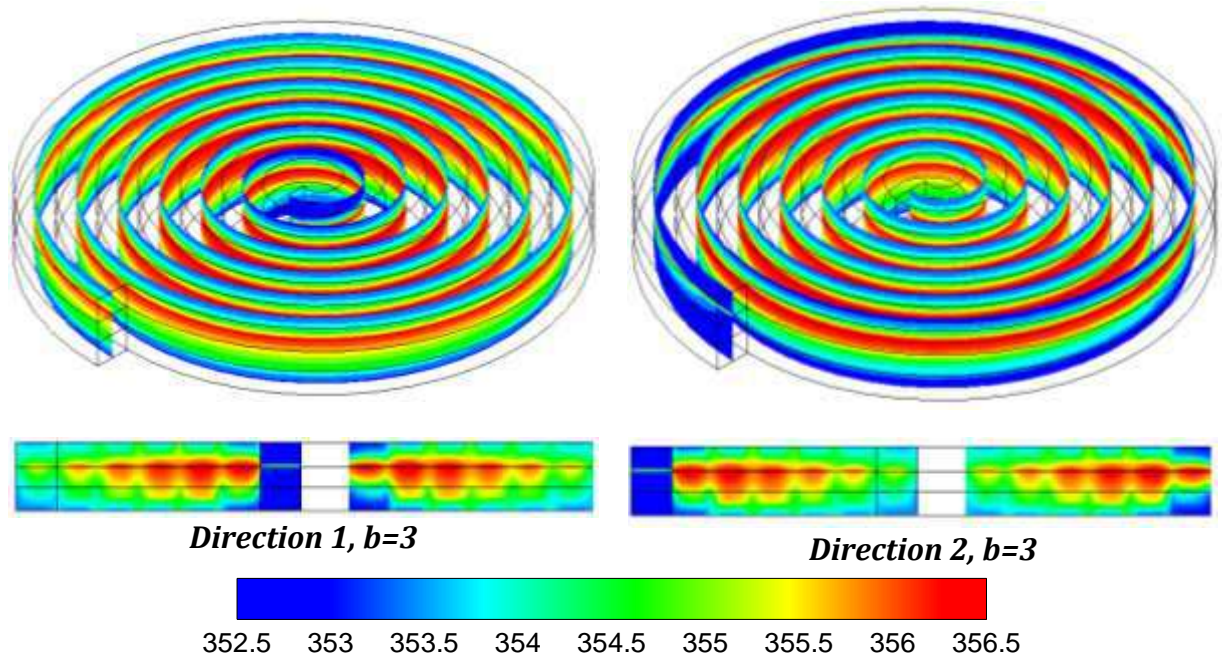


Fig. 4.8.a : Distribution de la température dans le cœur de la cellule (K).

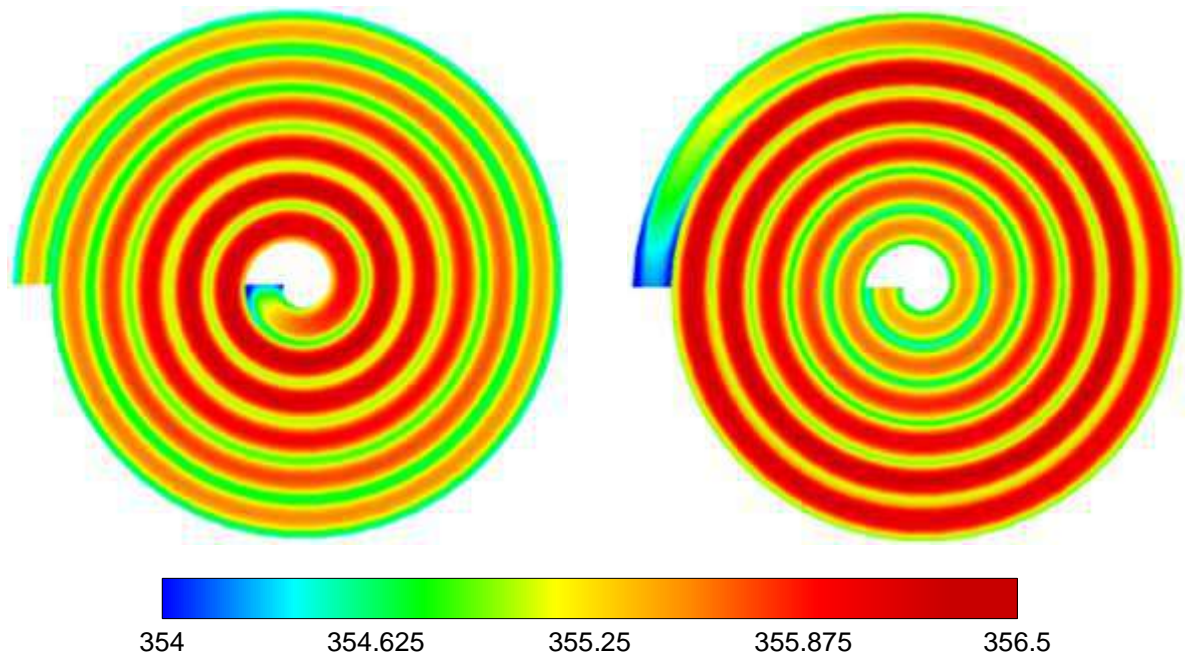


Fig. 4.8.b : Distribution de la température à l'interface GDL/CL de la cathode (K).

La chaleur dans la cellule provient de plusieurs sources :

- les sources provoquées par effet Joule : elles sont situées dans la membrane en raison de sa résistance protonique. La résistance électrique des GDL et des plaques bipolaires est souvent négligée en raison de leur haute conductivité.

- les sources provoquées par les réactions électrochimiques aux niveaux des catalyseurs: la réduction d'oxygène étant à l'origine d'une source de chaleur et l'oxydation d'hydrogène d'un dissipateur de chaleur qui varient proportionnellement à l'entropie de chaque demi-réaction et à la densité de courant produite. A cause des surtensions d'activation, les chutes de tension aux couches catalytiques entraînent aussi une génération de chaleur dans ces zones.

En raison de la réaction exothermique à la cathode, on remarque que cette dernière est plus chaude que l'électrode opposée. On remarque aussi que la température la plus élevée se situe dans la zone à proximité de l'entrée du canal d'écoulement à cause du taux de réaction électrochimique élevé dans cette zone.

4.7. Effet des différents paramètres sur les performances de la cellule

4.7.1. Effet de la direction d'écoulement

Pour étudier l'effet de la direction d'écoulement, on a fixé tous les paramètres qui peuvent influencer sur le fonctionnement de la cellule et on a fait varier uniquement le sens d'écoulement. Autrement dit, la comparaison entre les deux cas est faite pour la même surface de réaction électrochimique, les mêmes conditions de fonctionnement et les mêmes propriétés physiques de la cellule.

Les effets de la direction d'écoulement sur la répartition des concentrations dans les couches de diffusion de gaz sont illustrés sur les figures 4.5 et 4.6 pour les réactifs et sur les figures 4.7 et 4.8 pour l'eau et la température.

Pour les deux cas, on peut remarquer une forte concentration de réactifs à l'entrée de la cellule qui ensuite diminue, en se déplaçant le long du chemin en spirale vers la sortie de la cellule, où le flux de gaz sort des couches de diffusion et évacue l'eau produite lors des réactions électrochimiques. À la sortie de la cellule, les concentrations des réactifs sont faibles dans les zones au-dessous des nervures pour les raisons suivantes :

- 1- les forces de convection entraînent les gaz qui n'ont pas réagi à l'extérieur des GDL ;
- 2- le taux de consommation élevé dans les zones du catalyseur situées sous le canal, réduit la quantité de réactifs transférée vers les zones situées sur les nervures.

Dans le cas de la deuxième direction, la forme spirale du canal génère une force centrifuge opposée à la direction de l'écoulement, ce qui donne plus de temps à la réaction électrochimique et augmente le taux de consommation des réactifs. En conclusion, l'alimentation de la pile à combustible du côté extérieur du canal améliore la production de densité de courant et améliore à son tour, la performance de la cellule et rend par conséquent, cette direction plus rentable par rapport à la première.

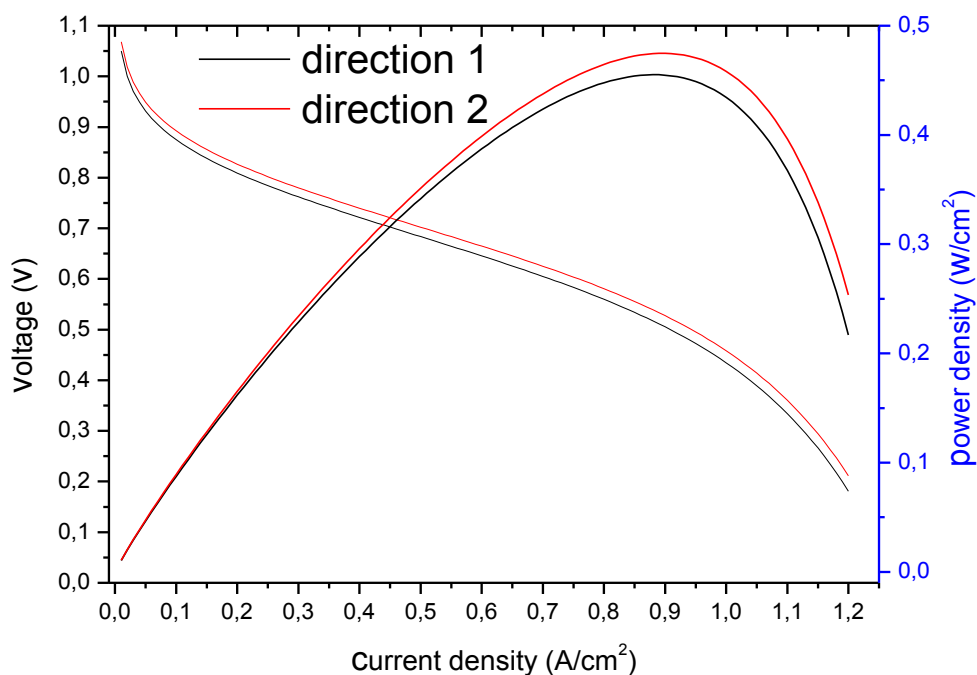


Fig. 4.9. Effet de la direction d'écoulement sur les performances de la cellule pour $N=6$, et $b=3$.

4.7.2. Effet de la vitesse d'écoulement

Dans le cas où la vitesse d'écoulement est modérée, on remarque que les forces convectives sont faibles. Elles entraînent les réactifs tangentiellement le long du canal dans le sens d'écoulement, et verticalement vers les couches de catalyseur. Une force convective faible entraîne une diminution du taux de consommation des réactifs sous le canal et leur donne plus de temps pour qu'ils s'infiltrent dans la GDL en se déplaçant par diffusion vers les zones sous nervures. Ceci conduit à une uniformité de la distribution des concentrations des réactifs comme il est montré sur les figures 4.10. et 4.11. En augmentant la vitesse d'écoulement, la force convective dans le sens d'écoulement devient plus importante et empêche ainsi les réactifs de se diffuser vers la zone de la GDL sous les nervures. C'est pour cette raison que l'on remarque que les concentrations des réactifs dans cette région atteignent des valeurs proches de zéro. Dans ce cas, seule la partie du catalyseur sous le canal peut participer à la réaction et donc, une plus grande quantité de réactifs ne sera pas consommés et sort de la cellule.

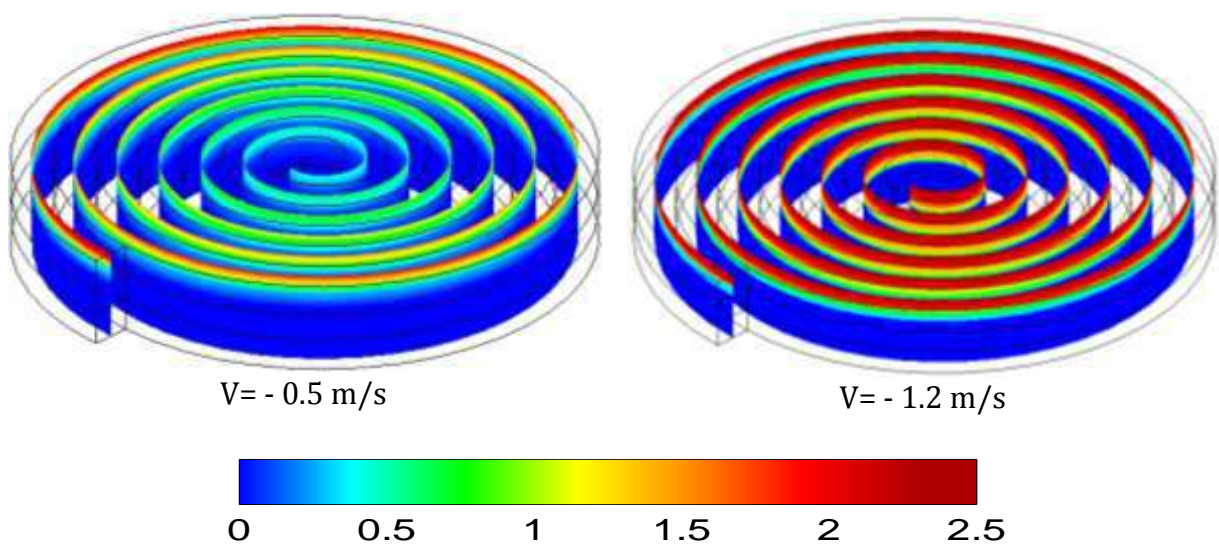


Fig. 4.10.a : Influence de la vitesse d'écoulement sur la répartition d'oxygène dans le MEA (kmole/m^3).

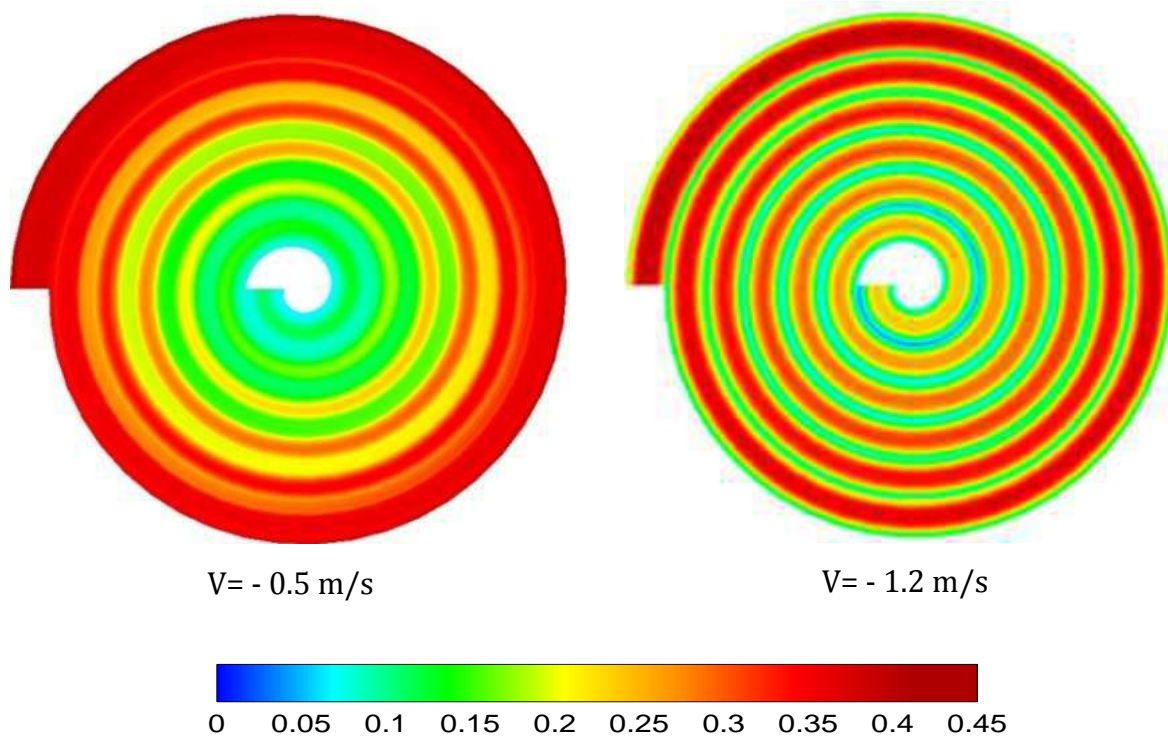


Fig. 4.10.b : Influence de la vitesse d'écoulement sur la répartition d'oxygène à l'interface GDL/CL du côté cathodique(kmole/m³).

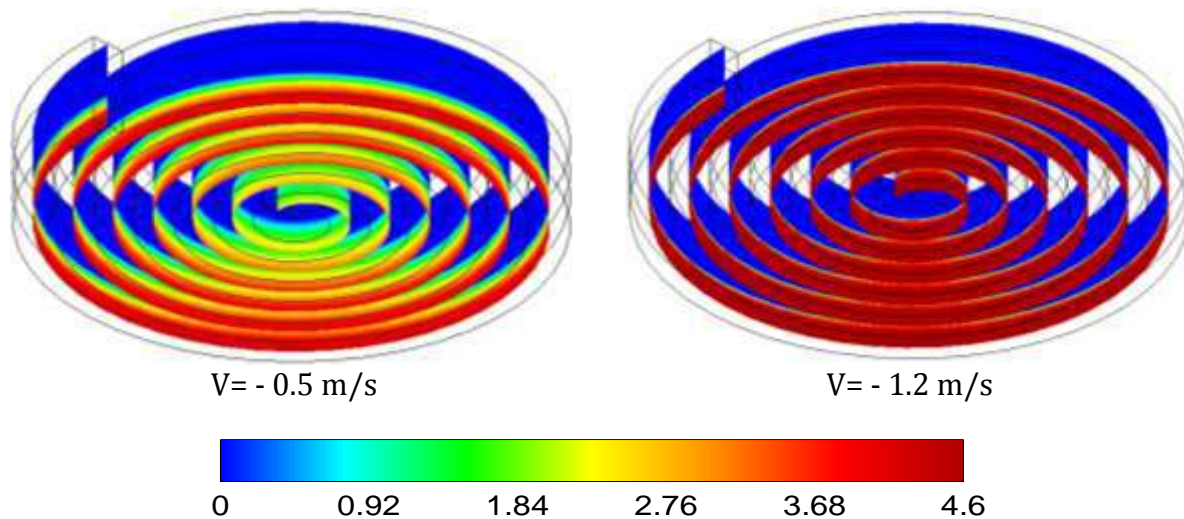


Fig. 4.11.a : Influence de la vitesse d'écoulement sur la répartition d'hydrogène dans le MEA(kmole/m³).

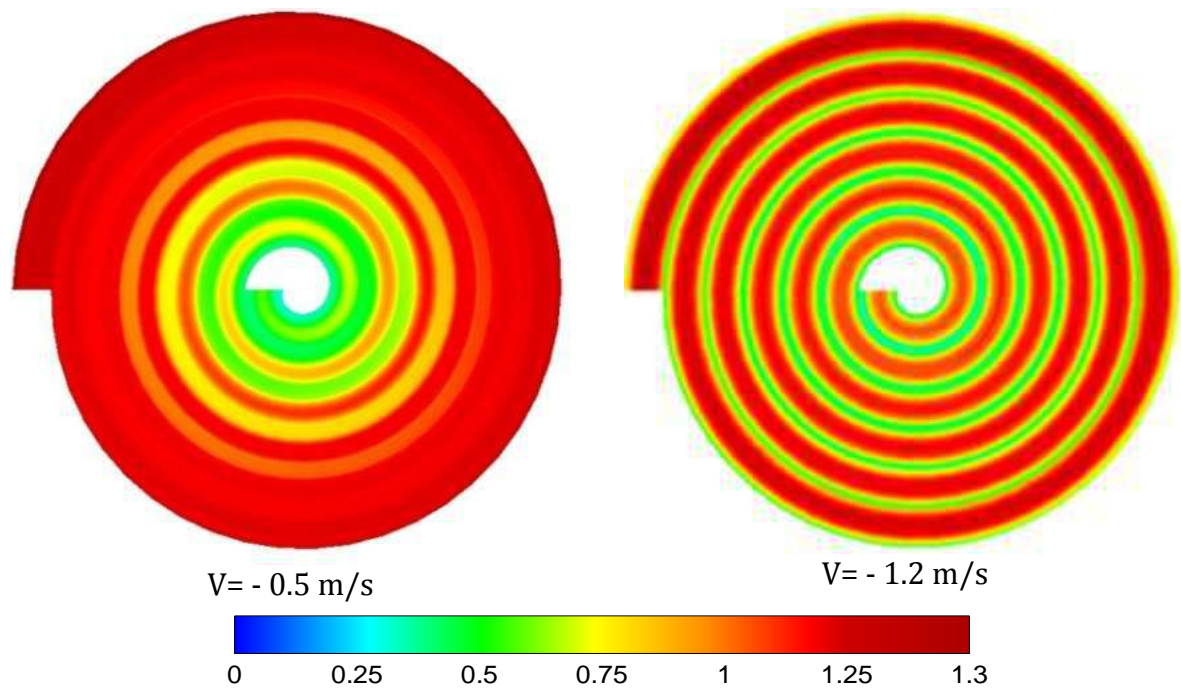


Fig. 4.11.b : Influence de la vitesse d'écoulement sur la répartition d'hydrogène à l'interface GDL/CL du côté anodique (kmole/m³).

Les distributions de température pour les deux valeurs de vitesse $v = -0.5$ m/s et $v = -1.2$ m/s sont présentées sur la figure 4.12. Dans le cas d'une vitesse élevée, la densité de courant sous les nervures devient beaucoup moins importante que celle sous le canal. La température est liée directement aux pertes de tension qui dépendent de la densité du courant produit. On peut alors dire que la distribution de la température devient moins uniforme dans ce cas (figure 4.12).

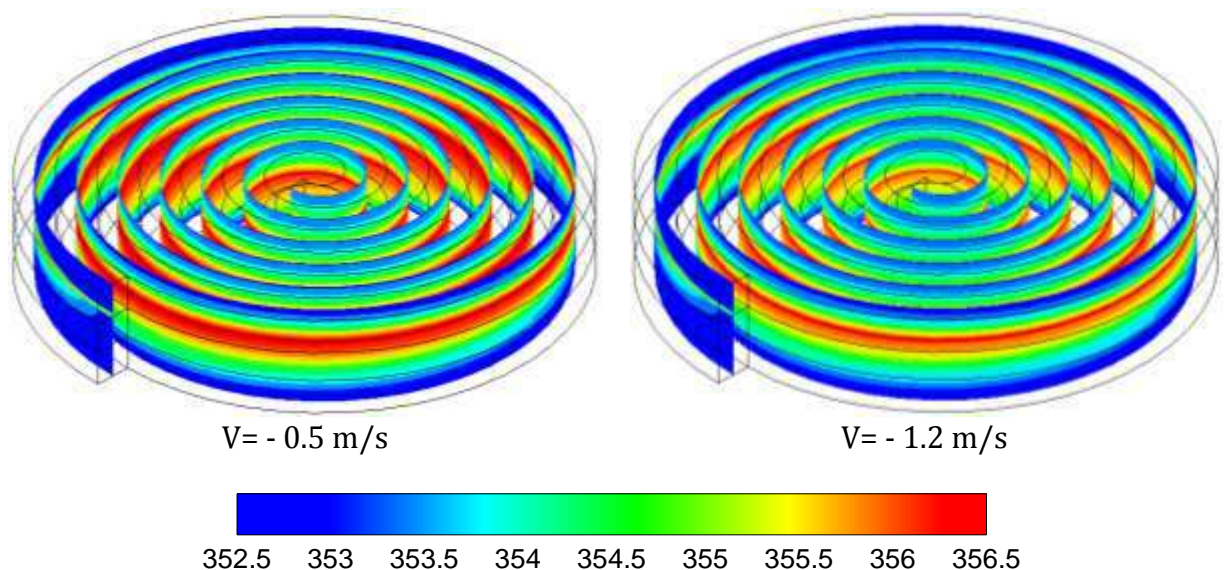


Fig. 4.12.a. Effet de la vitesse d'écoulement sur la répartition de température dans le MEA (K).

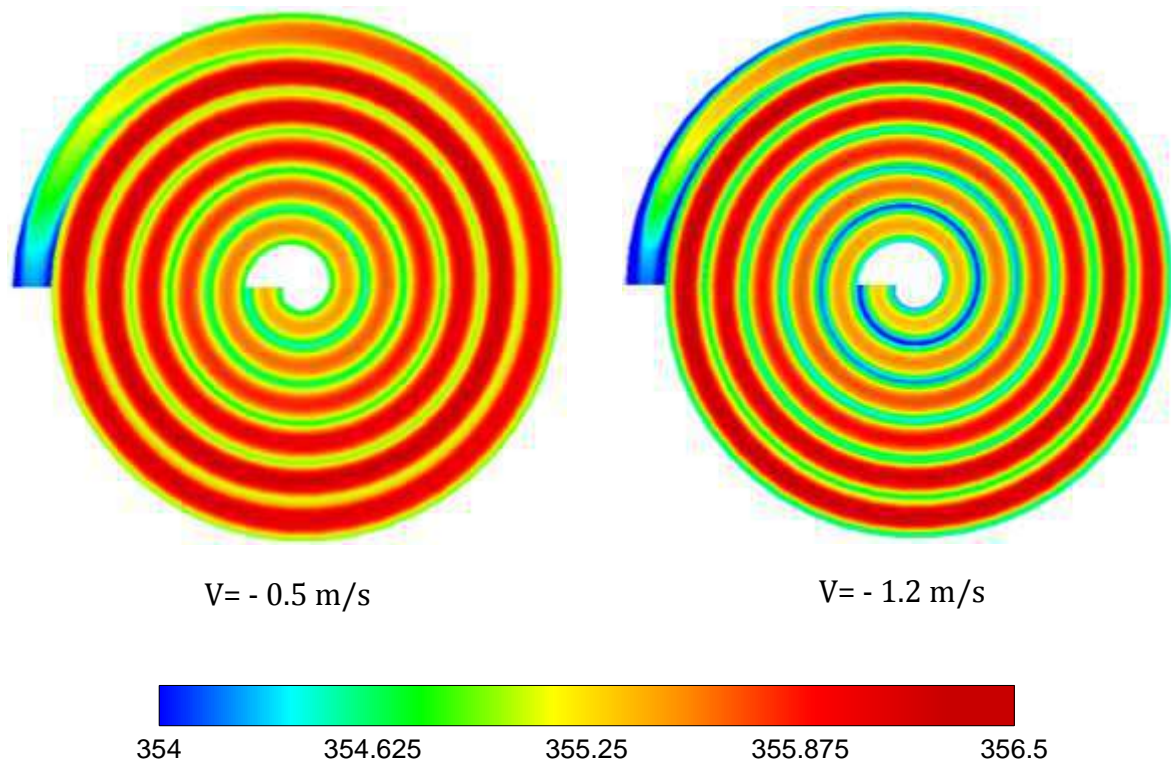


Fig. 4.12.b. Influence de la vitesse d'écoulement sur la répartition de température à l'interface GDL/CL du côté cathodique (K).

L'influence de la vitesse d'écoulement sur la distribution de concentration d'eau est représentée sur la figure 4.13. On constate qu'à une vitesse modérée, la concentration maximale de l'eau se situe près de l'entrée des canaux. Tandis qu'à une plus grande vitesse, elle se situe presque à la sortie des canaux. Ceci signifie que l'augmentation de la vitesse d'écoulement améliore le processus d'évacuation de l'eau en augmentant les forces convectives.

Les courbes de polarisation pour les deux vitesses, $v = -0.5 \text{ m/s}$ et $v = -1.2 \text{ m/s}$, sont présentées dans la Figure 4.14. Généralement, les courbes de polarisation permettent de comparer les performances globales de la cellule dans différentes conditions de fonctionnement.

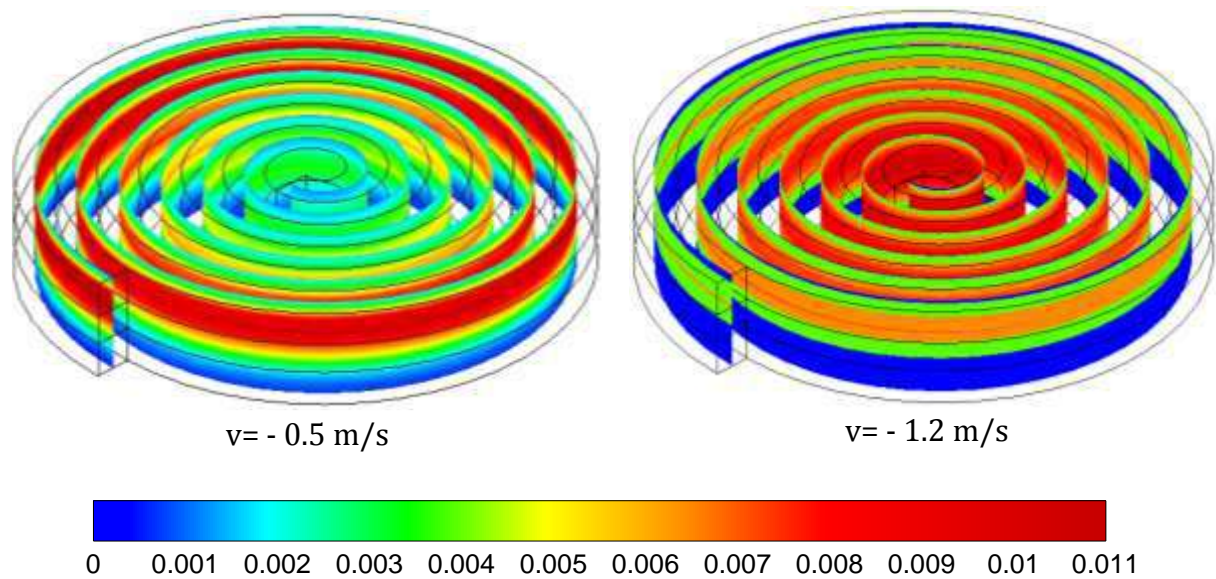


Fig. 4.13. Influence de la vitesse d'écoulement sur la répartition d'eau dans le MEA (kmole/m^3).

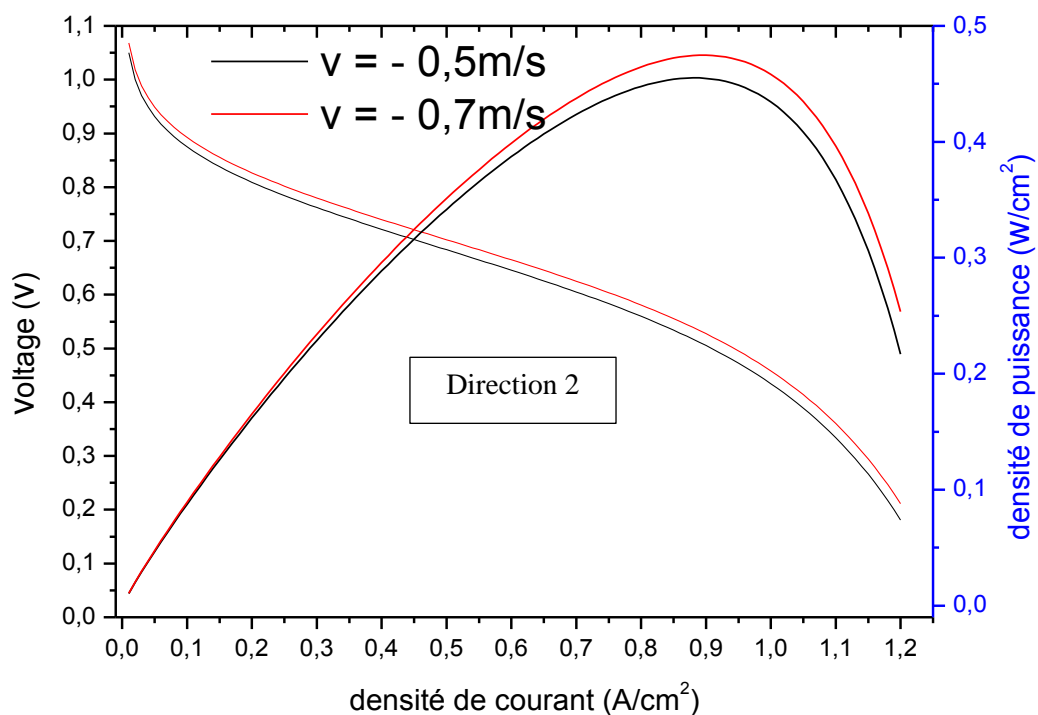


Fig. 4.14. Effet de la vitesse d'écoulement sur les performances de la cellule pour $N=6$.

On remarque que parmi les différentes surtensions, c'est la surtension d'activation qui crée la différence de performances entre les deux cas de faible et de

grande vitesse : elle est plus importante dans le cas des vitesses modérées entraînant une chute de la tension et de la densité de puissance. Ce type de perte se produit à cause de la cinétique des réactions électrochimiques qui se déroulent dans la couche catalytique. Les pertes ohmiques, dues à l'effet joule, ont moins d'influence sur les performances de la cellule ; on remarque que les courbes de tension sont presque parallèles dans les régions des pertes ohmiques et de concentration.

On peut alors dire que dans le cas de variation des vitesses, la principale différence en termes de performance de la cellule est due aux pertes d'activation.

4.7.3. Effet du rapport de largeur

Pour examiner l'effet du rapport de largeur ($b = \text{largeur du canal} / \text{largeur de la nervure}$) sur les performances de la cellule, les champs de température, de concentration d'eau et de concentrations des réactifs ont été étudiés pour les trois valeurs $b=1$, $b=2$, $b=3$.

Selon les résultats représentés sur les figures : 4.15, 4.16, 4.17 et 4.18, il est clair que le rapport de largeur a un effet important sur la distribution des températures et des concentrations des gaz dans le cœur de la cellule affectant ainsi le taux de production des densités de courant et de puissance électriques.

On remarque que lorsqu'on augmente le rapport de largeur, la surface de contact entre le canal d'écoulement et la couche de diffusion des gaz devient plus grande conduisant ainsi à une amélioration du processus d'infiltration des réactifs vers la zone sous les nervures résultant en une répartition plus uniforme des gaz, une augmentation du taux de consommation des réactifs et celle du taux de production de la densité de courant, de chaleur et d'eau.

Par contre, si on diminue le rapport de largeur, le canal devient plus étroit par rapport à la nervure et la surface qui alimente la GDL en réactifs devient plus petite. Par conséquent, la concentration des réactifs dans la région sous-nervure sera très faible. La densité de courant étant directement liée à la concentration locale des réactifs,

il est alors logique, qu'elle prenne la même allure que celles des réactifs. Cela signifie que la configuration avec un canal plus large donne une meilleure répartition de réactifs, de température et de densité de courant que celle avec un canal étroit.

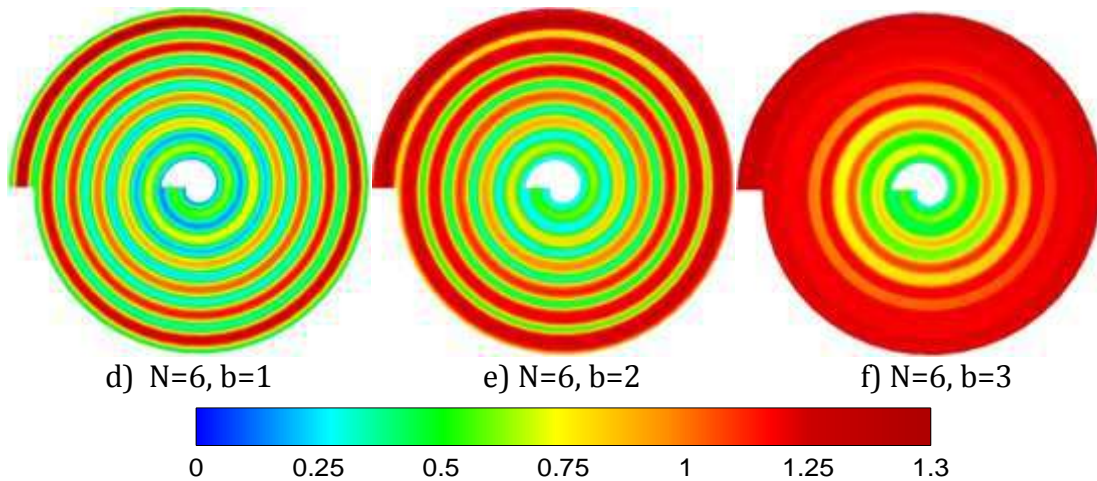


Fig.4.15. Effet du rapport de largeur sur la répartition de la concentration d'hydrogène dans la GDL anodique (kmole/m^3).

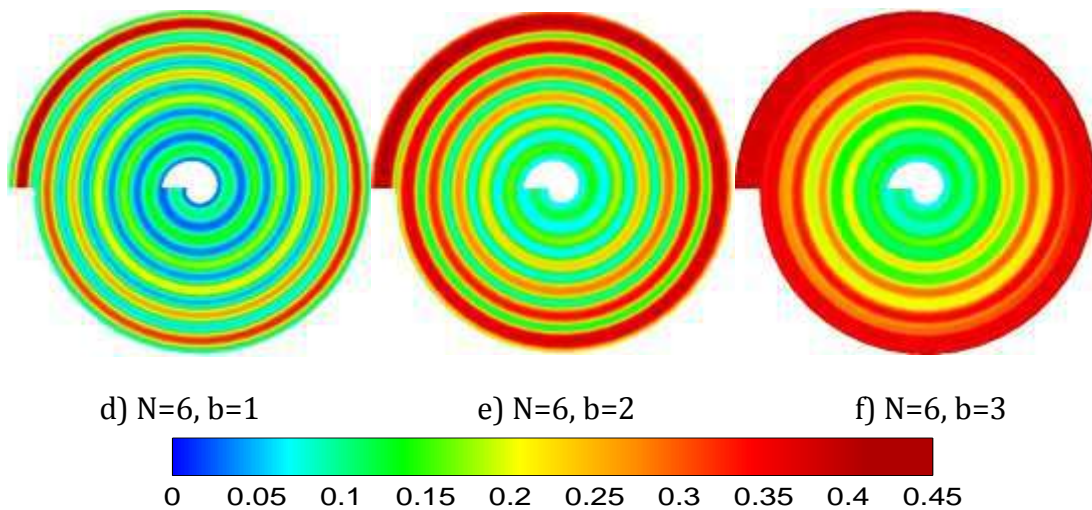


Fig.4.16. Effet du rapport de largeur sur la répartition de la concentration d'oxygène à l'interface GDL/CL cathodique (kmole/m^3).

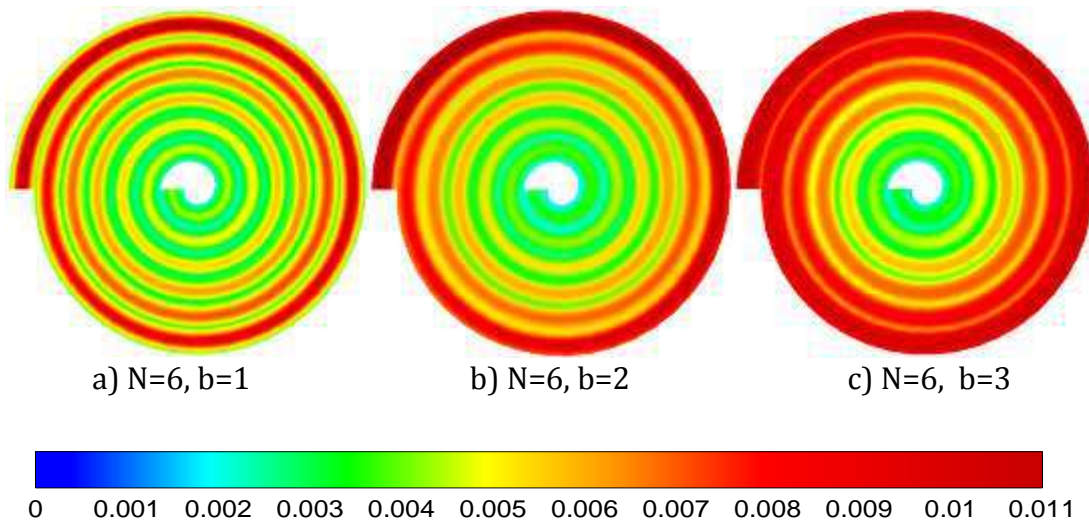


Fig.4.17. Effet du rapport de largeur sur la répartition de la concentration d'eau dans la GDL cathodique (kmole/m^3).

Étant donné que les températures des parois externes, ainsi que celle à l'entrée des gaz sont maintenues à 353 K, les variations de température à l'intérieur de la cellule sont inférieures à 4 K. Le design présentant la distribution la plus uniforme de température est le design à canaux larges, alors que celui qui a la distribution la moins uniforme est le design à canaux étroits.

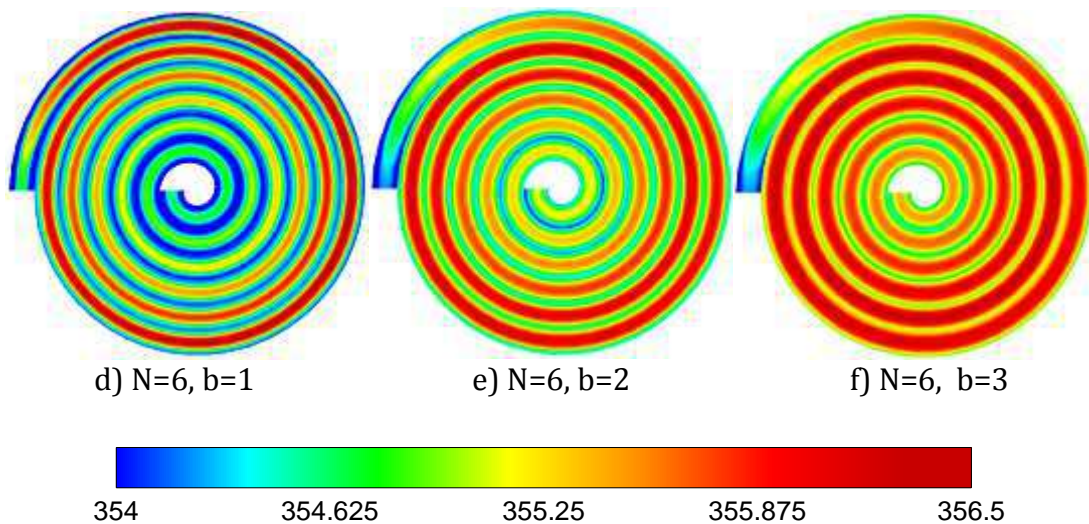


Fig.4.18. Effet du rapport de largeur sur la répartition de température dans le catalyseur cathodique (K).

La comparaison des courbes de polarisation pour trois valeurs différentes du rapport de largeur est présentée dans la figure 4.19.

L'augmentation du rapport de largeur améliore la performance de la pile à combustible : sa meilleure valeur ayant été obtenue pour une valeur du rapport du rapport égale à 3. L'expansion du canal augmente la zone de contact entre le canal et la GDL, ce qui améliore le processus de transfert de masse et augmente la densité de puissance de la cellule. Le rapport de largeur a le même effet sur la performance de la cellule pour les deux directions. Nous pouvons alors conclure que l'utilisation d'une configuration avec un canal plus large et une nervure plus étroite améliore la performance de la cellule.

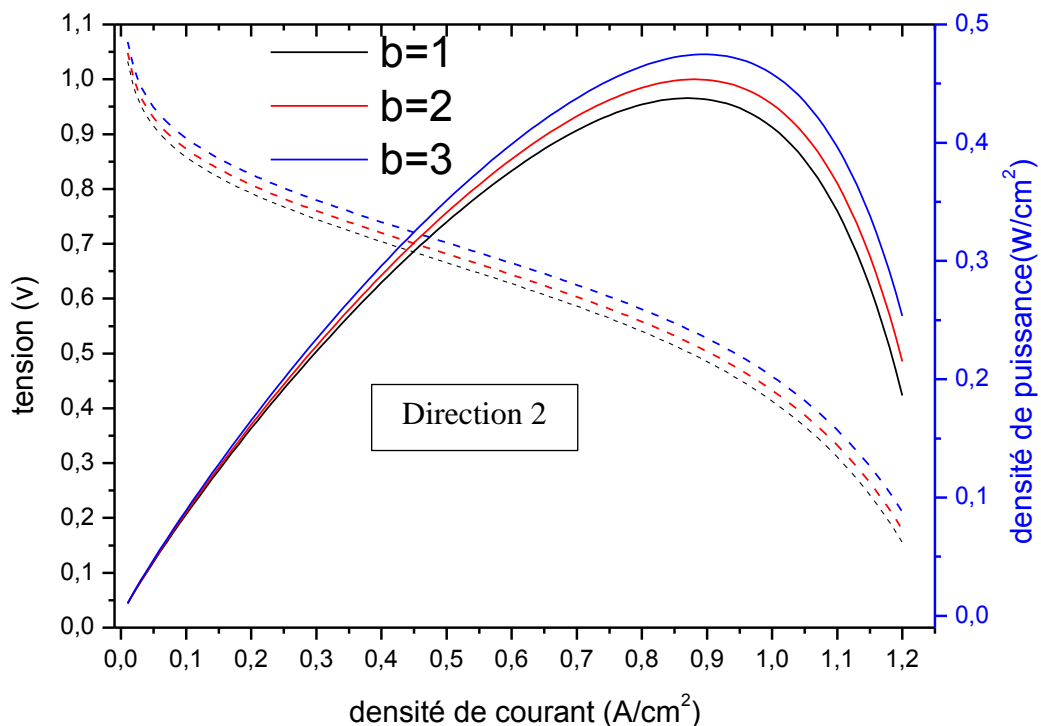


Fig. 4.19. Influence du rapport de largeur sur les performances de la cellule.

4.7.4. Effet du nombre de tours (longueur du canal)

L'effet du nombre de tours du canal en spirale sur la distribution des réactifs est représenté sur les figures : 4.20, 4.21, 4.22 et 4.23. Tout en conservant constants les autres paramètres qui sont, l'aire de la surface active, le rapport de largeur canal-

nervure et le débit d'alimentation de la cellule en réactifs et en faisant varier le nombre de tours du canal, on remarque que ce dernier devient plus long et plus étroit pour conserver la même surface de la zone active, ce qui donne plus de temps aux gaz de se déplacer vers les couches catalytiques, et entraîne une augmentation du taux de consommation des réactifs et celui de la production d'eau, de température et de densité de courant électrique résultant ainsi en une amélioration des performances de la cellule. La consommation maximale des réactifs a été obtenue pour une valeur du nombre de tours égale à 6.

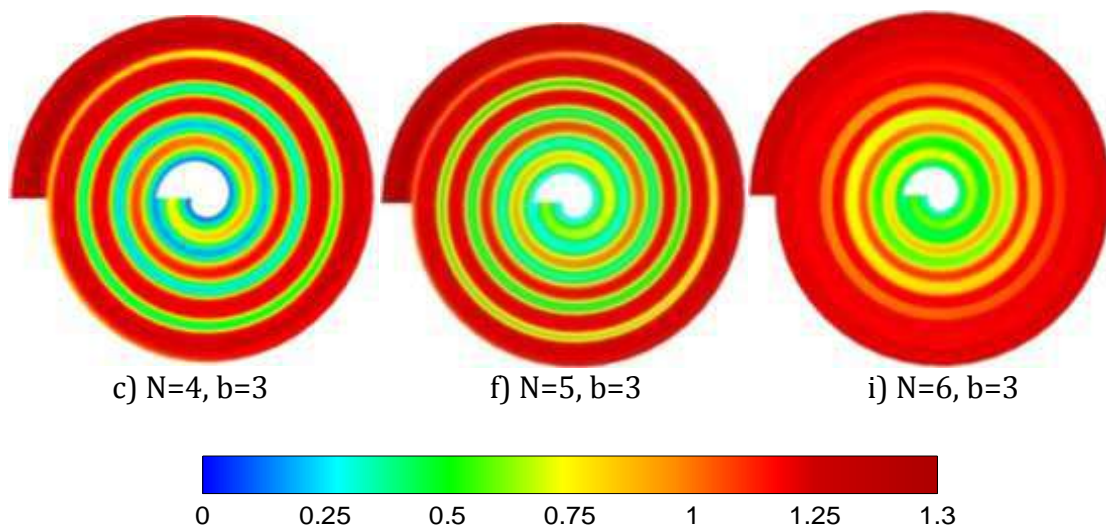


Fig.4.20. Effet du nombre de tours sur la répartition de la concentration d'hydrogène dans la GDL anodique (kmole/m³).

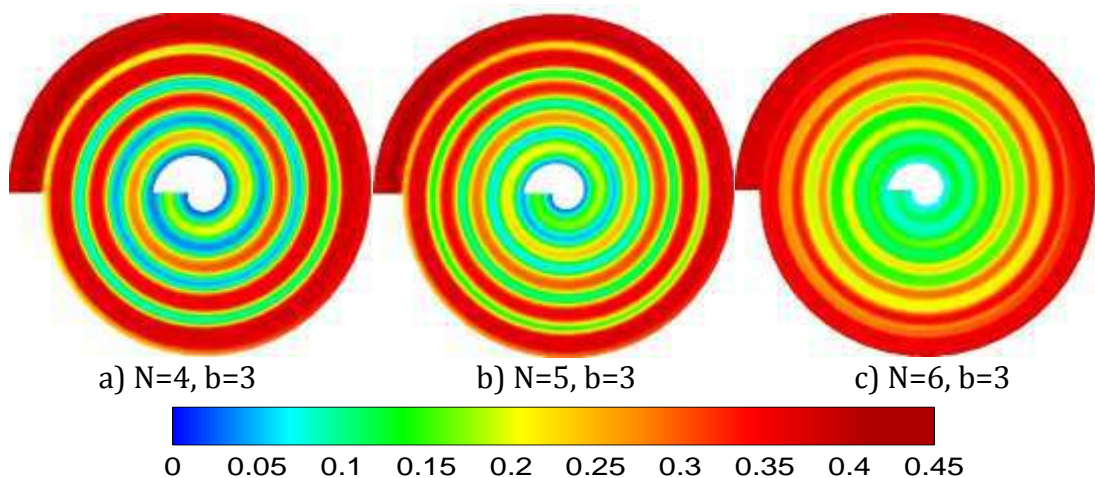


Fig.4.21. Effet du nombre de tours sur la répartition de la concentration d'oxygène dans la GDL cathodique (kmole/m³).

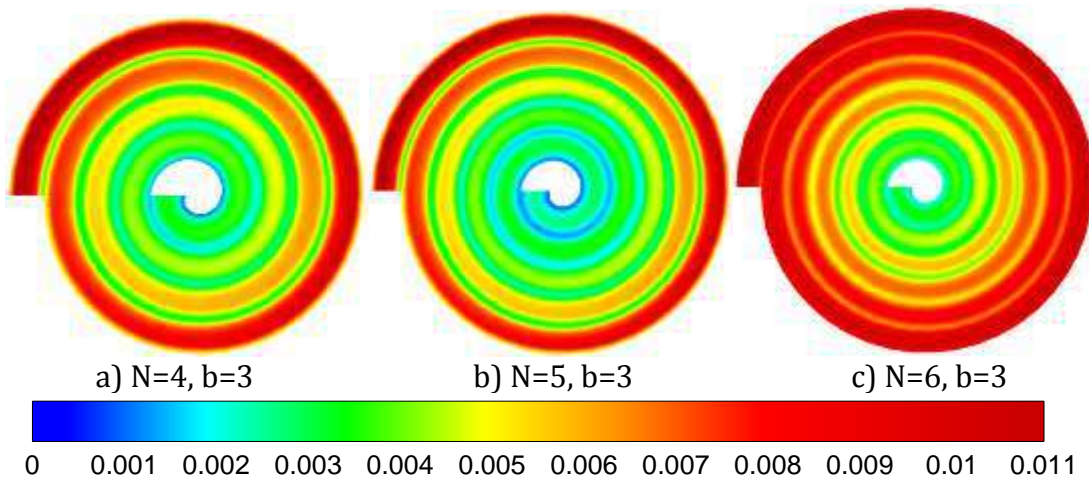


Fig.4.22. Effet du nombre de tours sur la répartition de la concentration d'eau dans la GDL cathodique (kmole/m^3).

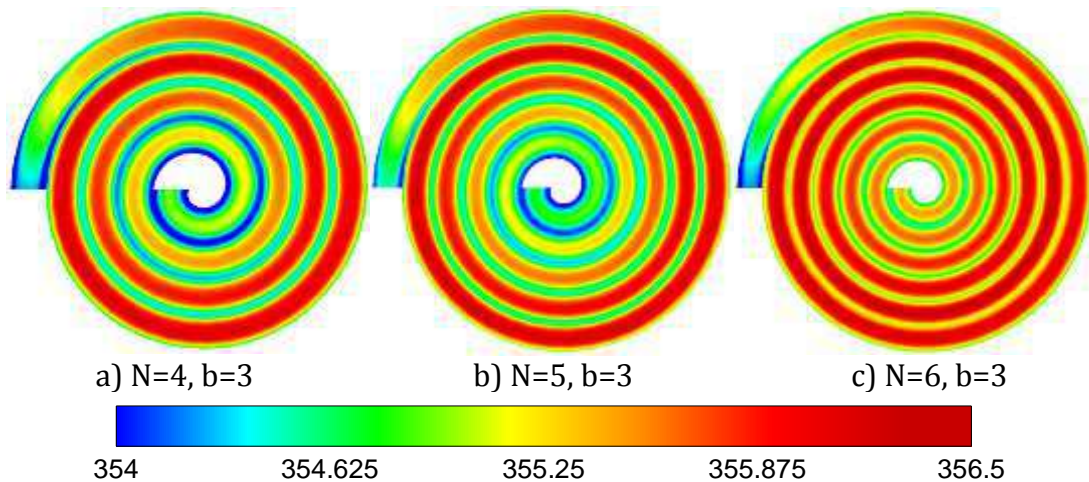


Fig.4.23. Effet du nombre de tours sur la répartition de température dans le catalyseur cathodique (K).

La figure 4.24 montre les courbes de polarisation obtenues pour trois différentes longueurs du canal (nombre de tours du canal en spirale). On constate que l'augmentation de la longueur du canal, engendrée par celle du nombre de tours, améliore les performances de la cellule en raison de l'augmentation du taux de consommation des réactifs le long du chemin en spirale. Autrement dit, la configuration qui possède les canaux les plus longs et les plus larges par rapport aux nervures, présente les distributions les plus homogènes des réactifs sur toute la surface active de la cellule. Ceci est dû à l'augmentation de la surface de contact entre les canaux

d'écoulement et les couche de diffusion des gaz. Ceci améliore les processus de transport de réactifs vers les couches catalytiques et augmente le taux de production de la densité de puissance. Cette configuration améliore la distribution des gaz réactifs et le processus d'évacuation d'eau des milieux poreux et des canaux.

Du fait que les géométries des modèles de piles à combustible utilisées dans cette étude comparative soient de la même taille, une augmentation de la densité de puissance peut être obtenue sans faire augmenter le coût et les dépenses supplémentaires.

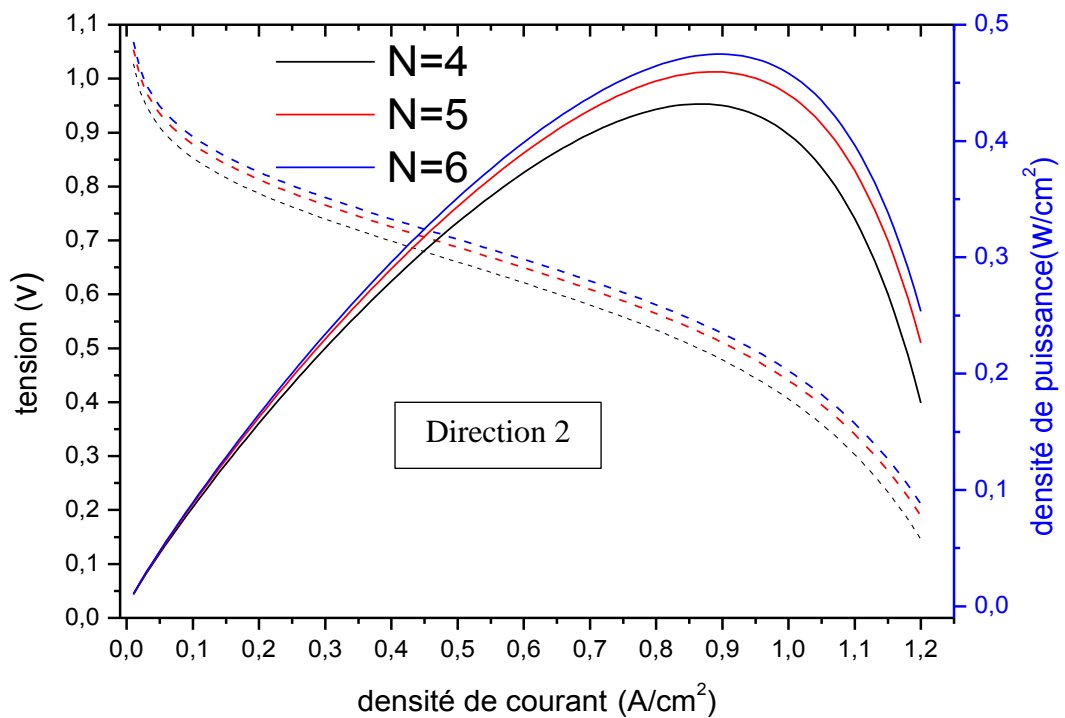


Fig.4.24. Influence du nombre de tours sur la performance de la cellule ($b=3$).
(Tension----- ; densité de puissance —)

Conclusion générale

L'objectif de notre travail était d'étudier l'influence des paramètres géométriques des canaux d'écoulement, tels que la largeur, la longueur et la direction d'écoulement, sur les phénomènes de transfert de masse et de chaleur dans une pile à combustible à membrane échangeuse de protons (PEMFC). Les équations gouvernantes du problème en coordonnées cylindriques ont été résolues par la méthode des volumes finis, avec un schéma en puissance pour l'espace et un schéma implicite pour le temps. Le problème du couplage pression-vitesse a été résolu par la méthode des projections.

Plusieurs difficultés ont été rencontrées durant la résolution du problème en raison de la présence de dimensions spatiales extrêmement petites, de la complexité de la géométrie et des coefficients variables qui ont exigé beaucoup d'arrangements et d'approximations numériques. Un autre problème rencontré, est le temps d'exécution du programme excessivement long en utilisant un ordinateur ayant un processeur Intel-Core i5 M480@ 2.6 GHz et trois gigaoctet (3 Go) de mémoire vive (RAM).

D'après les résultats obtenus, il est clair que la géométrie des plaques bipolaire et la direction d'écoulement des gaz dans les canaux ont une grande influence sur les phénomènes de transfert de masse et de chaleur, et sur les performances de la cellule.

On peut résumer les effets constatés dans les points suivants :

- en diminuant la vitesse d'écoulement des gaz dans les canaux, la consommation des réactifs devient plus uniforme, ce qui conduit à une uniformité de distribution de température et de densité de courant.
- Dans le cas où la cellule est alimentée du côté extérieur du canal (direction 2), la forme en spirale génère une force centrifuge opposée à la direction de l'écoulement, ce qui donne plus de temps pour la réaction électrochimique et augmente le taux de consommation des réactifs.

- l'alimentation de la pile à combustible du côté extérieur du canal en spirale améliore la production de densité de courant qui améliore la performance de la cellule et rend la direction 2 plus rentable par rapport à la direction 1.
- une configuration à canaux plus large et des nervures plus minces implique une distribution plus uniforme des températures et des réactifs.
- En augmentant le nombre de tours du canal en spirale, le canal devient plus long et plus étroit (pour conserver la même surface de la zone active), ce qui conduit à une augmentation du taux de consommation des réactifs et celui de production d'eau, de température et de densité de courant électrique, en résultant une amélioration des performances de la cellule.

Perspectives

Dans ce travail on a réalisé une étude paramétrique d'une pile à combustible PEMFC Planaire. L'étape suivante, qu'on va la réaliser dans le prochain travail, consiste refaire le même travail mais avec une géométrie tubulaire.

Références bibliographiques

- [1] Frano barber/ PEM Fuel Cells: Theory and Practice/Elsevier 2005/ ISBN: 978-012-387710-9
- [2] Recent Trends in Fuel Cell Science and Technology/ ISBN 0-387-35537-5
- [3] Xiao-Zi Yuan (2008). PEM Fuel Cell Fundamentals. PEM Fuel Cell Electrocatalysts and Catalyst Layers: Fundamentals and Applications. Springer ISBN: 978-1-84800-935-6.
- [4] Milewski, J. (2011) / Advanced Methods of Solid Oxide Fuel Cell Modeling./ Springer ISBN 978-0-85729-261-2
- [5] Sebnem Pehlivan-Davis/ Polymer Electrolyte Membrane (Pem) Fuel Cell Seals Durability/ A Doctoral Thesis / Loughborough university October 2015
- [6] Ahmad Haddad/ Modèle dynamique non linéaire de la pile à combustible du type PEM : application à la régulation de l'humidité dans la membrane électrolytique/ thèse de doctorat. Université de Technologie de Belfort-Montbéliard juin 2009
- [7] Matthew M. Mench/Fuel Cell Engines/ John Wiley & Sons, Inc. 2008
- [8] Mehmah Bouziane / simulation numérique unidimensionnelle du phénomène de transfert de chaleur et de transport de masse et de charge dans une pile à combustible à membrane échangeuse de protons/mémoire de magistère / université d'Elhadj lakhdar. Batna / 2008.
- [9] John Bachman, Maxime Charvet, Anthony Santamaria, Hong-Yue Tang, Jae Wan Park, Ronald Walker. Experimental investigation of the effect of channel length on performance and water accumulation in a PEMFC parallel flow field. Int J Hydrogen Energ 2012;37:17172- 79.
- [10] Hang Guo, Mao Hai Wang, Fang Ye, Chong Fang Ma. Experimental study of temperature distribution on anodic surface of MEA inside a PEMFC with parallel channels flow bed. Int J Hydrogen Energ 2012;37:13155-60.
- [11] Natthawoot Bunmark, Sunun Limtrakul, Michael W. Fowler, Terdthai

- Vatanatham, Jeff Gostick. Assisted water management in a PEMFC with a modified flow field and its effect on performance. *Int J Hydrogen Energ* 2010;35:6887-96.
- [12] S. Shimpalee, J.W. Van Zee. Numerical studies on rib-channel dimension of flow-field on PEMFC performance. *Int J Hydrogen Energ* 2007;32:842-56.
- [13] Seungjae Lee, Taeyoung Kim, Heekyung Park. Comparison of multi-inlet and serpentine channel design on water production of PEMFCs. *Chem Eng Sci* 2011;66:1748-58.
- [14] Anh Dinh Le, Biao Zhou. Fundamental understanding of liquid water effects on the performance of a PEMFC with serpentine-parallel channels. *Electrochim Acta* 2009;54:2137-54.
- [15] Tatyana V. Reshetenko, Guido Bender, Keith Bethune, Richard Rocheleau. A segmented cell approach for studying the effects of serpentine flow field parameters on PEMFC current distribution. *Electrochim Acta* 2013;88: 571-79.
- [16] Satish G. Kandlikar, Evan J. See, Mustafa Koz, Preethi Gopalan, Rupak Banerjee. Two-phase flow in GDL and reactant channels of a proton exchange membrane fuel cell. *Int J Hydrogen Energ* 2014;39:6620-36.
- [17] A.P. Manso, F.F. Marzo, J. Barranco, X. Garikano, M. Garmendia Mujika. Influence of geometric parameters of the flow fields on the performance of a PEM fuel cell. *Int J Hydrogen Energ* 2012;37:15256-87.
- [18] K. Palaniswamy , Muthukumar Marappan , Vasanth Rajendran Jothi. Influence of porous carbon inserts on scaling up studies for performance enhancement on PEMFC. *Int J Hydrogen Energ* 2016;41;2867-74.
- [19] Hong Liu, Peiwen Li, Kai Wang. Optimization of PEM fuel cell flow channel dimensions dMathematic modeling analysis and experimental verification. *Int J Hydrogen Energ* 2013;38;9835-46.
- [20] In-Su Han, Jongkoo Lim, Jeehoon Jeong, Hyun Khil Shin. Effect of serpentine flow-

- field designs on performance of PEMFC stacks for micro-CHP systems. *Renew Energ* 2013;54:180-88.
- [21] Yuh Ming Ferng, Ay Su. A three-dimensional full-cell CFD model used to investigate the effects of different flow channel designs on PEMFC performance. *Int J Hydrogen Energ* 2007;32:4466-76.
- [22] K. Suga, W. Nishimura, T. Yamamoto, M. Kaneda. Measurements of serpentine channel flow characteristics for a proton exchange membrane fuel cell. *Int J Hydrogen Energ* 2014;39:5942-54.
- [23] Anthony D. Santamaria, John Bachman, Jae Wan Park. Cold-start of parallel and interdigitated flow-field polymer electrolyte membrane fuel cell. *Electrochim Acta* 2013;107: 327-38.
- [24] Anthony D. Santamaria, John Bachman, Jae Wan Park. Design strategy for a polymer electrolyte membrane fuel cell flow-field capable of switching between parallel and interdigitated configurations. *Int J Hydrogen Energ* 2013;38:5807-12.
- [25] Shijie Tong, John C. Bachman, Anthony Santamaria, Jae Wan Park. Experimental investigation on a polymer electrolyte membrane fuelcell (PEMFC) parallel flow field design with external two-valve regulation. *J Power Sources* 2013;242:195-01.
- [26] Hadi Heidary, Mohammad J. Kermani, Suresh G. Advani, Ajay K. Prasad. Experimental investigation of in-line and staggered blockages in parallel flowfield channels of PEM fuel cells. *Int J Hydrogen Energ* 2016;41;6885-93.
- [27] Xiao-Dong Wang, Jin-Liang Xu, Wei-Mon Yan, Duu-Jong Lee, Ay Su. Transient response of PEM fuel cells with parallel and interdigitated flow field designs. *Int J Heat Mass Tran* 2011;54:2375-86.
- [28] Guangsheng Zhang, Liejin Guo, Bin Ma, Hongtan Liu. Comparison of current distributions in proton exchange membrane fuel cells with interdigitated and

- serpentine flow fields. *J Power Sources* 2009;188:213-19.
- [29] Jiin-Yuh Jang, Chin-Hsiang Cheng, Wang-Ting Liao, Yu-Xian Huang, Ying-Chi Tsai. Experimental and numerical study of proton exchange membrane fuel cell with spiral flow channels. *Appl Energ* 2012;99:67-79.
- [30] Daniel Juarez-Robles, Abel Hernandez-Guerrero, Bladimir Ramos-Alvarado, Francisco Elizalde-Blancas, Cesar E. Damian-Ascencio. Multiple concentric spirals for the flow field of a proton exchange membrane fuel cell. *J Power Sources* 2011;196:8019-30.
- [31] V.H. Rangel-Hernandez, C. Damian-Ascencio, D. Juarez-Robles, A. Gallegos-Muñoz, A. Zaleta-Aguilar, H. Plascencia-Mora. Entropy generation analysis of a proton exchange membrane fuel cell (PEMFC) with a fermat spiral as a flow distributor. *Energy* 2011;36:4864-70.
- [32] M. Zeroual, H. Ben Moussa, M. Tamerabet. Effect of gas flow velocity in the channels on consumption reactants in a fuel cell type (PEMFC). *Energy Procedia* 2012;18:317-26.
- [33] Shiang-Wuu Perng, Horng-Wen Wu. Effects of internal flow modification on the cell performance enhancement of a PEM fuel cell. *J Power Sources* 2008;175:806-16.
- [34] Shiang-Wuu Perng, Horng-Wen Wu, Tswen-Chyuan Jue, Kuo-Chih Cheng. Numerical predictions of a PEM fuel cell performance enhancement by a rectangular cylinder installed transversely in the flow channel. *Appl Energ* 2009;86:1541-54.
- [35] Muhittin Bilgili , Magdalena Bosomoiu , Georgios Tsotridis/ Gas flow field with obstacles for PEM fuel cells at different operating conditions/ *Int J Hydrogen Energ* 40 (2015) 2303-2311
- [36] Shiang-Wuu Perng, Horng-Wen Wu/ A three-dimensional numerical investigation of trapezoid baffles effect on non-isothermal reactant transport

- and cell net power in a PEMFC/ *Applied Energy* 143 (2015) 81–95
- [37] Mohammad Hadi Akbari, Behzad Rismanchi/ Numerical investigation of flow field configuration and contact resistance for PEM fuel cell performance/ *Renewable Energy* 33 (2008) 1775–1783
- [38] Chang-Whan Lee, Mihui Lee, Min- Jae Lee, Seon g-Cheol Chang, Sung-Pil Yoon, Hyung Chul Ham, Jonghee Han. Effect of the flow directions on a 100 cm² MCFC single cell with internal flow channels. *Int J Hydrogen Energ* 2016;41;18747-60
- [39] Shan-Hai Ge, Bao-Lian Yi/A mathematical model for PEMFC in different flow modes/*Journal of Power Sources* 124 (2003) 1–11
- [40] J. Scholta, F. Haussler, W. Zhang, L. Kuppers, L. Jorissen, W. Lehnert/Development of a stack having an optimized flow field structure with low cross transport effects/ *Journal of Power Sources* 155 (2006) 60–65
- [41] Dewan Hasan Ahmed, Hyung Jin Sung /Effects of channel geometrical configuration and shoulder width on PEMFC performance at high current density/*Journal of Power Sources* 162 (2006) 327–339.
- [42] Lan Sun, Patrick H. Oosthuizen, Kim B. McAuley/A numerical study of channel-to-channel flow cross-over through the gas diffusion layer in a PEM-fuel-cell flow system using a serpentine channel with a trapezoidal cross-sectional shape / *International Journal of Thermal Sciences* 45 (2006) 1021–1026
- [43] J.P. Owejan, T.A. Trabold, D.L. Jacobson, M. Arif, S.G. Kandlikar/ Effects of flowfield and diffusion layer properties on water accumulation in a PEM fuel cell / *International Journal of Hydrogen Energy* 32 (2007) 4489 – 4502
- [44] I. Khazaei/ Experimental investigation and numerical comparison of the performance of a proton exchange membrane fuel cell at different channel geometry/ *Heat Mass Transfer* (2015) 51:1177–1187
- [45] I. Khazaei/Improvement the equation of polarization curve of a proton exchange membrane fuel cell at different channel geometry/*Heat Mass Transfer* (2015)

51:1681–1689

- [46] I. Khazaee · H. Sabadban/ Numerical study of changing the geometry of the flow field of a PEM fuel cell/ Heat Mass Transfer, DOI 10.1007/s00231-015-1621-4
- [47] Bouziane Mahmah, Abdelhamid Mraoui, Maiouf Belhamel, Hocine Ben Moussa, Abdel-Nasser Cherigui. La gestion thermique dans les piles _a combustible PEMFC. Jean-Jacques BEZIAN. JITH 2007, Aug 2007, Albi, France. ENSTIMAC, 5p., 2007, ISBN 978-2-9511591-6-7. <hal00167350>
- [48] Maher A.R. Sadiq Al-Baghdadi. Performance comparison between airflow-channel and ambient air-breathing PEM fuel cells using three-dimensional computational fluid dynamics models. Renew Energ 2009;34:1812-24.
- [49] Djamel Haddad, Kafia Oulmi, Hocine Benmoussa, Zeroual Aouachria, Noureddine Bourmada. Transport phenomena effect on the performance of proton exchange membrane fuel cell (PEMFC). Int J Hydrogen Energ 2013;38:8550-56.
- [50] Maher A.R. Sadiq Al-Baghdadi. Modelling of proton exchange membrane fuel cell performance based on semi-empirical equations. Renew Energ 2005;30:1587-99.
- [51] Dong-Yun Zhang/ chapter 2Polarization Curve: PEM Fuel Cell Diagnostic Tools/ Taylor & Francis Group ISBN 13: 978-1-4398-3920-1
- [52] Idoia San Martín , Alfredo Ursúa and Pablo Sanchis/ Modelling of PEM Fuel Cell Performance: Steady-State and Dynamic Experimental Validation/ Energies 2014, 7, 670-700; doi:10.3390/en7020670
- [53] Ronald F. Mann, John C. Amphlett, Michael A.I. Hooper, Heidi M. Jensen, Brant A. Peppley, Pierre R. Roberge/ Development and application of a generalised steady-state electrochemical model for a PEM fuel cell/ Journal of Power Sources 86 2000 173–180
- [54] Christos N. Maxoulis, Dimitrios N. Tsinoglou, Grigorios C. Koltsakis/ Modeling of

- automotive fuel cell operation in driving cycles/ *Energy Conversion and Management* 45 (2004) 559–573
- [55] Michel w.fowler, Ronald F. Mann, John C.Amphlett, Brant A. Peppley R.Roberge./ Incomporation of voltage degradation into a generalized steady state electrochemical model for PEM Fuel cell/ *Journal of Power Sources* 106(2002)274-283
- [56] Maher A.R. Sadiq Al-Baghdadi/ Chapter 7: PEM Fuel Cell Modeling/ In: *Fuel Cell Research Trends 2007/* ISBN: 1-60021-669-2
- [57] Vladimir Gurau, Frano Barbir, and Hongtan Liu. An analytical solution of a half-cell model for PEM fuel cells. *J Electrochem Soc* 2000;147:2468-77.
- [58] Sukkee Um, C.Y. Wang. Three-dimensional analysis of transport and electrochemical reactions in polymer electrolyte fuel cells. *J Power Sources* 2004;125:40-51.
- [59] Zeljko Penga, Ivan Tolj, Frano Barbir. Computational fluid dynamics study of PEM fuel cell performance for isothermal and non-uniform temperature boundary conditions. *Int J Hydrogen Energ* 2016;41;17585-94.
- [60] Fuqiang Liu, Guoqiang Lu, Chao-Yang Wang/ Water transport coefficient distribution through the membrane in a polymer electrolyte fuel cell/ *Journal of Membrane Science* 287 (2007) 126–13
- [61] T. E. Springer, T. A. Zawodzinski, and S. Gottesfeld/ *Polymer Electrolyte Fuel Cell Model/ J. Electrochem. Soc.*, Vol. 138, No. 8, August 1991.
- [62] A.J. Chorin. Numerical solution of the Navier-Stokes equations. *Math Comput* 1968;22:745-62.
- [63] Suhas V. Patankar. *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow.* by CRC Press . ISBN 9780891165224
- [64] Versteeg HK, Malalasekera W. *An introduction to computational fluid dynamics the finite volume method.* Longman Scientific & Technical, ISBN 0-470-23515-2;

1995.

- [65] Francis H. Harlow. J. Eddie Welch. Numerical Calculation of Time-Dependent Viscous Incompressible Flow of Fluid With Free Surface. American Institute of Physics (1965) . doi: 10.1063/1.1761178

- [66] Christophe Romé. une méthode de raccordement de maillages non-conformes pour la résolution des équations de Navier-Stokes. Thèse de doctorat. Université de Bordeaux I . N° d'ordre : 3175. juin 2006

- [67] J. DOUGLAS, Jr. & H. H. RACHFORD, Jr., "On the numerical solution of heat conduction problems in two and three space variables," Trans. Amer. Math. Soc, v. 82, 1956, pp. 421-439.

- [68] W. H. Hundsdorfer and J. G. Verwer . Stability and Convergence of the Peaceman-Rachford ADI Method for Initial-Boundary Value Problems. MATHEMATICS OF COMPUTATION VOLUME 53, NUMBER 187 JULY 1989, PAGES 81-101

- [69] Ting-Yuan Wang and Charlie Chung-Ping Chen. 3-D Thermal-ADI: A Linear-Time Chip Level Transient Thermal Simulator. IEEE transactions on computer-aided design of integrated circuits and systems, vol. 21, no. 12, december 2002.

Available online at www.sciencedirect.com

ScienceDirect

journal homepage: www.elsevier.com/locate/he

Short Communication

Unsteady three-dimensional numerical study of mass transfer in PEM fuel cell with spiral flow field



Tamerabet Monsaf^{a,*}, Ben Moussa Hocine^a, Sahli Youcef^{a,b},
Mohammedi Abdallah^a

^a Department of Mechanics, Faculty of Technology, University of Batna 2, Algeria

^b Unité de Recherche en Energies Renouvelables en Milieu Saharien, URERMS, EPST, Centre de Développement des Energies Renouvelables, CDER, 01000, Adrar, Algeria

ARTICLE INFO

Article history:

Received 10 July 2016

Received in revised form

25 November 2016

Accepted 17 December 2016

Available online 10 January 2017

Keywords:

Spiral flow field

PEMFC

Reactants consumption

Channel-rib width ratio

Flow direction

Finite volume method

ABSTRACT

Bipolar plate design and its flow field shape have an important effect on the fuel cell performance. In this work, a FORTRAN program has been developed to investigate the effects of the channel width, the number of turns of the spiral channel and the flow direction on the reactants consumption in a proton exchange membrane fuel cell (PEMFC) with a spiral flow field design. The governing equations are discretized using the finite volume method in cylindrical coordinates. The results show that the channel-rib width ratio influences the cell performance; the higher ratio, the more important contact area between the channel and the GDL, the more reactants quantity seeped to the GDL and more uniform reactants distribution is. The increasing the spiral channel turns number improves the reactants distribution uniformity. The channel spiral shape engenders a centrifugal force which enhances the cell performances in the case when the reactants are injected from the external side of the spiral channel and ejected from its internal one.

© 2017 Hydrogen Energy Publications LLC. Published by Elsevier Ltd. All rights reserved.

Introduction

The flow channel configuration is one of the important factors that influence the performance of a PEMFC. The optimization of the channel geometrical parameters such as, the length, the width and the depth of the channel as well as the shape of its cross section, can improve the performance of the fuel cell [1–11]. The same result can be obtained by increasing the contact area between the flow field channel and the gas diffusion layer [12]. Several research works were realized to study the influence of the geometrical parameters on the PEMFC performance. It is confirmed that the presence of a

chicane in the flow channel, can push reactants to seep into the diffusion and catalyst layers, which enhances the electrochemical reaction rate in this region and results in an increase in the local current density. Downstream the chicane, the reactants consumption is relatively low because of the flow deflection phenomenon that brings the reactants outside the GDL [9,13–16]. Reducing the channels outlet section can partially block the gasses flow and force them to break into the porous layer [17]. At steady state, the use of a narrow channel with wider ribs can improve cell performance [4,11] while for the transient case, a wider channel and narrower ribs improve performance [4,13]. The use of a serpentine channel design

* Corresponding author.

E-mail addresses: monsafamrabet@gmail.com (T. Monsaf), H2SOFC@gmail.com (B.M. Hocine), sahli.soft@gmail.com (S. Youcef).

<http://dx.doi.org/10.1016/j.ijhydene.2016.12.084>

0360-3199/© 2017 Hydrogen Energy Publications LLC. Published by Elsevier Ltd. All rights reserved.

Nomenclature

Roman letters

b	channel/rib width ratio
C	concentration, kmol/m ³
D	diffusivity, m ² /s
E	potential, V
i	surface current density, A/m ²
j	volumetric current density, A/m ³
k	permeability, 1/m
N	turns' number of the spiral channel
p	pressure, Pa
r	radius, m
S	source term
T	temperature, K
t	time, s
u	velocity, m/s

Greek letters

σ	Electric conductivity, 1/ Ω m
ε	porosity
μ	dynamic viscosity, kg/ms
θ	angle, rad
η	overpotential, V

Subscripts

a	Anode
act	activation
c	Cathode
diff	diffusion
ohm	Ohmic
r	radial direction
z	vertical direction
θ	angular direction

Abbreviations

PEMFC	proton exchange membrane fuel cell
GDL	gas diffusion layer
H ₂	Hydrogen
H ₂ O	Water
O ₂	Oxygen
MEA	Membrane Electrode Assembly

which contains an inlet in each branch can improve current density and water production because of the reactants distribution uniformity enhancement [5]. Yuh Ming Ferng et al. [18] compared the serpentine channel with parallel one and found that the former gives a higher performance. They also found that for parallel configuration, the channel depth affects the performance of the cell, while it has no influence in the case of serpentine channel configuration. For a serpentine channel design, high flow velocity and GDL permeability enhance the infiltration rate of reactants into the GDL, which represents an advantage comparing to the parallel channels configuration. For serpentine channel, the flow becomes turbulent even at relatively low Reynolds numbers which represents a singularity in downstream bends regions [19]. A narrower serpentine channel with longer straight channel segments enhances the convective transfer process. This design increases the pressure gradient between the adjacent branches of the channel, which

improves the transfer process in the GDL [9]. Comparing to the parallel channel configuration, an interdigitated channel configuration creates a transversal flow in the GDL that improves the convective heat transfer and the evacuation of water from the area under ribs [20,21]. However, an important pressure gradient is necessary to create the transversal flow in the GDL [21,22]. A parallel channel configuration produces higher power under low current densities because of the low production of water. However, an interdigitated flow field can be advantageous at high current density because of the performance gain from the transversal flow [21]. Both configurations are sensible to channel-rib width ratio [23]. The comparison between serpentine channels configuration and interdigitated ones allows as concluding that; more the humidification of reactants is important, more the performance of the cell with interdigitated channels design is better [24]. Chang-Whan Lee et al. [25] have investigated the effect of the flow direction on a single cell performance. They found that counter-flow resulted in a more uniform distribution of the current density, which enhances the cell performance. Jang et al. [17] studied numerically and experimentally the performance of a PEM fuel cell with spiral channel geometry, and compared it to that of a cell with serpentine channels. They found that the former shape can decrease the pressure drop and increase heat and mass transfer which improve the fuel cell performance. Juarez-Robles et al. [26] developed a three-dimensional, single-phase, non-isothermal model of PEM fuel cell with concentric spiral flow channels, in order to study the influence of the number of channels on the performance of the cell. They found that the four-channel model produces the best performance with, relatively, low pressure drop, uniform reactants distribution, and current density. The higher power is obtained using this configuration. The eight-channel model generates the worst performance. Rangel-Hernandez et al. [27] built a numerical model of a PEM fuel cell with a spiral channel, to study the irreversibility origins. To make the study easier, they also introduced a dimensionless parameter, which is the ratio of the entropy generation due to mass transfer to the total entropy generation. They found that concentration losses are the main cause of the irreversibility in a fuel cell.

The aim of this work is to investigate how the modification of geometrical parameters, namely, the channel-rib width ratio, the flow direction and the number of turns of the channel can improve the performance of PEM fuel cell with spiral flow field.

Physical model

The fuel cell geometry is shown in Fig. 1. It consists of a membrane, an anode and a cathode superposed as three thin disks, two catalyst layers between membrane and electrodes, and two spiral flow channels on both sides of the sandwich. To investigate the effect of the channel-rib width ratio, three ratios are considered in this study: $b = 1$, $b = 2$ and $b = 3$.

To study the effect of the number of turns of the spiral channel on reactants distribution, we realized a comparison between three different configurations using four, five and six turns. The two possible directions are shown in Fig. 1 (b). The first direction corresponds to the case where the reactants are

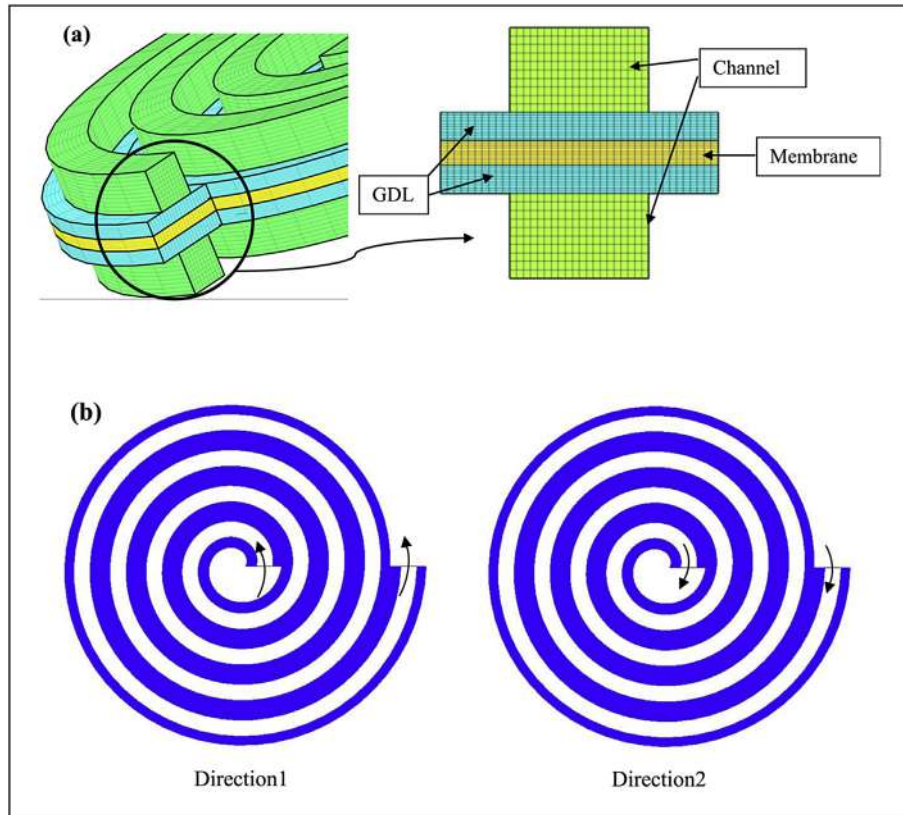


Fig. 1 – Cell geometry; (a) Three-dimensional computational domain; (b) gas flow directions.

injected from the inlet inside the spiral channel and ejected from the outlet. In contrary, for the second direction, they injected from the outlet and ejected from the inlet.

Model assumptions

A complete fuel cell is an extremely complex system involving fluid dynamics, mass transport phenomena, and electrochemical reactions feature. In order to solve a complete three-dimensional model problem, we need to make the following sensible simplifying assumptions:

- Flows in channels are supposed laminar, incompressible and unsteady;
- Water in the channels and in gas diffusion layers is considered as vapor;
- Water is produced in vapor state;
- The diffusion layer is homogeneous and isotropic;
- The membrane is fully humidified so that the ionic conductivity is constant.

Governing equations

To investigate the fuel cell performance, we have to study many coupled phenomena in different parts of the cell such as

reactants flow, species transfer, reactants consumption and water production, as well as the electric power generation.

To study the different phenomena, a three-dimensional unsteady model including the conservation equations of momentum and species is employed, using cylindrical coordinates.

• Continuity equation

$$\frac{\partial(\rho u_r)}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial(\rho u_\theta)}{\partial \theta} + \frac{\partial(\rho u_z)}{\partial z} = 0 \quad (1)$$

Table 1 – Electrochemical parameters [26].

Property	Value
GDL and catalyst conductivity	$53\Omega^{-1}\text{m}^{-1}$
GDL porosity	0.4
Catalyst porosity	0.4
Concentration exp. (anode)	0.5
Concentration exp. (cathode)	1
Transfer coefficient (anode)	2
Ref. current density (anode)	10^9Am^{-3}
Transfer coefficient (cathode)	2
Ref. current density (cathode)	$3 \times 10^5\text{Am}^{-3}$
Hydrogen reference diffusivity	$1.1 \times 10^{-4}\text{m}^2\text{s}^{-1}$
Oxygen reference diffusivity	$3.2 \times 10^{-5}\text{m}^2\text{s}^{-1}$
Water reference diffusivity	$7.35 \times 10^{-5}\text{m}^2\text{s}^{-1}$
Permeability	$2 \times 10^{-10}\text{m}^2$

• Momentum equations

Fully three-dimensional Navier–Stokes equations are resolved in cylindrical coordinates:

$$\frac{\partial \epsilon \rho u_r}{\partial t} + u_r \frac{\partial \epsilon \rho u_r}{\partial r} + \frac{u_\theta}{r} \frac{\partial \epsilon \rho u_r}{\partial \theta} + u_z \frac{\partial \epsilon \rho u_r}{\partial z} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \epsilon \mu \frac{\partial u_r}{\partial r} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\epsilon \mu \frac{1}{r} \frac{\partial u_r}{\partial \theta} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\epsilon \mu \frac{\partial u_r}{\partial z} \right) + S_r \quad (2)$$

$$\frac{\partial \epsilon \rho u_\theta}{\partial t} + u_r \frac{\partial \epsilon \rho u_\theta}{\partial r} + \frac{u_\theta}{r} \frac{\partial \epsilon \rho u_\theta}{\partial \theta} + u_z \frac{\partial \epsilon \rho u_\theta}{\partial z} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \epsilon \mu \frac{\partial u_\theta}{\partial r} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\epsilon \mu \frac{1}{r} \frac{\partial u_\theta}{\partial \theta} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\epsilon \mu \frac{\partial u_\theta}{\partial z} \right) + S_\theta \quad (3)$$

$$\frac{\partial \epsilon \rho u_z}{\partial t} + u_r \frac{\partial \epsilon \rho u_z}{\partial r} + \frac{u_\theta}{r} \frac{\partial \epsilon \rho u_z}{\partial \theta} + u_z \frac{\partial \epsilon \rho u_z}{\partial z} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \epsilon \mu \frac{\partial u_z}{\partial r} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\epsilon \mu \frac{1}{r} \frac{\partial u_z}{\partial \theta} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\epsilon \mu \frac{\partial u_z}{\partial z} \right) + S_z \quad (4)$$

When the source terms are given by:

$$S_r = - \left(\frac{\mu}{r^2} + \frac{\epsilon^2 \mu}{k} \right) u_r - \left(\frac{\epsilon \rho u_\theta^2}{r} + \epsilon \frac{\partial P}{\partial r} + \mu \epsilon \frac{2}{r^2} \frac{\partial u_\theta}{\partial \theta} \right) \quad (5)$$

$$S_\theta = - \left(\frac{\epsilon \rho u_r}{r} + \frac{\mu \epsilon}{r^2} + \frac{\epsilon^2 \mu}{k} \right) u_\theta - \left(\epsilon \frac{\partial P}{r \partial \theta} + \mu \epsilon \frac{2}{r^2} \frac{\partial u_r}{\partial \theta} \right) \quad (6)$$

$$S_z = - \frac{\epsilon^2 \mu}{k} u_z - \epsilon \frac{\partial P}{\partial z} \quad (7)$$

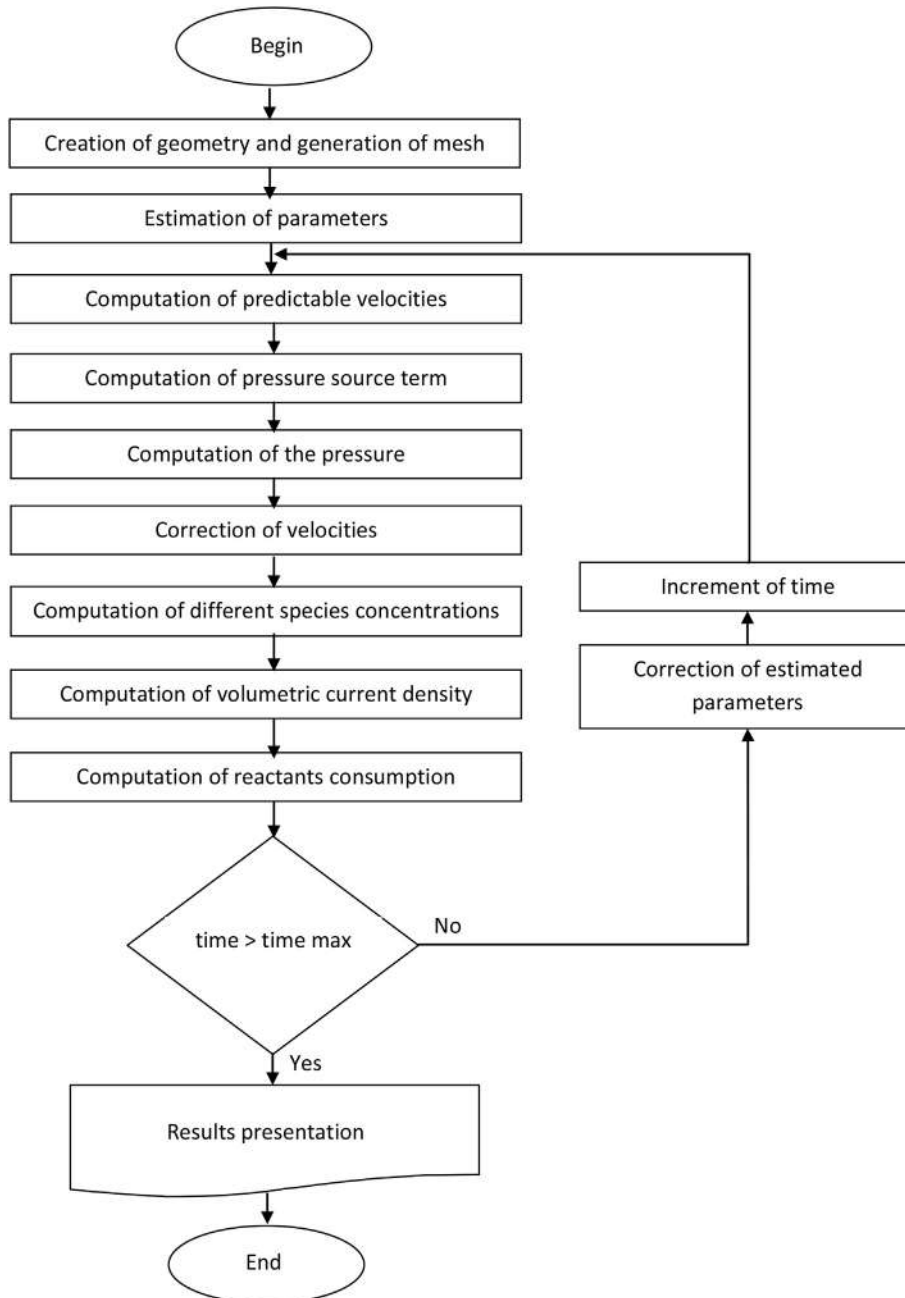


Fig. 2 – Computational algorithm.

• Species conservation equation

The equation of species conservation is given by:

$$\frac{\partial \epsilon C_k}{\partial t} + u_r \frac{\partial \epsilon C_k}{\partial r} + \frac{u_\theta}{r} \frac{\partial \epsilon C_k}{\partial \theta} + u_z \frac{\partial \epsilon C_k}{\partial z} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \epsilon D_k \frac{\partial C_k}{\partial r} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\epsilon D_k \frac{1}{r} \frac{\partial C_k}{\partial \theta} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\epsilon D_k \frac{\partial C_k}{\partial z} \right) + S_k \quad (8)$$

S_k : the source term for the species k , which can be Oxygen, Hydrogen or Water.

The diffusivities are corrected using the Bruggemann correction formula [25]:

$$D_k^{eff} = D_k \epsilon^{1.5} \quad (9)$$

The diffusivity of oxygen, hydrogen and water are calculated using Eq. (10) [25,26]:

$$D_k = D_k^0 \left(\frac{T}{T_0} \right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{P_0}{P} \right) \quad (10)$$

The catalyst layer thickness is negligible: it can be considered as a thin interface between membrane and electrodes [28]. At the cathode catalyst layer interface, the source terms for oxygen water are respectively given by:

$$S_{O_2} = -\frac{j_c}{4F} \quad (11)$$

$$S_{H_2O} = \frac{j_c}{2F} \quad (12)$$

At the anode catalyst layer interface, the source term for hydrogen is given by:

$$S_{H_2} = -\frac{j_a}{2F} \quad (13)$$

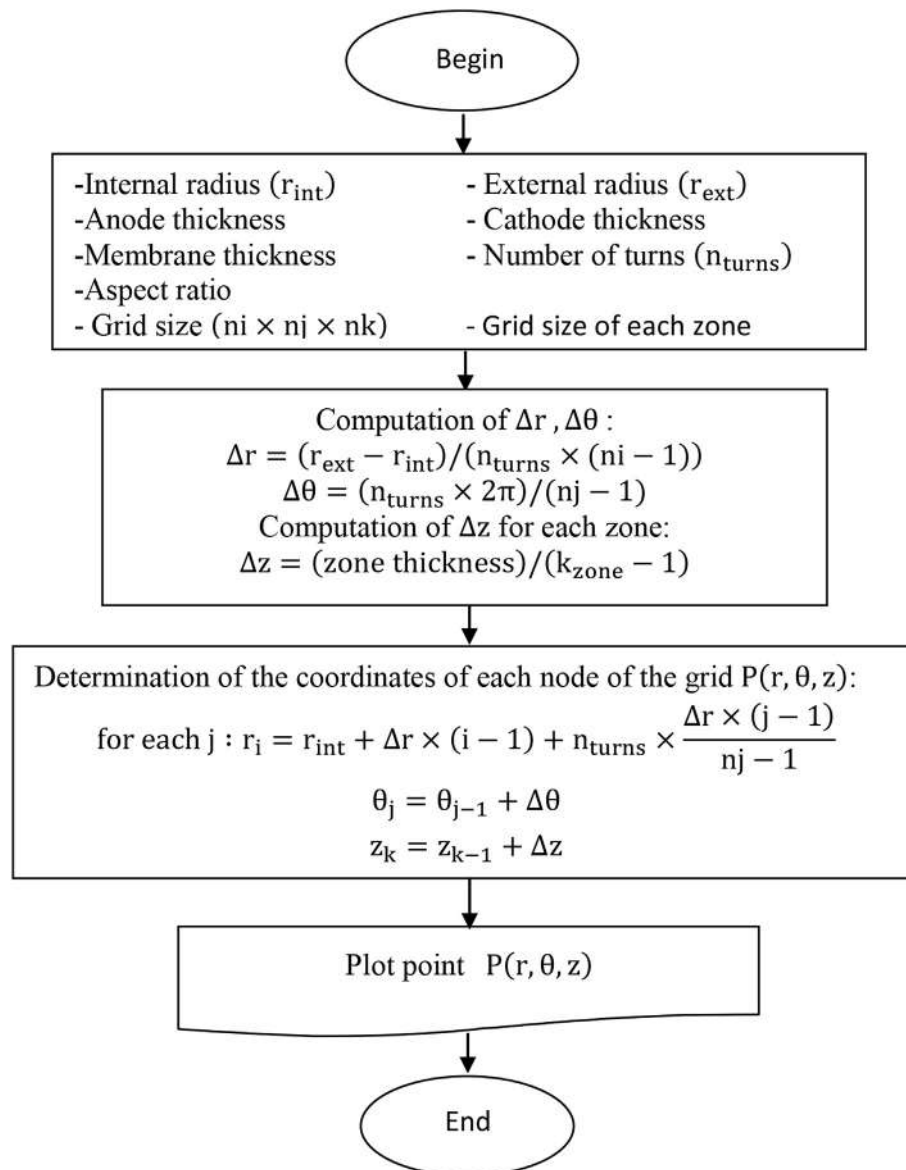


Fig. 3 – Main steps of the algorithm used to create geometry and mesh.

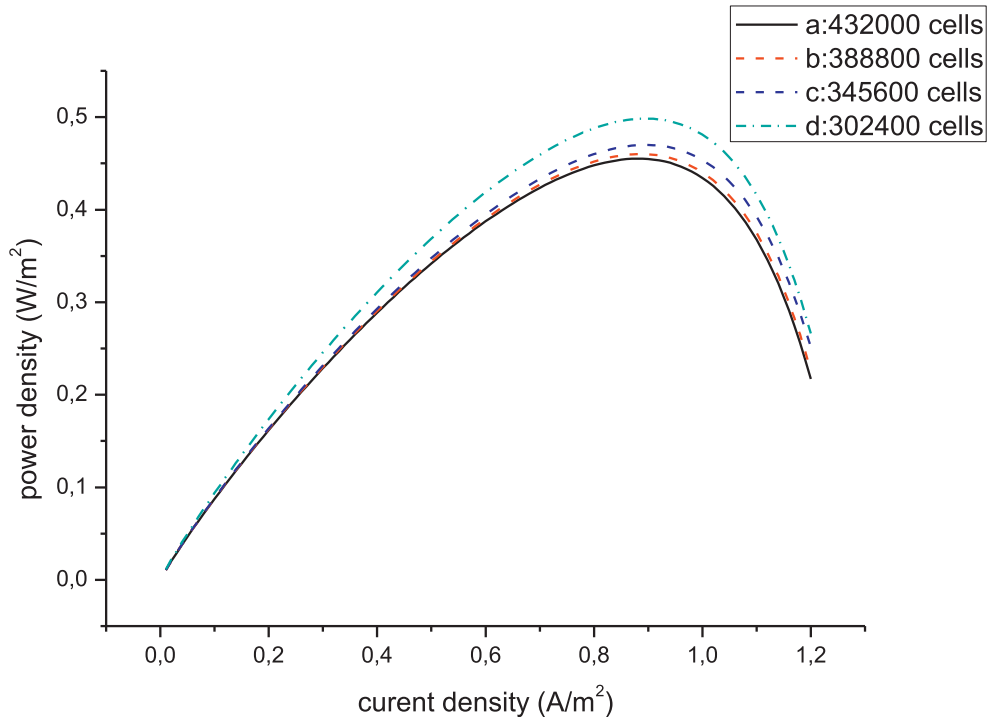


Fig. 4 – Mesh independency checking. a: 40*30*270 for the MEA and 20*20*270 for channels, b: 36*30*270 for the MEA and 18*20*270 for channels, c: 32*30*270 for the MEA and 16*20*270 for channels, d: 28*30*270 for the MEA and 14*20*270 for channels.

The volumetric current density is defined by the Butler–Volmer formula:

$$j_c = j_{0,c}^{ref} \left(\frac{C_{O_2}}{C_{O_2}^{ref}} \right)^{\gamma_{O_2}} \left(e^{\frac{a_c F}{RT} \eta_{act,c}} + e^{-\frac{a_c F}{RT} \eta_{act,c}} \right) \quad (14)$$

$$j_a = j_{0,a}^{ref} \left(\frac{C_{H_2}}{C_{H_2}^{ref}} \right)^{\gamma_{H_2}} \left(e^{\frac{a_a F}{RT} \eta_{act,a}} + e^{-\frac{a_a F}{RT} \eta_{act,a}} \right) \quad (15)$$

The cell potential is determined using the following formula:

$$E_{cell} = E - \eta_{act} - \eta_{ohm} - \eta_{Diff} \quad (16)$$

The equilibrium potential is determined using the Nernst equation [29,30].

$$E = 1.229 - 0.85 \times 10^{-3} (T - 298.15) + 4.3085 \times 10^{-5} T \left[\ln \left(P_{H_2} + \frac{1}{2} P_{O_2} \right) \right] \quad (17)$$

Activation overpotential is given by [25,26];

$$\eta_{act} = -[\xi_1 + \xi_2 T + \xi_3 T \ln(C_{O_2}) + \xi_4 T \ln(i)] \quad (18)$$

Where “i” is the current density and ξ_1 , ξ_2 , ξ_3 and ξ_4 are parametric coefficients for each fuel cell model [29,30]:

$$\begin{cases} \xi_1 = -0.948 \\ \xi_2 = 0.00286 + 0.0002 \ln(A_{MEA}) + 4.310^{-5} \ln(C_{H_2}) \\ \xi_3 = 7.610^{-5} \\ \xi_4 = -1.9310^{-4} \end{cases} \quad (19)$$

The membrane resistance, due to the ohmic overpotential produced by the hydrogen ions transport, is given by the following expression:

$$\eta_{ohm} = i \frac{\delta_m}{\sigma_m} \quad (20)$$

The membrane local ionic conductivity σ_m is defined by the following empirical expression [11,27,29,31–33]:

$$\sigma_m = [0.5139\lambda - 0.326] \exp \left[1268 \left(\frac{1}{303} - \frac{1}{T} \right) \right] \quad (21)$$

The water content λ is given by [20,22,23]:

$$\begin{cases} \lambda = 0.043 + 17.10a - 39.85a^2 + 36.00a^3 & \text{si } a \leq 1 \\ \lambda = 14.0 + 1.4(a - 1) & \text{si } a > 1 \end{cases} \quad (22)$$

The water activity a can be expressed as [20]:

$$a = \frac{C_{H_2O} RT}{P_{sat}} \quad (23)$$

The saturation pressure of water vapor can be computed using the following formula [27,30]:

$$\log_{10} P_{sat} = -2.1794 + 0.02953(T - 273.15) - 9.1837 \times 10^{-5} \times (T - 273.15)^2 + 1.4454 \times 10^{-7} \times (T - 273.15)^3 \quad (24)$$

Diffusion overpotentials are given by [29]:

$$\eta_{Diff} = \frac{RT}{2F} \ln \left(1 - \frac{i}{i_{max}} \right) \quad (25)$$

Table 2 – Coefficient of the finite volume method in cylindrical coordinates.

$$ap = a_w + a_e + a_s + a_n + a_b + a_t + a_p^0 + S_p \Delta V \quad ; \quad a_p^0 = \varepsilon \rho \Delta V / \Delta t$$

$$a_w = D_w \max[0, (1 - 0.1|Pe_w|)^5] + \max[+F_w, 0]$$

$$a_e = D_e \max[0, (1 - 0.1|Pe_e|)^5] + \max[-F_e, 0]$$

$$a_s = D_s \max[0, (1 - 0.1|Pe_s|)^5] + \max[+F_s, 0]$$

$$a_n = D_n \max[0, (1 - 0.1|Pe_n|)^5] + \max[-F_n, 0]$$

$$a_b = D_b \max[0, (1 - 0.1|Pe_b|)^5] + \max[+F_b, 0]$$

$$a_t = D_t \max[0, (1 - 0.1|Pe_t|)^5] + \max[-F_t, 0]$$

$$F_w = \varepsilon \rho u_w \Delta r \Delta z$$

$$D_w = \Gamma_w (\Delta r \Delta z) / r_p \delta \theta_{WP}$$

$$F_e = \varepsilon \rho u_e \Delta r \Delta z$$

$$D_e = \Gamma_e (\Delta r \Delta z) / r_p \delta \theta_{EN}$$

$$F_s = \rho \varepsilon u_r r_s \Delta \theta \Delta z$$

$$D_s = \Gamma_s (r_s \Delta \theta \Delta z) / \delta r_{SP}$$

$$F_n = \rho \varepsilon u_r r_n \Delta \theta \Delta z$$

$$D_n = \Gamma_n (r_n \Delta \theta \Delta z) / \delta r_{PN}$$

$$F_b = 1/2 \varepsilon \rho u_{zb} (r_n^2 - r_s^2) \Delta \theta$$

$$D_b = \Gamma_b ((r_n^2 - r_s^2) \Delta \theta / 2) / \delta z_{BP}$$

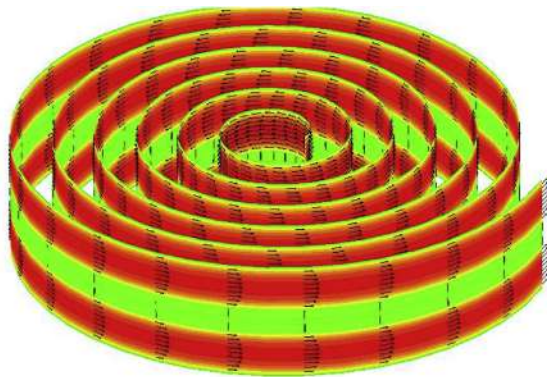
$$F_t = \varepsilon \rho u_{zt} (r_n^2 - r_s^2) \Delta \theta / 2$$

$$D_t = \Gamma_t ((r_n^2 - r_s^2) \Delta \theta / 2) / \delta z_{PT}$$

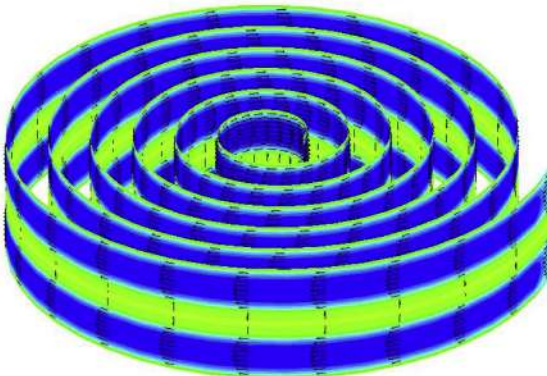
The electrochemical parameters values are presented in Table 1.

Initial and boundary conditions

Initial conditions



Direction 1



Direction 2

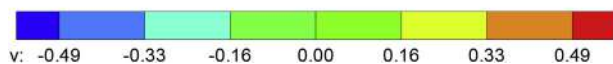


Fig. 5 – Axial velocity distributions along the spiral flow.

It is assumed that the stack is initially empty (there is no reactant) while the initial concentrations of the different species are null. The speed is initialized by a null value as:

$$P_0 = u_{r,0} = u_{\theta,0} = u_{z,0} = C_{k0} = 0 \quad (26)$$

The boundary conditions are applied to all external borders of the computational domain.

Inlet conditions

At the channel inlet, Pressure, velocity, and Species concentrations are imposed (Dirichlet condition).

Output conditions

At the flow channels outlet, we assume that the gradient, of all variables, in the flow direction is null (Neumann condition).

$$\frac{\partial u_\theta}{r \partial \theta} = \frac{\partial u_r}{r \partial \theta} = \frac{\partial u_z}{r \partial \theta} = \frac{\partial P}{r \partial \theta} = \frac{\partial C_{O_2}}{r \partial \theta} = \frac{\partial C_{H_2}}{r \partial \theta} = \frac{\partial C_{H_2O}}{r \partial \theta} = 0 \quad (27)$$

External surfaces

There is no matter flux through the external surfaces, which means that the species concentrations gradient is null. The velocities on the external surfaces are null, because of the condition of adhesion to the wall.

Numerical method

A FORTRAN program had been developed to construct the geometry and to generate the mesh of the computation domain, and to solve the algebraic equations systems obtained from the discretization of the problem governing equations, using the finite volume method with the power law scheme for space and fully implicit scheme for the time. The essential steps of the program are shown in Fig. 2. The module responsible on the generation of geometry and mesh is presented in Fig. 3. In order to check the mesh independency, several grids with different number cell volume were tested, as shown in Fig. 4, and the one presenting the lowest

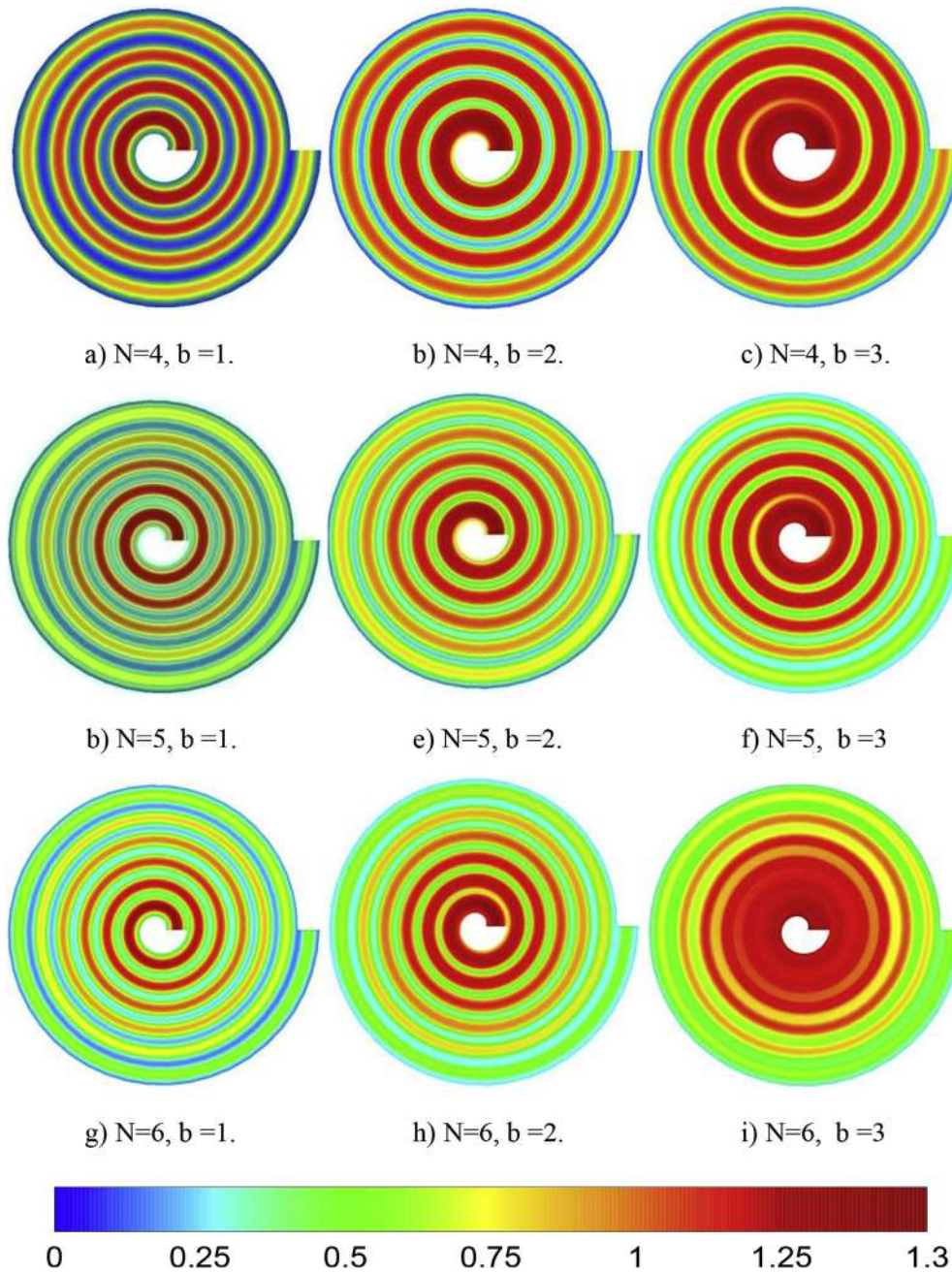


Fig. 6 – Hydrogen concentration field in the GDL in direction 1 for several (N,b).

difference in the power density is selected to resolve the governing equations. It is found that the adequate grid is the one with 432,000 cells, which showed an error less than 1.5%.

The governing equations take the shape of the transport equation which can be written for function ϕ as:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\epsilon\rho\phi) + \text{div}(\epsilon\rho u\phi) = \text{div}(\Gamma \text{grad}(\phi)) + S_\phi \quad (28)$$

After discretization, the transport equation is transformed to a set of algebraic equations which can be written as:

$$a_p \cdot \phi_p^{t+\Delta t} = a_w \cdot \phi_w^{t+\Delta t} + a_e \cdot \phi_e^{t+\Delta t} + a_s \cdot \phi_s^{t+\Delta t} + a_n \cdot \phi_n^{t+\Delta t} + a_b \cdot \phi_b^{t+\Delta t} + a_t \cdot \phi_t^t + a_p^0 \cdot \phi_p^{t+\Delta t} + S_u \cdot \Delta V \quad (29)$$

where: $a_p, a_w, a_e, a_s, a_n, a_b, a_t$ and a_p^0 are the coefficients of the finite volume method in cylindrical coordinates, they are given in Table 2.

To deal with the problem of pressure–velocity coupling, we performed staggered grid arrangement of the flow domain and we employed the projection algorithm [34]. After all, we obtained a set of linear algebraic equations which needs to be solved. In order to reduce the dimensionality problem from three dimensions to one dimension, we applied the ADI method on the set of algebraic equations (Eq. (29)). The ADI method consists to dividing each time step into three subintervals: from “t” to “t+ Δt /3”, from “t+ Δt /3” to “t+2 Δt /3”, and from “t+2 Δt /3” to “t+ Δt ”. In each subinterval, one direction is implicit, but the two other directions are

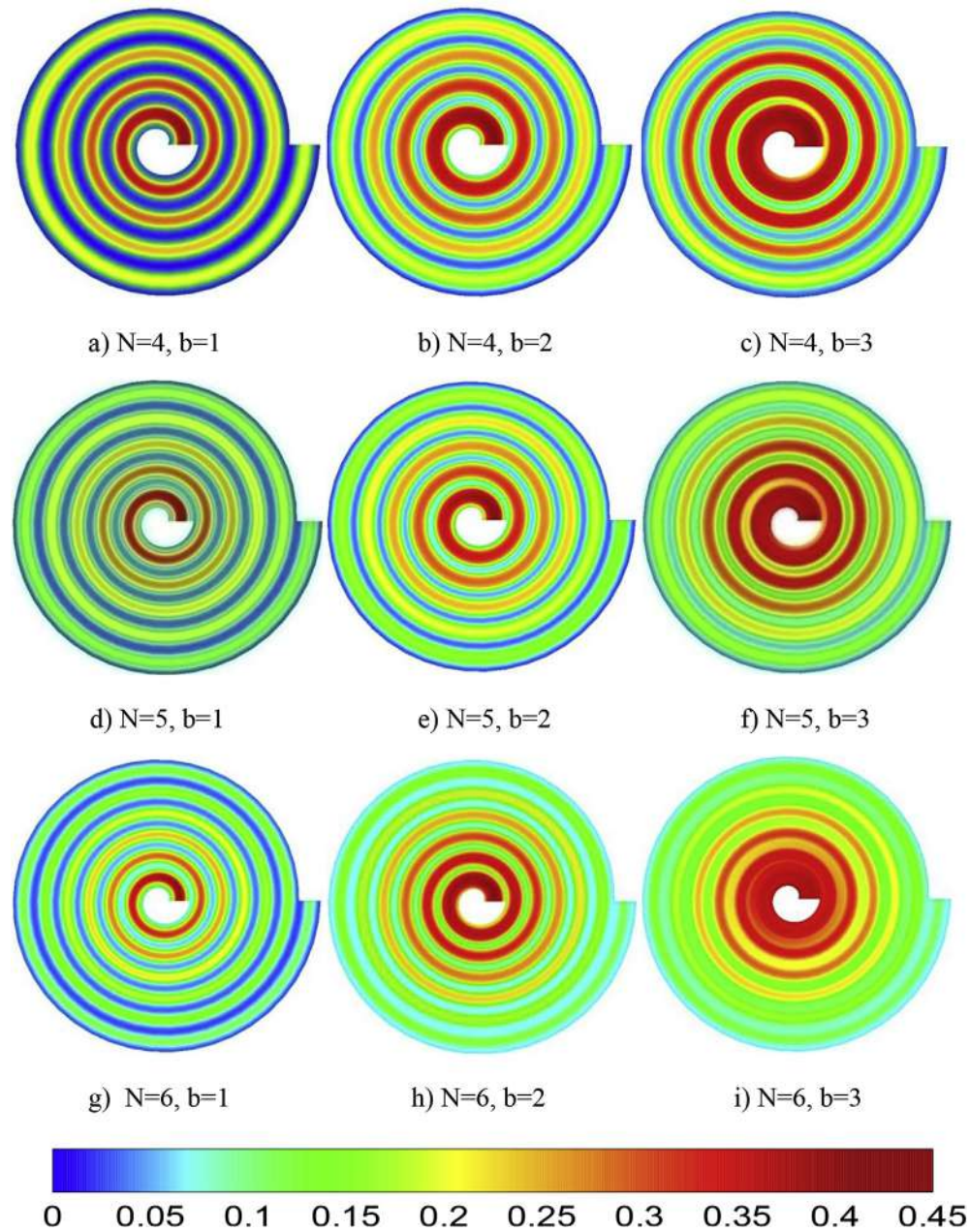


Fig. 7 – Oxygen concentration field in the GDL in direction 1 for several (N,b).

explicit, and Eq. (29) can be written in each subinterval as [35]:

First subinterval:

$$\begin{aligned}
 & -aw_{i,j,k}\phi_{i-1,j,k}^{t+\frac{1}{2}\Delta t} + ap_{i,j,k}\phi_{i+1,j,k}^{t+\frac{1}{2}\Delta t} - ae_{i,j,k}\phi_{i,j,k}^{t+\frac{1}{2}\Delta t} \\
 & = +as_{i,j,k}\phi_{i,j,k}^t + an_{i,j,k}\phi_{i,j,k}^t + ab_{i,j,k}\phi_{i,j,k-1}^t + at_{i,j,k}\phi_{i,j,k+1}^t \\
 & \quad + ap_{i,j,k}^0\phi_{i,i,k}^t + S_{p_{i,j,k}}\Delta V
 \end{aligned} \quad (30)$$

Second subinterval:

For the second subinterval, the discretization will be implicit in the tangential direction θ and explicit in the other two directions:

$$\begin{aligned}
 & -as_{i,j,k}\phi_{i,j,k}^{t+\frac{2}{3}\Delta t} + ap_{i,j,k}\phi_{i,j,k}^{t+\frac{2}{3}\Delta t} - an_{i,j,k}\phi_{i,j,k}^{t+\frac{2}{3}\Delta t} \\
 & = +aw_{i,j,k}\phi_{i-1,j,k}^{t+\frac{1}{2}\Delta t} + ae_{i,j,k}\phi_{i+1,j,k}^{t+\frac{1}{2}\Delta t} + ab_{i,j,k}\phi_{i,j,k-1}^{t+\frac{1}{2}\Delta t} + at_{i,j,k}\phi_{i,j,k+1}^{t+\frac{1}{2}\Delta t} \\
 & \quad + ap_{i,j,k}^0\phi_{i,i,k}^{t+\frac{1}{2}\Delta t} + S_{p_{i,j,k}}\Delta V
 \end{aligned} \quad (31)$$

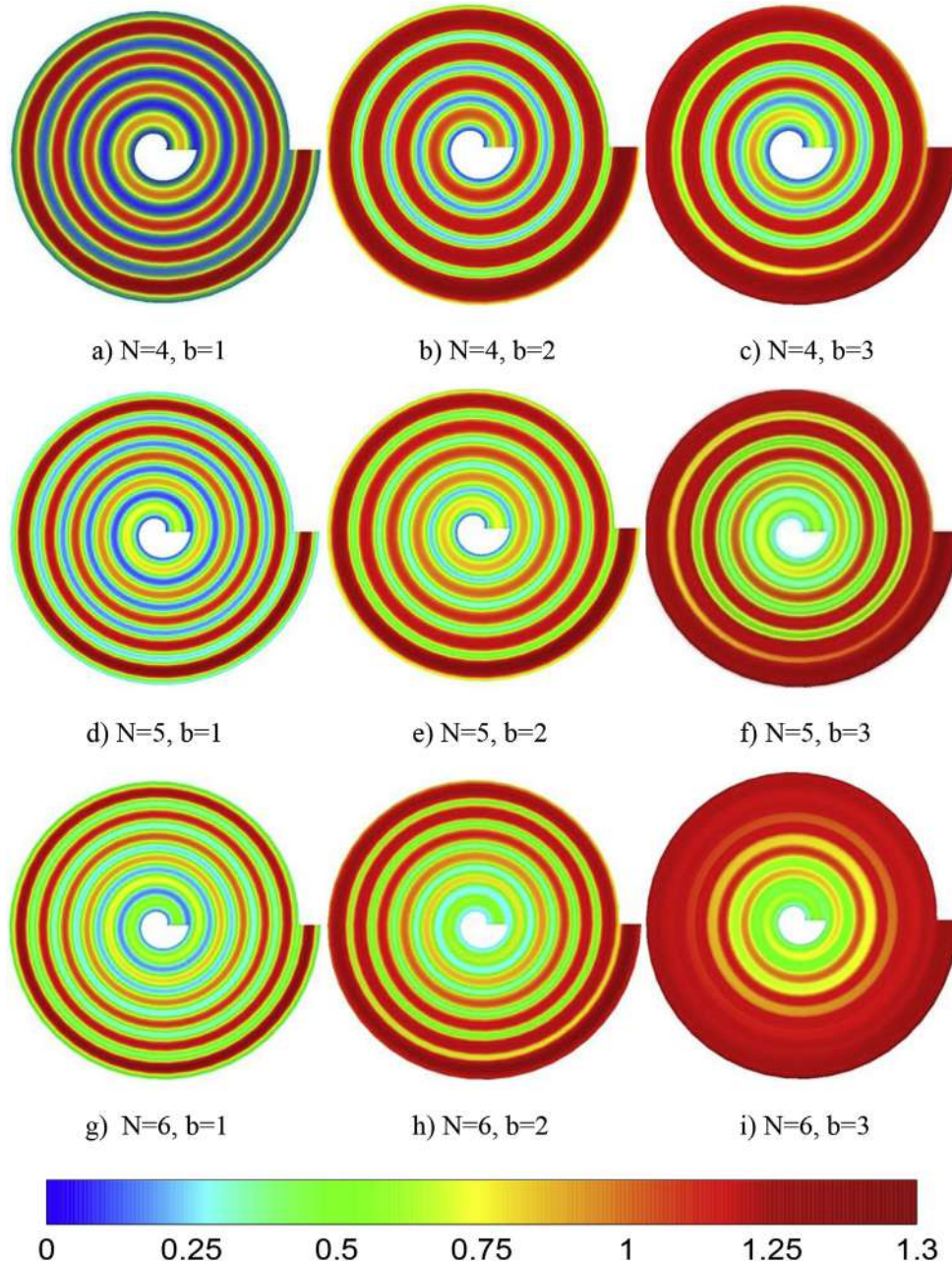


Fig. 8 – Hydrogen concentration field in the GDL in direction 2 for several (N,b).

Third subinterval:

For the third subinterval, the discretization will be implicit in the tangential direction z and explicit in the other two directions:

$$\begin{aligned}
 & -ab_{ij,k}\phi_{ij,k-1}^{t+\Delta t} + ap_{ij,k}\phi_{ij,k}^{t+\Delta t} - at_{ij,k}\phi_{ij,k+1}^{t+\frac{2}{3}\Delta t} \\
 & = +aw_{ij,k}\phi_{i-1,j,k}^{t+\frac{2}{3}\Delta t} + ae_{ij,k}\phi_{i+1,j,k}^{t+\frac{2}{3}\Delta t} + as_{ij,k}\phi_{ij-1,k}^{t+\frac{2}{3}\Delta t} + an_{ij,k}\phi_{ij+1,k}^{t+\frac{2}{3}\Delta t} \\
 & \quad + ap_{ij,k}^0\phi_{i,i,k}^{t+\frac{2}{3}\Delta t} + S_{p,ij,k}\Delta V
 \end{aligned} \tag{32}$$

Each of Eqs. (30)–(32) presents a one-dimensional problem which can be resolved using the tridiagonal matrix algorithm.

For every step of time, the pressure equation takes the form of Poisson equation, so we resolved it using the iterative method of Gauss-Seidel.

Results and discussion

We have obtained profiles of velocity and concentrations of oxygen and hydrogen in the different parts of the fuel cell, as well as the polarization curve. The velocity fields along the spiral path are shown in Fig. 5. We can easily notice that the highest velocity is reached in the center of the channel along

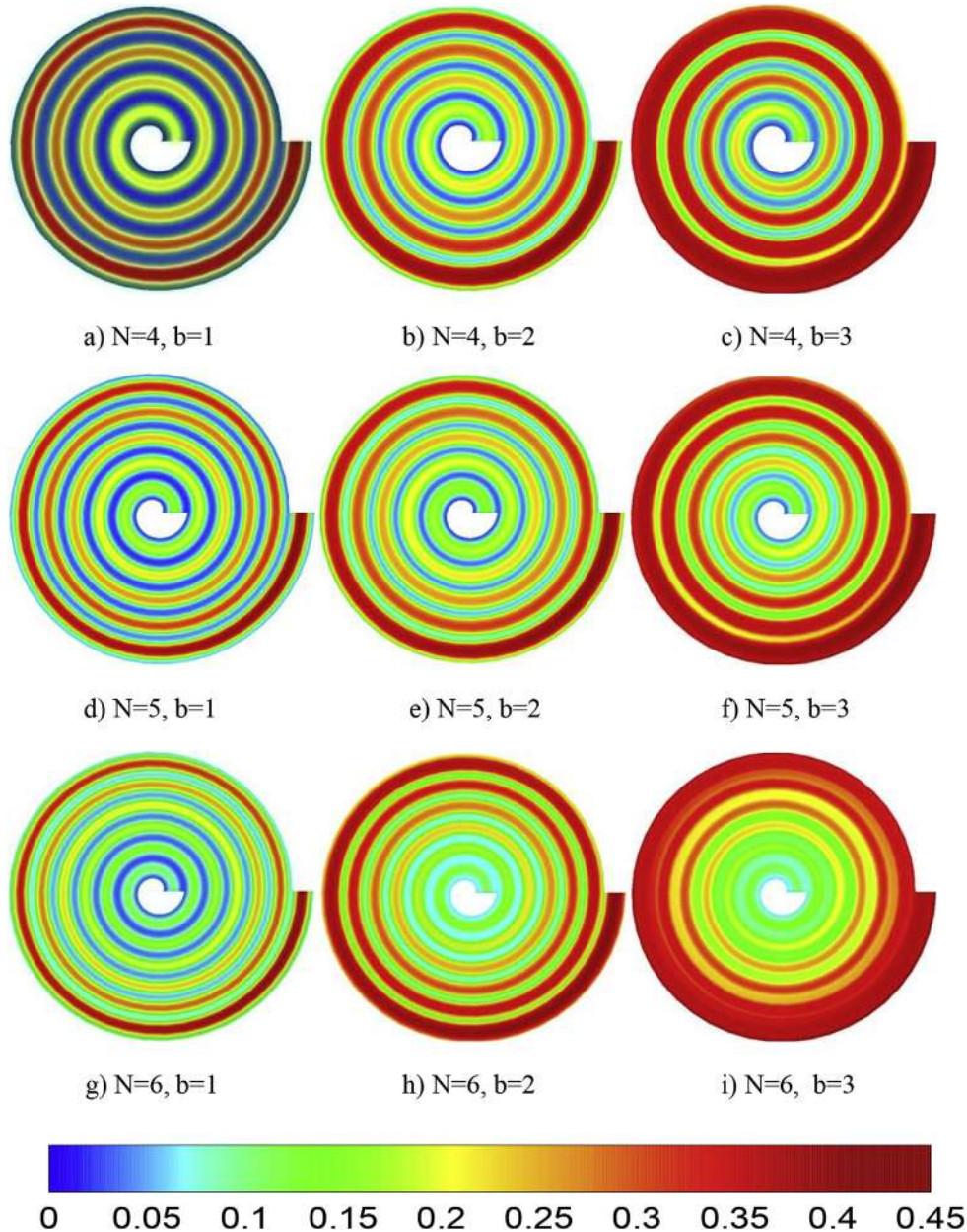


Fig. 9 – Oxygen concentration field in the GDL in direction 2 for several (N,b).

which the velocity laminar profile is maintained. In the gas diffusion layer, the velocity is moderated which means that the convective forces are negligible. Hence, the diffusive mass transfer becomes more important than the convective one in this zone. The electrochemical reactions occur in the catalyst layers, where reactants are consumed and water is produced, that's why the reactants concentration decreases gradually along the channels from the inlet to the outlet. For direction 1 case, the Hydrogen and Oxygen concentration distribution in the GDL are respectively showed in Figs. 6 and 7. We can observe that the reactants concentration in under-rib zone (the solid part of the bipolar plate) is lower than that in under-

channel (the hollow part of the bipolar plate) due to the low mass transfer rate and to the high consumption rate of reactants in the catalyst layer region under-channel. For direction 2 case, Figs. 8 and 9 respectively show Hydrogen and Oxygen concentration distribution in the GDL.

Effect of the channel-rib width ratio

According to results shown in Figs. 6–9, it's clear that the channel-rib width ratio has an important impact on the reactants distribution in the GDL. It can be noticed that when the channel-rib width ratio is higher, the contact area surface

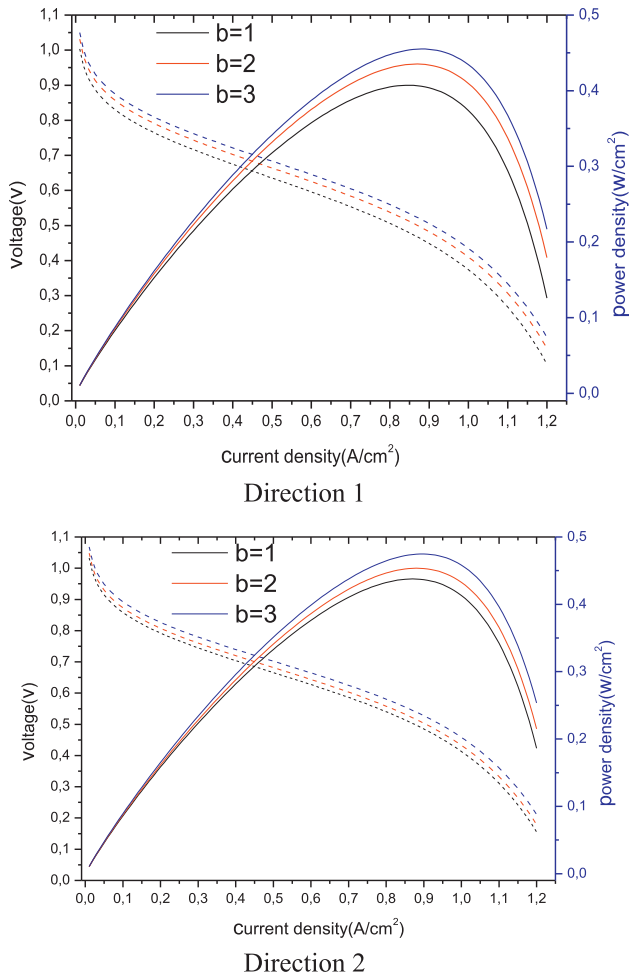


Fig. 10 – Cell performance in function of the channel-rib width ratio, for $N = 6$ (voltage; power density —).

between the flow channel and the gas diffusion layer (across which more reactants have seeped into the area under ribs) becomes larger. That's why the distribution of reactants is more uniform. On the other hand, when the width ratio decreases, the channel becomes narrower and the surface area supplying the GDL becomes smaller. Consequently, the reactants concentration in the under-ribs region is very low. The current density, which is directly dependent on the reactants local concentration, is more important in the under-channel zone than that in the under-rib one. This means that the configuration with wider channel has better reactants distribution than that with narrower one. The comparison of polarization curves for three different values of channel-rib width ratio is presented in Fig. 10. For direction 1, increasing the width ratio improves the fuel cell performance. The expansion of the channel enlarges the contact area between the channel and the GDL, which enhances the mass transfer process and increases the cell power density. The best performance is obtained for the channel-rib width ratio $b = 3$. For

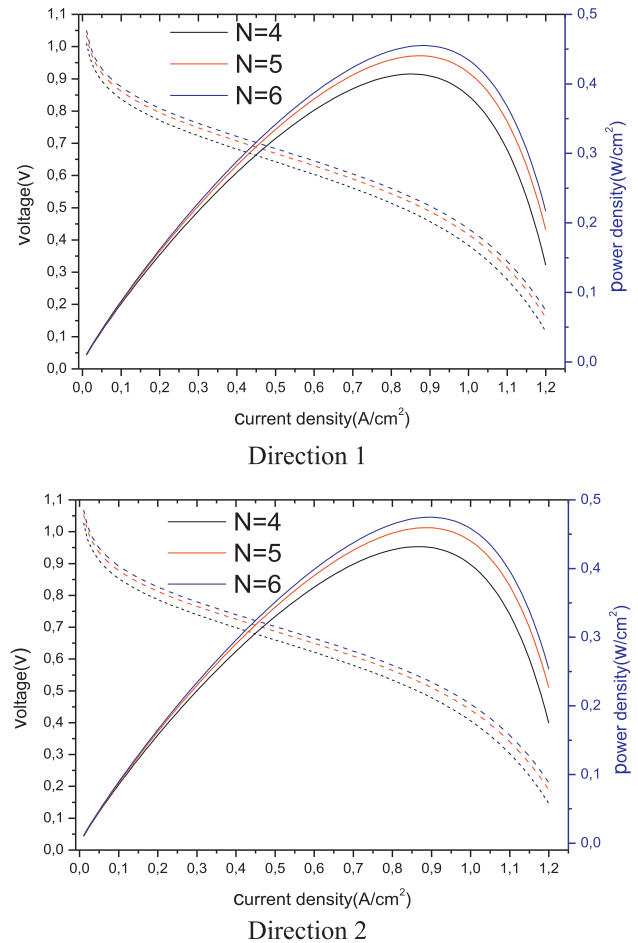


Fig. 11 – Cell performance in function of the number of turns, for $b = 3$ (Voltage; Power density —).

direction 2, the width ratio has the same effect on the cell performance. Thus, we can conclude that the use of a configuration with a wider channel and a narrower rib improves the cell performance.

Effect of the number of turns

The effect of the number of turns of the spiral channel on reactants distribution is presented in Figs. 6 and 7. If we conserve the same catalyst layer area, the same channel-rib width ratio and increase the number of turns, the channel becomes longer and narrower which makes longer the flow path along which more reactants are consumed and more water and current density are produced, resulting in an enhancement of the cell performances. Fig. 11 shows the polarization curve for three different spiral channel configurations; with four, five and six turns. We observe that when the number of turns increases, the power density increases because of the enhancement of the reactants consumption process along the spiral path.

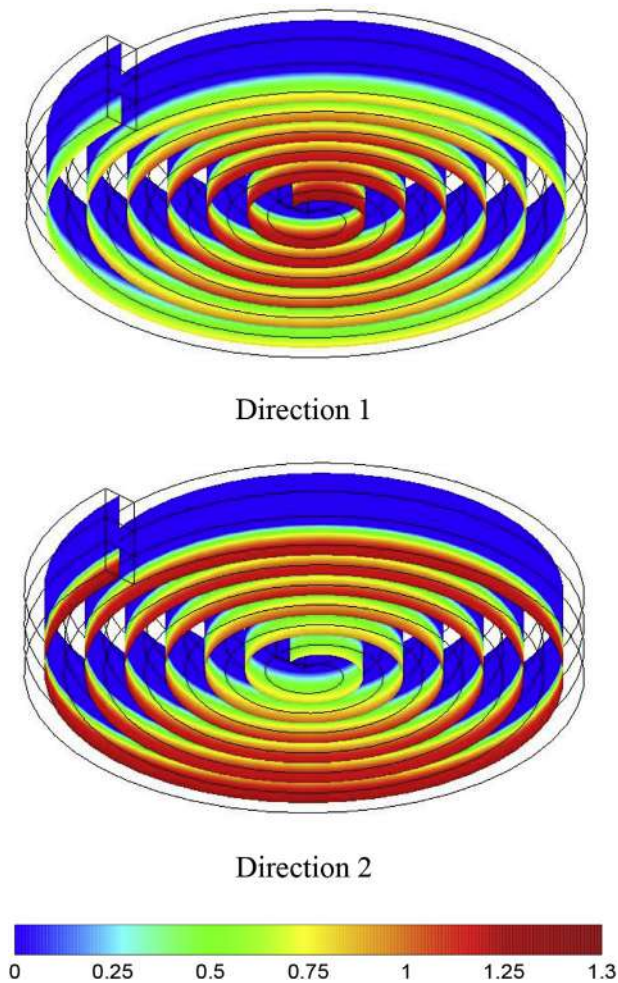


Fig. 12 – Axial distributions of Hydrogen concentration in the MEA along the spiral path.

Effect of the flow direction

The flow direction effect on the concentration distribution in the gas diffusion layer is presented in Figs. 6 and 7 for direction 1 and in Figs. 8 and 9 for direction 2. The comparison between the two cases is made for the same electrochemical reaction surface area, the same operating conditions and the same cell physical properties. For both cases, one can notice a high concentration of reactants at the cell inlet that decreases along the spiral path to the cell outlet (where gas flow leaves the diffusion layer and evacuate the water produced in the cell during the electrochemical reaction). Reactants concentration is low at the under-rib area at the cell outlet because firstly, the convective forces evacuate the non-reacted gas outside the GDL and secondly, the high consumption rate in the under-channel zone reduces the reactants quantity transferred to the under-rib region. For direction 2 case, the spiral shape of the channel generates a centrifugal force opposing the flow direction that gives more time for the reactants consumption. Thus, feeding the fuel

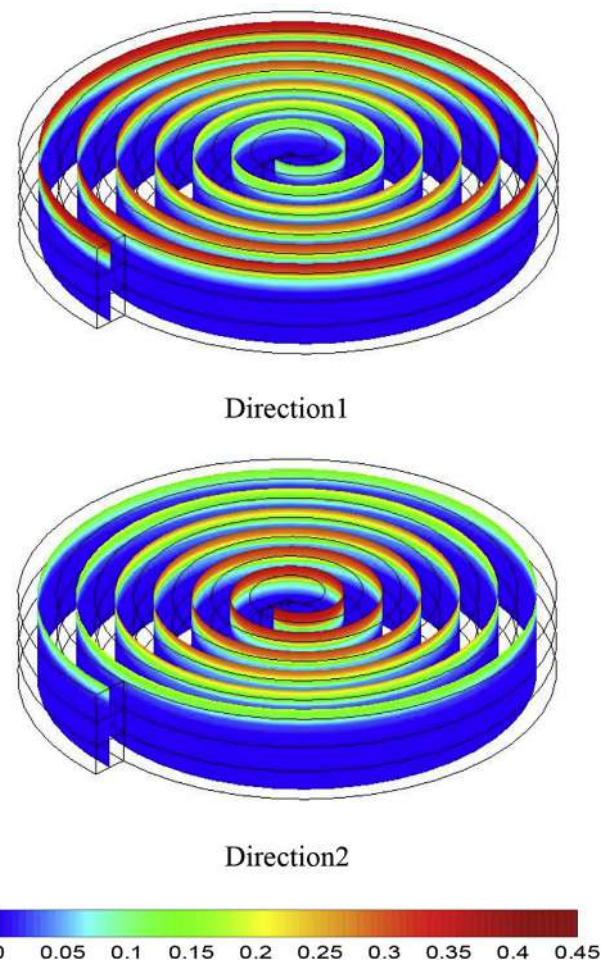


Fig. 13 – Axial distributions of Oxygen concentration in the MEA along the spiral path.

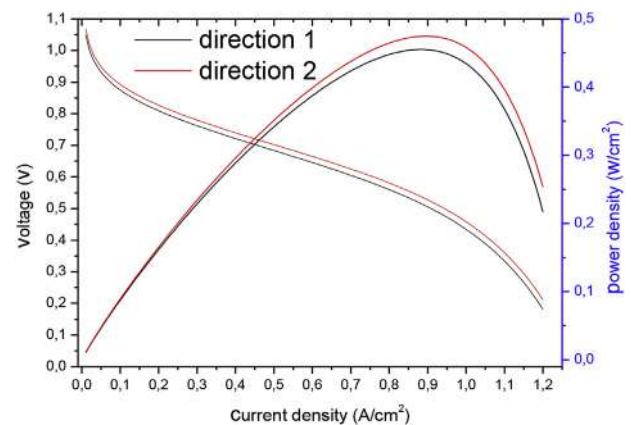


Fig. 14 – Effect of the direction on the cell performance for $N = 6$, and $b = 3$.

cell from the outer side (direction 2) of the spiral channel enhances the current density production which improves the cell performance and makes the direction 2 gainful over the direction 1 (Figs. 12–14).

Conclusions

We have realized this work in order to investigate how to improve the performance, of a planar PEM fuel cell with spiral flow field, by changing the channel configuration parameters and the flow direction. The governing equations of the problem were solved by the finite volume method. A FORTRAN program was developed to resolve the discretized equations. The results show that:

- The configuration with wider channel has better reactants distribution than the configuration with narrower channels.
- The injection of the reactants from the outer side of the spiral channel enhances the current density production which improves the cell performance.
- When the number of turns increases, the power density is higher because of the enhancement of the reactants consumption along the spiral path.

REFERENCES

- [1] Bachman John, Charvet Maxime, Santamaria Anthony, Tang Hong-Yue, Park Jae Wan, Walker Ronald. Experimental investigation of the effect of channel length on performance and water accumulation in a PEMFC parallel flow field. *Int J Hydrogen Energy* 2012;37:17172–9.
- [2] Guo Hang, Wang Mao Hai, Ye Fang, Ma Chong Fang. Experimental study of temperature distribution on anodic surface of MEA inside a PEMFC with parallel channels flow bed. *Int J Hydrogen Energy* 2012;37:13155–60.
- [3] Bunmark Natthawoot, Limtrakul Sunun, Fowler Michael W, Vatanatham Terdthai, Gostick Jeff. Assisted water management in a PEMFC with a modified flow field and its effect on performance. *Int J Hydrogen Energy* 2010;35:6887–96.
- [4] Shimpalee S, Van Zee JW. Numerical studies on rib-channel dimension of flow-field on PEMFC performance. *Int J Hydrogen Energy* 2007;32:842–56.
- [5] Lee Seungjae, Kim Taeyoung, Park Heekyung. Comparison of multi-inlet and serpentine channel design on water production of PEMFCs. *Chem Eng Sci* 2011;66:1748–58.
- [6] Le Anh Dinh, Zhou Biao. Fundamental understanding of liquid water effects on the performance of a PEMFC with serpentine-parallel channels. *Electrochim Acta* 2009;54:2137–54.
- [7] Reshетенко Tatyana V, Bender Guido, Bethune Keith, Rocheleau Richard. A segmented cell approach for studying the effects of serpentine flow field parameters on PEMFC current distribution. *Electrochim Acta* 2013;88:571–9.
- [8] Kandlikar Satish G, See Evan J, Koz Mustafa, Gopalan Preethi, Banerjee Rupak. Two-phase flow in GDL and reactant channels of a proton exchange membrane fuel cell. *Int J Hydrogen Energy* 2014;39:6620–36.
- [9] Manso AP, Marzo FF, Barranco J, Garikano X, Garmendia Mujika M. Influence of geometric parameters of the flow fields on the performance of a PEM fuel cell. *Int J Hydrogen Energy* 2012;37:15256–87.
- [10] Palaniswamy K, Marappan Muthukumar, Jothi Vasanth Rajendran. Influence of porous carbon inserts on scaling up studies for performance enhancement on PEMFC. *Int J Hydrogen Energy* 2016;41:2867–74.
- [11] Liu Hong, Li Peiwen, Wang Kai. Optimization of PEM fuel cell flow channel dimensions – Mathematic modeling analysis and experimental verification. *Int J Hydrogen Energy* 2013;38:9835–46.
- [12] Han In-Su, Lim Jongkoo, Jeong Jeehoon, Shin Hyun Khil. Effect of serpentine flow-field designs on performance of PEMFC stacks for micro-CHP systems. *Renew Energy* 2013;54:180–8.
- [13] Zeroual M, Ben Moussa H, Tamerabet M. Effect of gas flow velocity in the channels on consumption reactants in a fuel cell type (PEMFC). *Energy Procedia* 2012;18:317–26.
- [14] Perng Shiang-Wuu, Wu Horng-Wen. Effects of internal flow modification on the cell performance enhancement of a PEM fuel cell. *J Power Sources* 2008;175:806–16.
- [15] Perng Shiang-Wuu, Wu Horng-Wen, Jue Tswen-Chyuan, Cheng Kuo-Chih. Numerical predictions of a PEM fuel cell performance enhancement by a rectangular cylinder installed transversely in the flow channel. *Appl Energy* 2009;86:1541–54.
- [16] Heidary Hadi, Kermani Mohammad J, Advani Suresh G, Prasad Ajay K. Experimental investigation of in-line and staggered blockages in parallel flowfield channels of PEM fuel cells. *Int J Hydrogen Energy* 2016;41:6885–93.
- [17] Jang Jiin-Yuh, Cheng Chin-Hsiang, Liao Wang-Ting, Huang Yu-Xian, Tsai Ying-Chi. Experimental and numerical study of proton exchange membrane fuel cell with spiral flow channels. *Appl Energy* 2012;99:67–79.
- [18] Perng Yuh Ming, Su Ay. A three-dimensional full-cell CFD model used to investigate the effects of different flow channel designs on PEMFC performance. *Int J Hydrogen Energy* 2007;32:4466–76.
- [19] Suga K, Nishimura W, Yamamoto T, Kaneda M. Measurements of serpentine channel flow characteristics for a proton exchange membrane fuel cell. *Int J Hydrogen Energy* 2014;39:5942–54.
- [20] Santamaria Anthony D, Bachman John, Park Jae Wan. Cold-start of parallel and interdigitated flow-field polymer electrolyte membrane fuel cell. *Electrochim Acta* 2013;107:327–38.
- [21] Santamaria Anthony D, Bachman John, Park Jae Wan. Design strategy for a polymer electrolyte membrane fuel cell flow-field capable of switching between parallel and interdigitated configurations. *Int J Hydrogen Energy* 2013;38:5807–12.
- [22] Tong Shijie, Bachman John C, Santamaria Anthony, Park Jae Wan. Experimental investigation on a polymer electrolyte membrane fuel cell (PEMFC) parallel flow field design with external two-valve regulation. *J Power Sources* 2013;242:195–201.
- [23] Wang Xiao-Dong, Xu Jin-Liang, Yan Wei-Mon, Lee Duu-Jong, Su Ay. Transient response of PEM fuel cells with parallel and interdigitated flow field designs. *Int J Heat Mass Transf* 2011;54:2375–86.
- [24] Zhang Guangsheng, Guo Liejin, Ma Bin, Liu Hongtan. Comparison of current distributions in proton exchange membrane fuel cells with interdigitated and serpentine flow fields. *J Power Sources* 2009;188:213–9.
- [25] Lee Chang-Whan, Lee Mihui, Lee Min-Jae, Chang Seon-g-cheol, Yoon Sung-Pil, Ham Hyung Chul, et al. Effect of the flow directions on a 100 cm² MCFC single cell with internal flow channels. *Int J Hydrogen Energy* 2016;41:18747–60.
- [26] Juarez-Robles Daniel, Hernandez-Guerrero Abel, Ramos-Alvarado Bladimir, Elizalde-Blancas Francisco, Damian-Ascencio Cesar E. Multiple concentric spirals for the flow field of a proton exchange membrane fuel cell. *J Power Sources* 2011;196:8019–30.
- [27] Rangel-Hernandez VH, Damian-Ascencio C, Juarez-Robles D, Gallegos-Muñoz A, Zaleta-Aguilar A, Plascencia-Mora H.

- Entropy generation analysis of a proton exchange membrane fuel cell (PEMFC) with a fermat spiral as a flow distributor. *Energy* 2011;36:4864–70.
- [28] Al-Baghdadi Maher AR Sadiq. Performance comparison between airflow-channel and ambient air-breathing PEM fuel cells using three-dimensional computational fluid dynamics models. *Renew Energy* 2009;34:1812–24.
- [29] Haddad Djamel, Oulmi Kafia, Benmoussa Hocine, Aouachria Zeroual, Bourmada Noureddine. Transport phenomena effect on the performance of proton exchange membrane fuel cell (PEMFC). *Int J Hydrogen Energy* 2013;38:8550–6.
- [30] Al-Baghdadi Maher AR Sadiq. Modelling of proton exchange membrane fuel cell performance based on semi-empirical equations. *Renew Energy* 2005;30:1587–99.
- [31] Gurau Vladimir, Barbir Frano, Liu Hongtan. An analytical solution of a half-cell model for PEM fuel cells. *J Electrochem Soc* 2000;147:2468–77.
- [32] Um Sukkee, Wang CY. Three-dimensional analysis of transport and electrochemical reactions in polymer electrolyte fuel cells. *J Power Sources* 2004;125:40–51.
- [33] Penga Zeljko, Tolj Ivan, Barbir Frano. Computational fluid dynamics study of PEM fuel cell performance for isothermal and non-uniform temperature boundary conditions. *Int J Hydrogen Energy* 2016;41:17585–94.
- [34] Chorin AJ. Numerical solution of the Navier-Stokes equations. *Math Comput* 1968;22:745–62.
- [35] Wang Ting-Yuan, Chen Charlie Chung-Ping. 3-D thermal-ADI: a linear-time chip level transient thermal simulator. *IEEE Trans Comput Aided Des Integr Circuits Syst* December 2002;21(12).

ملخص

إن لتصميم الصفائح ثنائية الأقطاب وشكل قنوات الجريان المحفورة فيها تأثيرا كبيرا على أداء الخلية الوقودية. في هذا العمل قمنا بوضع برنامج (FORTRAN) من أجل دراسة تأثير كل من عرض القناة، عدد لفات القناة ذات الشكل الحلزوني و اتجاه الجريان على استهلاك المتفاعلات في خلية وقودية ذات غشاء ناقل للبروتونات (PEMFC) باستعمال قنوات جريان ذات شكل حلزوني. تحويل معادلات الإنحفاظ من الطابع المستمر إلى الطابع المنفصل تم باستعمال طريقة الأحجام المنتهية وذلك في معلم إحداثيات أسطوانية. النتائج المحصل عليها تثبت أن عرض القناة يؤثر فعلا على أداء الخلية. كلما زاد عرض القناة، زادت المساحة المشتركة بين هذه الأخيرة والطبقة الإسفنجية الناقلة للغازات مما يؤدي إلى تحسين آلية انتقال المادة والحرارة في هذه الطبقة. ولهذا فإن توزيع المتفاعلات يكون أكثر انتظاما. إن الزيادة في عدد اللفات المكونة للقناة الحلزونية يحسن أيضا من توزيع كل من الغازات ودرجات الحرارة ويجعلها أكثر انتظاما. الشكل الحلزوني يولد قوة طاردة مركزية، هذه الأخيرة تؤدي إلى تحسين أداء الخلية في حالة تغذية الخلية من الطرف الخارجي للقناة الحلزونية.

abstract

Bipolar plate design and its flow field shape have an important effect on the fuel cell performance. In this work, a FORTRAN program has been developed to investigate the effects of the channel width, the number of turns of the spiral channel and the flow direction on the reactants consumption in a proton exchange membrane fuel cell (PEMFC). The governing equations in cylindrical coordinates are discretized using the finite volume method. The results show that the channel-rib width ratio influences the cell performance; the higher ratio, the more important contact area between the channel and the GDL, the more reactants quantity seeped to the GDL and more uniform reactants distribution is. The increasing of the spiral channel turns number improves the reactants distribution uniformity. The channel spiral shape engenders a centrifugal force which enhances the cell performances in the case when the reactants are injected from the external side of the spiral channel and ejected from its internal one.

résumé

La configuration géométrique des plaques bipolaires et la forme des canaux d'écoulement ont un effet important sur la performance des piles à combustible. Dans ce travail, un programme FORTRAN a été développé pour étudier les effets de la largeur du canal sous forme spirale, le nombre de spires et le sens d'écoulement sur la consommation de réactifs dans une pile à combustible à membrane échangeuse de protons (PEMFC). Les équations de conservation en coordonnées cylindriques sont discrétisées en utilisant la méthode des volumes finis. Les résultats montrent que le rapport de largeur du canal/largeur de la nervure affecte la performance de la cellule; un rapport plus élevé augmente la surface de contact entre le canal et la couche de diffusion des gaz, ce qui améliore les processus de transfert de masse et de chaleur. La répartition des réactifs dans la GDL devient plus uniforme. L'augmentation du nombre de spires améliore la distribution des réactifs et des températures. La forme en spirale du canal engendre une force centrifuge qui améliore les performances de la cellule dans le cas où les réactifs sont injectés du côté extérieur du canal en spirale et éjectés de l'intérieur.