

République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique



Université Batna 2 Mostefa Ben Boulaïd
Faculté de Technologie
Département de Mécanique



Thèse

Présentée pour l'obtention du diplôme de :

Doctorat LMD en Génie Mécanique

Option : Energétique

Sous le Thème :

**Influence de la Configuration des Mini-Canaux sur la
Consommation des Combustibles dans une PEMFC**

Présentée par :

MOHAMMEDI Abdallah

Devant le jury composé de :

Mr. BOUGRIOU Cherif	Prof. Université de Batna 2	Président
Mr. BEN MOUSSA Hocine	Prof. Université de Batna 2	Rapporteur
M ^{elle} ZITOUNI Bariza	Prof. Université de Batna 1	Examinatrice
Mr DEMAGH Yassine	MCA Université de Batna 2	Examineur

Juin 2020

Dédicace

À mon père

À ma chère mère

À mon frère et ma chère sœur

À tous mes amis et collègues

*À tous ceux qui m'ont donné la force
de continuer*

Abdallah

Remerciements

Au nom de DIEU le clément le miséricordieux.

J'aimerais profiter cette occasion pour exprimer ma gratitude à tous ceux qui ont apporté une contribution substantielle à ma thèse de doctorat.

Tout d'abord, je tiens à remercier mon directeur de thèse, le Professeur **BEN MOUSSA Hocine**, de m'avoir donné l'occasion de participer à cette initiative de recherche dans le domaine des piles à combustible. Il m'a initié dans cet axe pour bien poursuivre ce travail avec ses commentaires très constructifs qui m'ont aidé à amener, reconsidérer et améliorer mes connaissances. Si ce n'est pas ses encouragements, sa passion, je n'arrive pas à terminer ce travail de thèse.

Je remercie le Professeur **BOUGRIOU Chérif**, de l'université MOSTEFA BEN BOULAID Batna-2, de m'avoir fait l'honneur de présider le jury.

J'adresse également tous mes vifs remerciements au Professeur **ZITOUNI Bariza**, de l'université HADJ Lakhdar Batna-1, et au Docteur **DEMAGH Yassine**, de l'université MOSTEFA BEN BOULAID Batna-2, d'avoir accepté d'être rapporteurs, ainsi pour leur lecture attentive de cet humble document.

J'aimerais remercier, les docteurs **SAHLI Youcef** et **TAMRABET Monsaf** pour ses encouragements et ses soutiens tout au long de cette tâche. Je suis également reconnaissant à tous mes amis pour les discussions précieuses qui ont rendu ma vie agréable.

Enfin, je ne saurais exprimer assez ma gratitude à ma mère, mon père et au reste de ma famille pour leur patience et leur soutien moral sans fin tout au long de mon doctorat. Parfois, les mots ne suffisent pas à tout décrire.

Sommaire

Remerciements	
Nomenclature et symboles	
Liste des figures	
Liste des tableaux	
Introduction générale	1

Chapitre I

Généralités et état de l'art sur les piles à combustible type PEMFC

Introduction	4
I.1 Histoire des Piles à Combustible	4
I.2 Histoire de l'électrolyse inverse	7
I.3 Classification et types de piles à combustible	7
I.3.1 Pile à combustible alcaline	8
I.3.2 Pile à combustible à l'acide phosphorique	9
I.3.3 Pile à combustible à carbonate fondue	9
I.3.4 Pile à combustible à oxyde solide	10
I.3.5 pile à combustible à méthanol direct	10
I.3.6 Pile à combustible à membrane échangeuse de protons	11
I.4 Domaine d'application des piles à combustible	12
I.4.1 Applications dans le domaine du transport	12
I.4.2 Applications stationnaires	12
I.4.3 Applications portables	13
I.5 Principe de fonctionnement et composants du PEMFC	14
I.5.1 Principe de fonctionnement de la pile à combustible PEMFC	14
I.5.2 Composants de la pile à combustible PEMFC	15
I.5.2.1 Membrane (Electrolyte)	15
I.5.2.2 Électrodes (zones actives)	16
I.5.2.3 Couches de diffusion des gaz	16
I.5.2.4 Plaques bipolaires	17

Chapitre II

Etude bibliographique

Introduction	18
II.1 Dimensionnement du PEMFC incluant les micro-canaux	18
II.2 Forme de micro-canaux au niveau de la section transversale	22
II.3 Configuration du chemin d'écoulement dans les micro canaux	25
II.4 Autres géométries	29

Chapitre III

Modélisation et simulation numériques

Introduction	32
III.1 Configuration planeaire	32
III.1.1 Domaine d'étude (modèle physique)	32
III.1.2 Hypothèse de simplification	33
III.1.3 Formulation mathématiques	33
III.1.4 Conditions aux limites	37
III.1.5 Simulation numérique	38
III.1.6 Indépendance de maillage et validation	38
III.1.7 Problématique	43
III.2 Configuration tubulaire	51
III.2.1 Domaine d'étude	51
III.2.2 Hypothèse de simplification	51
III.2.3 Formulation mathématiques	52
III.2.4 Conditions aux limites et conditions initial	56
III.2.5 Structures de programme	56
III.2.6 Résolutions numériques	58
III.2.7 Indépendance de maillage et validation	59
III.2.8 Problématique	60

Chapitre IV

Résultats et interprétations

Introduction	63
IV.1 Optimisation des dimensions du PEMFC incluant les dimensions micro-canaux	63
IV.1.1 Effet du rapport largeur/hauteur du canal transversal	63
IV.1.2 Effet de l'épaisseur du GDL	66
IV.1.3 Effet de l'épaisseur de la couche de catalyseur	67
IV.1.4 Effet de l'épaisseur de la membrane	68
IV.2 Optimisation de la forme de la section transversale des micro-canaux	71
IV.2.1 Géométries simples de la section transversale des micro-canaux	71
IV.2.2 Géométrie à base rectangulaire	74
IV.2.3 Géométrie à base trapézoïdale	76
IV.2.4 Géométrie à base trapézoïdale inversée	76
IV.2.5 Géométrie à base semi-elliptique	79
IV.2.6 Géométrie à base semi-elliptique inversée	80
IV.3 Optimisation du chemin d'écoulement des micro-canaux	83
IV.3.1 Effet de la hauteur de sortie des canaux	83
IV.3.2 Effet du nombre de marches d'escalier	84
IV.4 Géométrie tubulaire	88
Conclusion générale	94
Références bibliographiques	97
Annexe 1	110
Annexe 2	113
Annexe 3	149
Annexe 4	155
Annexe 5	156
Résumé	

Nomenclature et symboles

Lettres latines

C_2	Facteur de résistance inertielle (m^{-1}).
C_r	Constante du taux de condensation.
D_i	Coefficient de diffusivité d'espèce i .
D_i	Diffusivité ($m^2 s^{-1}$).
F	Constante de Faraday ($C kg mol^{-1}$).
h_{react}	Changement net d'enthalpie dû aux réactions électrochimiques (J).
h_L	Chaleur latente de vaporisation d'eau ($J mol^{-1}$).
$[H_2, O_2]$	Concentration d'espèces locales ($kg mol m^{-3}$).
I	Courant (A).
J^{ref}	Densité de courant d'échange de référence ($A m^{-2}$).
K	Perméabilité.
m	Débit massique des espèces ($kg s^{-1}$).
M_w	Masse moléculaire d'espèce ($kg kmol^{-1}$).
n	Nombre d'électrons transféré.
P	Pression (Pa).
p_c	Pression capillaire (Pa).
p_{sat}	Pression de saturation (Pa)
p_{wv}	Pression de la vapeur d'eau (Pa).
R	Constante des gaz parfaits ($J K^{-1} mol^{-1}$).
$R_{an/cat}$	Courant transféré dans anode/cathode ($A m^{-3}$).
R_{ohm}	Résistivité ohmique ($\Omega\cdot m$).
$R_{sol/mem}$	Transfert de courant volumétrique solide/membrane ($A m^{-3}$).
r_w	Taux de condensation ($kg m^{-3} s^{-1}$).
r_s	Exposant de blocage des pores.

s	Fraction volumique de l'eau liquide (saturation).
S_i	Terme source d'espèce i .
S_{H_2/O_2}	Terme source pour chaque espèce ($\text{kg s}^{-1} \text{m}^{-3}$).
S_h	Enthalpie (J mol^{-1}).
T	Température (K).
V_{oc}	Tension en circuit ouvert (V)
\mathbf{u} V_l	Vitesse de liquide (m s^{-1}).
V_i	Vitesse (m s^{-1}).
V_{mag}	Module de vitesse (m s^{-1}).

Lettres grecques

α	Coefficient de transfert.
γ	Coefficient de concentration.
ε	Porosité.
η	Surface locale sur-potentielle (surtension) (V)
θ_c	Angle de mouillage des électrodes (degrés).
μ_l	Viscosité cinématique de l'eau liquide ($\text{m}^2 \text{s}^{-1}$).
ρ	Masse volumique (kg m^{-3}).
ρ_l	Masse volumique de fluide (kg m^{-3}).
$\sigma_{sol/mem}$	Conductivité électrique solide/membranaire ($\Omega^{-1} \text{m}^{-1}$).
σ_t	Tension de surface (N m^{-2}).
$\varphi_{sol/mem}$	Potentiel électrique (V).
∇	Opérateur de divergence.

Abréviations

AFC	Pile à combustible Alcaline (Alkaline fuel cell).
DMFC	Pile à combustible à méthanol direct (Direct methanol fuel cell).
PAFC	Pile à combustible à acide phosphorique (Phosphoric acid fuel cell).

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 catalytique (Catalysts Layer).
MEA	Assemblage électrodes-membrane (Membrane Electrodes Assembly).
CSC	Section transversal du canal (Cross sectional channel).
CFD	Computational fluid dynamic.
CHW	Hauteur et largeur du canal (Channel height width).
SCG	Géométrie d'un seul canal (Single channel geometry).
SW	Marches d'escalier (Stair walk).

Liste des figures

- Fig.I.1 Batterie de gaz voltaïque construite par Sir William Grove.
Fig.I.2 Historique de la PEMFC.
Fig.I.3 Schéma des différentes piles à combustible.
Fig.I.4 Schéma de principe d'une PEMFC.
Fig.I.5 Schéma d'un empilement de PEMFC.
Fig.I.6 Schéma d'une pile à combustible.
Fig.III.1 Représentation schématique du domaine de calcul PEMFC.
Fig.III.2 Algorithme de simulation numérique.
Fig.III.3 Analyse de l'indépendance de maillage.
Fig.III.4 Présentation du maillage quadratique utilisé.
Fig.III.5 Comparaison de la courbe de polarisation entre le modèle actuel, expérimental de Ticianelli et al. [131] et simulation numérique de Hood [132].
Fig.III.6 Représentation des dimensions des composants du PEMFC.
Fig.III.7 Configurations étudiées de la section transversale du canal
Fig.III.8 Configurations étudiées de chemin d'écoulement dans les canaux.
Fig.III.9 Domaine de simulation pour les trois différentes sections transversales étudiées : (a) rectangulaire ; (b) trapézoïdale ; (c) triangulaire.
Fig.III.10 Algorithme de calcul.
Fig.III.11 Contrôle de l'indépendance du maillage.
Fig.III.12 Courbe de comparaison des polarisations du modèle numérique et des données expérimentales.
Fig.III.13 Etapes de l'algorithme utilisées pour la création de géométrie du maillage.
Fig.IV.1 Évolution de la densité de puissance selon le rapport largeur/hauteur de la section transversale du canal, densité du courant et tension de la cellule. (a) co-courant (b) contre-courant.
Fig.IV.2 Évolution de la densité de puissance par rapport à l'épaisseur de GDL, la densité de courant et la tension de la cellule. (a) co-courant ; (b) contre-courant.
Fig.IV.3 Évolution de la densité de puissance par rapport à l'épaisseur du CL, la densité de courant et la tension de la cellule. (a) co-courant ; (b) contre-courant.
Fig.IV.4 Évolution de la densité de puissance par rapport à l'épaisseur de la membrane, la densité de courant et la tension de la cellule. (a) co-courant; (b) contre-courant.
Fig.IV.5 Courbe de polarisation de PEMFC-SCG selon les meilleures et les pires dimensions.
Fig.IV.6 Comparaison entre les configurations de CSC simples. a) courbes I-P, b) densité de puissance maximale, c) chute de pression.
Fig.IV.7 Comparaison entre les configurations de CSC de base rectangulaire. a) courbes I-P, b) densité de puissance maximale, c) chute de pression.
Fig.IV.8 Comparaison entre les configurations de CSC de base trapézoïdale. a) courbes I-P, b) densité de puissance maximale, c) chute de pression.
Fig.IV.9 Comparaison entre les configurations CSC de base trapézoïdale inversée. a) courbes I-P, b) densité de puissance maximale, c) chute de pression.
Fig.IV.10 Comparaison entre les configurations de CSC à base elliptique. a) courbes I-P, b) densité de puissance maximale, c) chute de pression.
Fig.IV.11 Comparaison entre les configurations de CSC de base elliptique inversée. a) courbes I-P, b) densité de puissance maximale, c) chute de pression.
Fig.IV.12 Comparaison entre les différentes hauteurs de sortie de canal. a) courbes I-P, b) densité de puissance maximale, c) chute de pression.
Fig.IV.13 Comparaison entre les différents nombres de marches. a) courbes I-P, b) densité de puissance maximale, c) chute de pression.
Fig.IV.14 Comparaison entre les différents nombres d'escaliers du canal. a) courbes I-P, b) densité de puissance maximale, c) chute de pression.

- Fig.IV.15 Répartition de la vitesse le long des canaux tordus : (a) rectangulaire, (b) trapézoïdale, (c) triangulaire.
- Fig.IV.16 Répartition de la concentration d'hydrogène le long du trajet tordu : a) b) et c) dans toute la cellule, a1), b1) et c1) dans l'interface CL/GDL de la cathode.
- Fig.IV.17 Répartition de la concentration d'oxygène le long du trajet tordu : a) b) et c) dans toute la cellule, a1), b1) et c1) dans l'interface CL/GDL de la cathode.
- Fig.IV.18 Répartition des concentrations d'eau. (a) , (b) et (c) : dans toute la cellule (a1), (b1) et (c1) : à l'interface CL/GDL de la cathode, (a2), (b2) et (c2) : dans les canaux.
- Fig.AI.1 Contours de la concentration molaire d'oxygène (a) meilleures dimensions, (b) pires dimensions, au niveau du catalyseur de la cathode et de l'interface de la membrane dans le plan ZX indiqué pour les PEMFC planaires à une tension de 0,45 V.
- Fig.AI.2 Contours de la concentration molaire de vapeur d'eau (a) meilleures dimensions, (b) pires dimensions, au niveau du catalyseur de la cathode et de l'interface de la membrane dans le plan ZX indiqué pour les PEMFC planaires à une tension de 0,45 V.
- Fig.AI.3 Contours de la pression totale, de la température et de la vitesse, (a) meilleures dimensions, (b) pires dimensions, au milieu de la cellule dans le plan ZY indiqué pour les PEMFC planaires à la tension de 0,45 V.
- Fig.AII.1 Champs de fraction massique de H₂ des géométries de la section transversale du canal simple. a) Trg, b) Trp, c) I-Trp, d) Hlp, e) I-Hlp, f) Rct.
- Fig.AII.2 Champs de concentration molaire O₂ des géométries de la section transversale du canal simple a) Trg, b) Trp, c) I-Trp, d) Hlp, e) I-Hlp, f) Rct.
- Fig.AII.3 Champs de concentration molaire H₂O des géométries de la section transversale du canal simple.a) Trg, b) Trp, c) I-Trp, d) Hlp, e) I-Hlp, f) Rct.
- Fig.AII.4 Champs de pression totaux des géométries de la section transversale du canal simple. a) Trg, b) Trp, c) I-Trp, d) Hlp, e) I-Hlp, f) Rct.
- Fig.AII.5 Champs de vitesse des géométries de la section transversale du canal simple. a) Trg, b) Trp, c) I-Trp, d) Hlp, e) I-Hlp, f) Rct.
- Fig.AII.6 Champ de température total des géométries de la section transversale du canal simple. a) Trg, b) Trp, c) I-Trp, d) Hlp, e) I-Hlp, f) Rct.
- Fig.AII.7 Champs de fraction de masse H₂ pour les géométries CCS de base rectangulaires. a) Rct-Trg, b) Rct-Trp, c) Rct-I-Trp, d) Rct-Hlp, e) Rct-I-Hlp.
- Fig.AII.8 Champs de concentration molaire O₂ pour les géométries CCS à base rectangulaire. a) Rct-Trg, b) Rct-Trp, c) Rct-I-Trp, d) Rct-Hlp, e) Rct-I-Hlp.
- Fig.AII.9 Champs de concentration molaire H₂O pour les géométries CCS à base rectangulaire.a) Rct-Trg, b) Rct-Trp, c) Rct-I-Trp, d) Rct-Hlp, e) Rct-I-Hlp.
- Fig.AII.10 Champs de pression totaux pour les géométries CCS à base rectangulaire. a) Rct-Trg, b) Rct-Trp, c) Rct-I-Trp, d) Rct-Hlp, e) Rct-I-Hlp.
- Fig.AII.11 Champs de vitesse pour les géométries CCS de base rectangulaires. a) Rct-Trg, b) Rct-Trp, c) Rct-I-Trp, d) Rct-Hlp, e) Rct-I-Hlp.
- Fig.AII.12 Champs de température totale pour les géométries CCS de base rectangulaires. a) Rct-Trg, b) Rct-Trp, c) Rct-I-Trp, d) Rct-Hlp, e) Rct-I-Hlp.
- Fig.AII.13 Champs de fraction de masse H₂ pour les géométries CCS à base trapézoïdale. a) Trp-Rct, b) Trp-I-Trp, c) Trp-Hlp, d) Trp-I-Hlp.
- Fig.AII.14 Champs de concentration molaire O₂ pour les géométries CCS à base trapézoïdale. a) Trp-Rct, b) Trp-I-Trp, c) Trp-Hlp, d) Trp-I-Hlp.
- Fig.AII.15 Champs de concentration molaire H₂O pour les géométries CCS à base trapézoïdale. a) Trp-Rct, b) Trp-I-Trp, c) Trp-Hlp, d) Trp-I-Hlp.
- Fig.AII.16 Champs de pression totaux pour les géométries CCS à base trapézoïdale. a) Trp-Rct, b) Trp-I-Trp, c) Trp-Hlp, d) Trp-I-Hlp.
- Fig.AII.17 Champs de vitesse pour les géométries CCS à base trapézoïdale. a) Trp-Rct, b) Trp-I-Trp, c) Trp-Hlp, d) Trp-I-Hlp.
- Fig.AII.18 Champs de température totale pour les géométries CCS à base trapézoïdale. a) Trp-Rct,

- b) Trp-I-Trp, c) Trp-Hlp, d) Trp-I-Hlp.
- Fig.AII.19 Champs de fraction de masse H₂ pour les géométries CCS à base trapézoïdale inversée. a) I-Trp-Trg, b) I-Trp-Trp, c) I-Trp-Rct, d) I-Trp-Hlp, e) I-Trp-I-Hlp.
- Fig.AII.20 Champs de concentration molaire O₂ pour les géométries CCS à base trapézoïdale inversée. a) I-Trp-Trg, b) I-Trp-Trp, c) I-Trp-Rct, d) I-Trp-Hlp, e) I-Trp-I-Hlp.
- Fig.AII.21 Champs de concentration molaire H₂O pour les géométries CCS à base trapézoïdale inversée. a) I-Trp-Trg, b) I-Trp-Trp, c) I-Trp-Rct, d) I-Trp-Hlp, e) I-Trp-I-Hlp.
- Fig.AII.22 Champs de pression totaux pour les géométries CCS à base trapézoïdale inversée. a) I-Trp-Trg, b) I-Trp-Trp, c) I-Trp-Rct, d) I-Trp-Hlp, e) I-Trp-I-Hlp.
- Fig.AII.23 Champs de vitesse pour les géométries CCS à base trapézoïdale inversée. a) I-Trp-Trg, b) I-Trp-Trp, c) I-Trp-Rct, d) I-Trp-Hlp, e) I-Trp-I-Hlp.
- Fig.AII.24 Champs de température totale pour les géométries CCS à base trapézoïdale inversée. a) I-Trp-Trg, b) I-Trp-Trp, c) I-Trp-Rct, d) I-Trp-Hlp, e) I-Trp-I-Hlp.
- Fig.AII.25 Champs de fraction de masse H₂ pour les géométries CCS de base elliptiques. a) Hlp-Trg, b) Hlp-Trp, c) Hlp-Rct, d) Hlp-I-Trp, e) Hlp-I-Hlp.
- Fig.AII.26 Champs de concentration molaire O₂ pour les géométries CCS de base elliptiques. a) Hlp-Trg, b) Hlp-Trp, c) Hlp-Rct, d) Hlp-I-Trp, e) Hlp-I-Hlp.
- Fig.AII.27 Champs de concentration molaire H₂O pour les géométries CCS de base elliptiques. a) Hlp-Trg, b) Hlp-Trp, c) Hlp-Rct, d) Hlp-I-Trp, e) Hlp-I-Hlp.
- Fig.AII.28 Champs de pression totaux pour les géométries CCS de base elliptiques. a) Hlp-Trg, b) Hlp-Trp, c) Hlp-Rct, d) Hlp-I-Trp, e) Hlp-I-Hlp.
- Fig.AII.29 Champs de vitesse pour les géométries CCS de base elliptiques. a) Hlp-Trg, b) Hlp-Trp, c) Hlp-Rct, d) Hlp-I-Trp, e) Hlp-I-Hlp.
- Fig.AII.30 Champs de température totale pour les géométries CCS de base elliptiques. a) Hlp-Trg, b) Hlp-Trp, c) Hlp-Rct, d) Hlp-I-Trp, e) Hlp-I-Hlp.
- Fig.AII.31 Champs de fraction de masse H₂ pour les géométries CCS à base elliptique inversée. a) I-Hlp-Trg, b) I-Hlp-Trp, c) I-Hlp-Rct, d) IHlp-I-Hlp, e) I-Hlp-I-Trp.
- Fig.AII.32 Champs de concentration molaire O₂ pour les géométries CCS à base elliptique inversée. a) I-Hlp-Trg, b) I-Hlp-Trp, c) I-Hlp-Rct, d) IHlp-I-Hlp, e) I-Hlp-I-Trp.
- Fig.AII.33 Champs de concentration molaire H₂O pour les géométries CCS à base elliptique inversée. a) I-Hlp-Trg, b) I-Hlp-Trp, c) I-Hlp-Rct, d) IHlp-I-Hlp, e) I-Hlp-I-Trp.
- Fig.AII.34 Champs de pression totaux pour les géométries CCS à base elliptique inversée. a) I-Hlp-Trg, b) I-Hlp-Trp, c) I-Hlp-Rct, d) IHlp-I-Hlp, e) I-Hlp-I-Trp.
- Fig.AII.35 Champs de vitesse pour les géométries CCS à base elliptique inversée. a) I-Hlp-Trg, b) I-Hlp-Trp, c) I-Hlp-Rct, d) IHlp-I-Hlp, e) I-Hlp-I-Trp.
- Fig.AII.36 Champs de température totale pour les géométries CCS à base elliptique inversée. a) I-Hlp-Trg, b) I-Hlp-Trp, c) I-Hlp-Rct, d) IHlp-I-Hlp, e) I-Hlp-I-Trp.
- Fig.AIII.1 Contours de la concentration molaire d'oxygène. a) différentes hauteurs de sortie de canal, b) différents nombres de marche, c) model basique, au niveau du catalyseur de la cathode et de l'interface de la membrane dans le plan ZX indiqué pour les PEMFC planaires.
- Fig.AIII.2 Contours de la concentration molaire d'eau. a) différentes hauteurs de sortie de canal, b) différents nombres de marche, c) model basique, au niveau du catalyseur de la cathode et de l'interface de la membrane dans le plan ZX indiqué pour les PEMFC planaires.
- Fig.AIII.3 Contours de la vitesse. a) différentes hauteurs de sortie de canal, b) différents nombres de marche, c) model basique, au milieu de la cellule dans le plan ZY indiqué pour les PEMFC planaires.
- Fig.AIII.4 Contours de la température totale. a) différentes hauteurs de sortie de canal, b) différents nombres de marche, c) model basique, au milieu de la cellule dans le plan ZY indiqué pour les PEMFC planaires.

Liste des tableaux

Tableau I.1	Caractéristique de chaque type de piles à combustible.
Tableau III.1	Détails des paramètres géométriques.
Tableau III.2	Paramètres électrochimiques utilisés dans les simulations [133].
Tableau III.3	Méthodologie de la proposition de forme du CSC.
Tableau III.4	Propriétés des matériaux et conditions limites utilisées dans les simulations [46].
Tableau III.5	Détails des paramètres géométriques.
Tableau III.6	Propriétés des matériaux, dimensions de PEMFC et conditions limites utilisées dans les simulations [50].
Tableau III.7	Dimensions de la section transversale du canal.
Tableau III.8	Propriétés électrochimiques [75].
Tableau IV.1	Influence de chaque dimension sur la vitesse d'entrée, la chute de pression, la puissance de pompage et la puissance nette de sortie de la PEMFC.
Tableau IV.2	Meilleures et pires dimensions.

Introduction générale

Pendant de nombreuses années, les chercheurs se sont concentrés sur la recherche de nouvelles sources d'énergie en tenant compte de la préoccupation mondiale concernant l'épuisement des combustibles fossiles et les effets croissants de pollution. Grâce à l'utilisation durable de l'hydrogène, les piles à combustible sont en train de devenir une source d'énergie plus prometteuse.

Les piles à combustible ont le potentiel de remplacer les moteurs à combustion interne dans les véhicules et les générateurs de puissance dans les applications de puissance stationnaires, transports et portables. Par conséquent, en tant que moteurs économes, respectueux de l'environnement et flexibles en carburant, les piles à combustible ont de nombreux créneaux potentiels sur le marché, tels que secours indépendant d'énergie électrique et élément principal dans le système de stockage ainsi que leurs cogénérations d'énergie électrique et thermique.

Il existe plusieurs types de piles à combustible, elles peuvent être classées selon la nature de l'électrolyte qu'elles utilisent : comme la pile à combustible alcaline (AFC), la pile à combustible directe au méthanol (DMFC), la pile à combustible à oxyde solide (SOFC), la pile à combustible à éthanol direct (DEFC), la pile à combustible à carbonate fondu (MCFC), la pile à combustible à acide phosphorique (PAFC) et la pile à combustible à membrane échangeuse de protons (PEMFC). Chaque type de pile à combustible nécessite des matériaux et des combustibles particuliers et présente à la fois des avantages et des inconvénients pour des applications spécifiques. Malgré leurs nombreux types existants, tous types de piles à combustible se composent d'une anode, d'une cathode et d'un électrolyte qui permet aux charges de se déplacer entre les deux électrodes. Pour l'industrie automobile, la PEMFC a été largement adoptée en raison de sa densité énergétique élevée, de ses basses températures de fonctionnement, de son démarrage rapide ainsi que ses émissions nulles.

Le rendement du PEMFC dépend de plusieurs facteurs, comme les matériaux des composants (membrane, catalyseurs, électrodes, etc...), les conditions d'exploitation (température, pression etc...) et les configurations géométriques (assemblage de la MEA, conception des canaux, épaisseur de la membrane etc...). Cependant, la conception des canaux d'écoulement dans la plaque bipolaire est l'un des facteurs importants qui permet une amélioration des performances dans le PEMFC et logiquement la réduction de coûts de production de ces piles. Dans ce contexte, de nombreuses recherches ont été entamées sur la configuration géométrique des canaux qui a un effet sur le rendement du PEMFC.

Des conceptions, des designs et des constructions novatrices des canaux d'écoulement ont été proposés, étudiés, testés et réalisés pour réduire le coût de fabrication et améliorer la densité

de puissance générée par la PEMFC. Par exemple, la spirale, radiale, bio-inspirée comme des designs des canaux ainsi que la conception tubulaire comme conception pour remplacer la conception conventionnelle et améliorer la performance.

Cette thèse de doctorat présente une continuité des travaux scientifiques de simulation concernant les piles à combustible abordés par les membres du Laboratoire d'Études des Systèmes énergétiques industriels (LESEI) du département de mécanique, de la Faculté de Technologie de l'Université Mostefa BEN BOULAID de Batna 2. Ces travaux comprennent plusieurs thèses de doctorat [1-5], plusieurs publications scientifiques [6-30], de nombreuses participations dans des conférences nationales et internationales, et autres contributions académiques tels que des mémoires de magistère, master et ingénieur.

La présente étude doctorale a pour objet d'étudier l'effet de la configuration géométrique, y compris les dimensions des microcanaux, les sections transversales de ces derniers et les formes de chemin d'écoulement sur la performance de la PEMFC planaire grâce à des modèles CFD tridimensionnels monophasiques et multiphasiques. En outre, un programme informatique en langage FORTRAN a été développé localement en collaboration avec l'un des membres de l'équipe du laboratoire LESEI, le Docteur Monsef TAMERABET, est utilisé pour examiner l'effet de l'utilisation de différentes formes de la coupe transversale des microcanaux sur la distribution des vitesses, consommations des réactives et la production d'eau, ainsi pour évaluer la performance de la PEMFC tubulaire.

La présente thèse est organisée selon quatre principaux chapitres ; dans le premier chapitre, un bref historique sur les piles à combustible, un aperçu des différents types, y compris le type de pile PEMFC où on s'est intéressé au type de fonctionnement et la structure.

Le second chapitre présente une étude bibliographique concernant l'optimisation des dimensions du canal, y compris la longueur, la largeur et la profondeur, ainsi que l'utilisation de différentes formes de la section transversale du canal. La forme du chemin d'écoulement et les formes globales de la PEMFC figurent aussi.

Tandis que le troisième chapitre se fonde en premier lieu sur la présentation détaillée des modèles tridimensionnels monophasiques et diphasiques utilisés pour la configuration de la PEMFC planaire. Ces modèles portent sur l'électrochimie, le transport des espèces et le transfert de chaleur. Les procédures numériques utilisées pour résoudre les équations régissant ces phénomènes impliqués dans leur fonctionnement sont également présentées. En deuxième lieu, la modélisation mathématique utilisée est présentée. Le système d'équations obtenu régissant les phénomènes physiques introduits dans le fonctionnement de la PEMFC tubulaire

a été résolu par un programme informatique en FORTRAN. La géométrie du domaine de calcul et la création du maillage ont été faites.

Dans le dernier chapitre, les résultats de la simulation qui sont attribués à la performance de la cellule à l'aide des modèles monophasique et diphasique sont présentés et discutés. Pour la PEMFC planaire, les effets du rapport hauteur/largeur du canal ainsi que les dimensions des composants des cellules sont présentées et discutées en termes de courbes de polarisation, de chute de pression et de consommations des réactifs. L'impact du design de la section transversale des microcanaux et l'effet de la forme du chemin d'écoulement ont été présentés et discutés.

Pour la configuration tubulaire, les profils de vitesse, les concentrations d'oxygène, d'hydrogène et d'eau ainsi que les courbes de polarisation sont figurées et discutées selon trois différentes formes de la section transversale des microcanaux. Enfin, le manuscrit se termine par une conclusion générale.

Chapitre I

Généralités et état de l'art sur les piles à combustible type PEMFC

Introduction

Les piles à combustible sont des convertisseurs d'énergie, et non des générateurs ou des sources d'énergie. Une pile à combustible convertit directement l'énergie chimique de la réaction d'un carburant (hydrogène, méthanol etc...) et d'un oxydant (habituellement oxygène ou air) en énergie électrique par une réaction d'oxydoréduction. Cette réaction consiste en l'oxydation d'un combustible d'une part (à l'anode) et en la réduction d'un comburant d'autre part (à la cathode) [31-33]. Ces deux réactions sont favorisées par un catalyseur, en général du platine. Les deux réactifs sont séparés par un électrolyte à travers lequel les ions produits par la réaction circulent. Lorsque l'hydrogène est utilisé comme carburant, elle génère uniquement de l'énergie électrique et de l'eau pure (un moteur à émission nulle).

Les piles à combustible diffèrent aux batteries dans le sens où elles ne contiennent pas tous les réactifs nécessaires initialement stockés. Lorsque l'électricité est nécessaire, le carburant et l'oxydant sont alimentés en continu dans la cellule et les produits de réaction sont également enlevés en continu simultanément [34].

I.1 Histoire des Piles à Combustible

Le concept de la pile à combustible était démontré au début du XIXe siècle par Humphry Davy. Lorsqu'en 1802 Sir Henry David énonce le principe de l'électrolyse inverse, il met en évidence la possibilité de produire de l'électricité et de la chaleur à partir de la réaction chimique entre l'oxygène et l'hydrogène.

En 1839 la cellule à combustible a été généralement inventée par Sir William Robert Grove et Christian Friedrich grâce à leur découverte d'un procédé d'électrolyse inversée. Grove a développé la première cellule qui est composée de deux électrodes en platine en verre immergées dans un électrolyte à l'acide sulfurique dilué, la fig.I.1 montre un schéma de la pile à combustible Grove [35-37].

Les électrodes l'anode et la cathode (tube en verre) ont été alimentées en réactifs à l'hydrogène et à l'oxygène. Elles ont été connectées à un circuit électrique externe pour la production d'électricité.

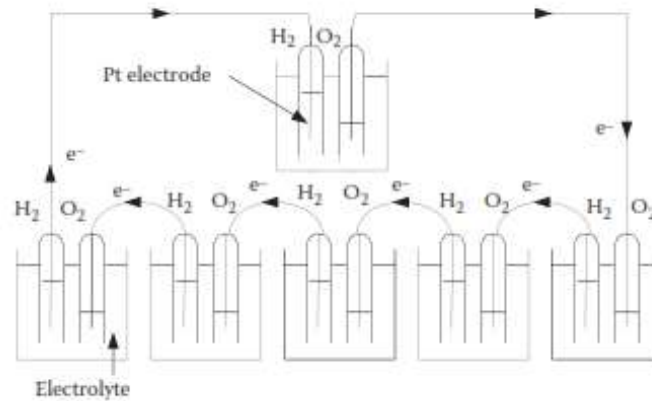


Fig.I.1 Batterie de gaz voltaïque construite par Sir William Grove [36].

Le terme pile à combustible a été utilisé pour la première fois en 1889 par Charles Langer et Ludwig Mond, qui ont étudiés des piles à combustible utilisant du gaz au charbon comme carburant. En 1932 Francis Bacon, a modifié l'équipement de Mond et Langer pour développer le premier AFC, mais ce n'est qu'en 1959 que Bacon a démontré un système pratique de 5 kW de piles à combustible. Au même moment, Harry Karlhrig a installé une cellule Bacon modifiée de 15 kW sur un tracteur agricole Allis-Chalmers. En partenariat avec l'armée de l'air des États-Unis, Allis-Chalmers développé quelques véhicules à piles à combustible, y compris un chariot élévateur, un chariot de golf et un navire submersible [35]. À la fin des années 1950 et au début des années 1960, la NASA a commencé de développer des générateurs de piles à combustible pour les missions spatiales habitées. La première unité PEMFC a été un résultat, avec Willard Thomas Grubb chez General Electric (GE) crédité de l'invention.

Un autre chercheur de GE, Leonard Niedrach, a raffiné le PEMFC de Grubb en utilisant du platine comme catalyseur sur les membranes. La pile à combustible de Grubb-Niedrach a été développée en coopération avec la NASA et a été utilisée dans le programme spatial Gemini du milieu des années 1960.

International Fuel Cells (IFC, plus tard Power UTC) a développé un AFC (Piles à combustible alcalines) de 1,5 kW pour une utilisation dans les missions spatiales d'Apollo. L'IFC a ensuite développé un AFC de 12 kW, utilisé pour fournir une puissance à bord sur tous les vols de navettes spatiales. En raison de leur coût élevé, les systèmes de piles à combustible étaient limités aux missions spatiales et à d'autres applications spéciales.

En 2007 les piles à combustible ont commencé à être commercialisées dans diverses applications. Au cours de la dernière décennie, PEMFC et DMFC ont dominé la part de marché totale dans les secteurs portables, stationnaires et de transport. Leur adoption par les

consommateurs a été facilitée par l'élaboration de codes, de normes et de politiques gouvernementales visant à réduire les obstacles à l'adoption ; tel que permettre aux cartouches de carburant au méthanol à bord des avions et des tarifs d'alimentation pour les installations de cogénération de piles à combustible [33].



Fig.I.2 Historique de la PEMFC.

I.2 Histoire de l'électrolyse inverse

En 1880, Alessandro Volta a rendu compte de la conversion de l'énergie chimique électrique vers la Royal Society à Londres. Il a montré qu'en plaçant une membrane trempée dans la saumure en contact avec des plaques d'argent et de zinc, de chaque côté, un courant électrique circulerait dans le circuit externe reliant les plaques d'argent et de zinc. Volta est crédité de la construction de la première cellule électrochimique, composée de deux électrodes : une en zinc, l'autre en cuivre et l'électrolyte en acide sulfurique ou un mélange de sel et d'eau. Suite à cela, la même année, William Nicholson et Johann Wilhelm Ritter ont réussi à décomposer l'eau en hydrogène et oxygène par électrolyse (électricité aux produits chimiques) [31]. D'autres travaux sur l'électrolyse de Sir Humphry Davy ont permis de conclure que la production d'électricité dans des cellules électrolytiques simples résultait d'une action chimique et que la combinaison chimique se produisait entre des substances de charge inverse. En 1832, Michael Faraday a réalisé des expériences pionnières qui l'ont amené à exposer ses deux lois sur l'électrochimie.

William Grove a produit la première pile à combustible en 1839, où il a démontré que lorsque l'hydrogène et l'oxygène ont été alimentés à deux électrodes de platine séparées par électrolyte dans des cellules individuelles et connectées en série en externe, un courant électrique a été généré.

En 1884, Svante Arrhenius, à travers ses recherches sur la conductivité galvanique des électrolytes, a conclu que les électrolytes, dissous dans l'eau, se divisaient ou se dissociaient en des ions positifs et négatifs électriquement opposés à divers degrés. Walther Hermann Nernst a développé la théorie de la force électromotrice de la cellule voltaïque en 1888 et a montré comment les caractéristiques du courant produit pourraient être utilisées pour calculer le libre changement d'énergie dans la réaction chimique produisant le courant. Son équation, connue sous le nom d'équation de Nernst, a rapporté la tension d'une cellule à ses propriétés [31].

I.3 Classification et types de piles à combustible

Un certain nombre de différentes piles à combustible ont été développées et sont largement utilisées. Elles sont généralement classées ou caractérisées principalement par le type d'électrolyte utilisé, le type d'ions transféré et la plage de température applicable (fig. I.3). Le tableau.I.1 montre une liste des piles à combustible les plus utilisées avec le type

d'électrolyse utilisé, les ions migrateurs, les variations de température de fonctionnement et le type de carburant utilisé.

Tableau I.1 Caractéristique de chaque type de piles à combustible.

Type de pile	Charge transporteuse	Type d'électrolyte	Température de fonctionnement (°C)	Combustible et oxydant
AFC	OH^+	Hydroxyde de potassium ou solution de sodium	$\approx 60-120$	H_2, O_2
PAFC	H^+	Acide phosphorique	≈ 220	H_2 pure
MCFC	CO_3^{-2}	Carbonate de lithium ou de potassium	$\approx 600-700$	$\text{H}_2, \text{CO}, \text{CH}_4$, et d'autres hydrocarbures
PEMFC	H^+	Polymère solide (Nafion)	≈ 80	H_2 pure
SOFC	O^{-2}	Électrolyte à l'oxyde solide (zircone stabilisée par l'itry)	$\approx 700-1000$	$\text{H}_2, \text{CO}, \text{CH}_4$, et d'autres hydrocarbures
DMFC	H^+	Polymère solide	≈ 80	Méthanol

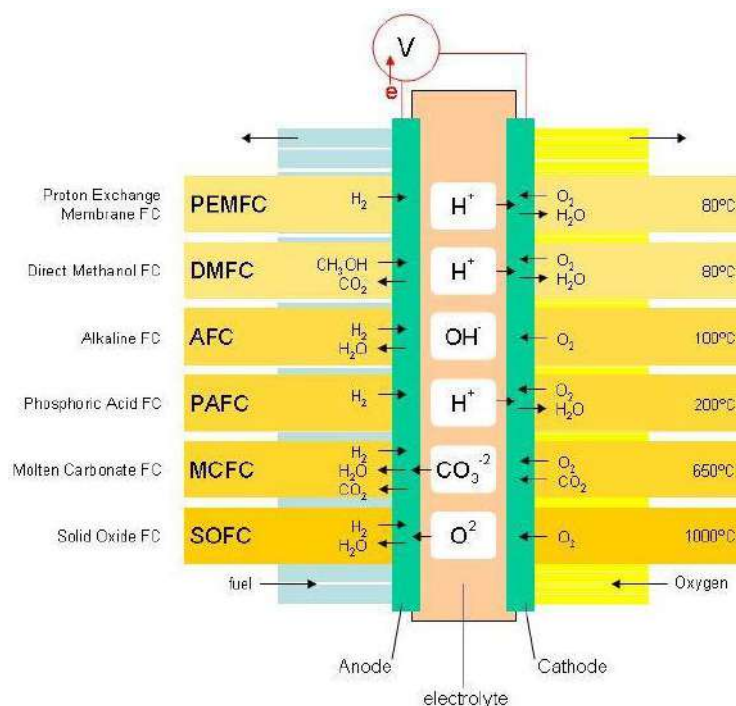


Fig.I.3 Schéma des différentes piles à combustible.

I.3.1 Pile à combustible alcaline

Les Piles à combustible Alcaline AFC utilisent soit une solution d'hydroxyde de potassium (KOH), soit de l'hydroxyde de sodium (NaOH) comme électrolyte et fonctionnent

sur une plage de température de 60 °C-120 °C. L'efficacité opérationnelle des AFC est assez élevée, dans la gamme de 60 % à 70 %. Cependant, ces piles à combustible sont actuellement limitées à l'utilisation d'hydrogène et d'oxygène purs uniquement en raison de l'incompatibilité de l'électrolyte alcalin avec d'autres carburants et de l'air contenant du dioxyde de carbone [31].

I.3.2 Pile à combustible à l'acide phosphorique

Un PAFC utilise de l'acide phosphorique (H_3PO_4) comme solution liquide d'électrolyte et un ion hydrogène (H^+) ou un proton comme ion migrant à travers celui-ci. Le gaz hydrogène ionise à l'anode, libérant des électrons (e^-) et des protons (H^+). À la cathode, l'oxygène réagit avec les électrons de retour (e^-) de l'électrode et des protons (H^+) de l'électrolyte pour former de l'eau. Les PAFC sont désignés sous le nom de piles à combustible à température intermédiaire avec une température de fonctionnement d'environ 200 °C. L'efficacité typique est de 55 %, ce qui est relativement faible par rapport aux autres types de piles à combustible, à l'exception de la pile à combustible directe au méthanol (DMFC). Les PAFC sont développés principalement pour la génération d'énergie à moyen terme avec une puissance de fonctionnement de l'unité jusqu'à 200 Kw [31].

I.3.3 Pile à combustible à carbonate fondu

MCFC est une pile à combustible à température plus élevée qui fonctionne à une plage comprise entre 600 °C et 700 °C avec une efficacité opérationnelle élevée de 65 %. L'électrolyte dans un MCFC est un carbonate alcalin fondu tel que le carbonate de lithium ou de potassium retenu dans une matrice céramique d'oxyde de lithium et d'aluminium. L'hydrogène subit une réduction de l'oxydation en combinant avec des ions carbonate entrants (CO_3), en libérant des électrons vers le circuit externe et en produisant de l'eau et du dioxyde de carbone. À la cathode, l'oxygène subit une réaction de réduction en combinant avec du dioxyde de carbone et des électrons entrants du circuit externe et en libérant des ions carbonate [31].

On peut remarquer que si le dioxyde de carbone est produit du côté de l'anode, il est également consommé au côté de la cathode. Du côté de la cathode, le flux d'oxygène d'entrée ou de gaz d'air comprend un mélange avec du dioxyde de carbone, qui peut être fourni soit en récupérant du dioxyde de carbone du flux de gaz d'échappement des anodes, soit en le recyclant vers le côté de la cathode ou en séchant simplement et en mélangeant l'échappement d'anode avec le flux de gaz d'entrée de cathode.

Les MCFC peuvent fonctionner non seulement avec de l'hydrogène, mais aussi avec d'autres types de carburant, y compris le gaz naturel, le biogaz et le gaz de charbon propre en produisant de l'hydrogène par un processus de reformage.

I.3.4 Pile à combustible à oxyde solide

La SOFC est une pile à combustible à température plus élevée qui fonctionne à un intervalle compris entre 800 °C et 1000 °C avec un rendement de fonctionnement élevé de 65 %. L'électrolyte dans un SOFC est un matériau solide à base de céramique comme le zirconium stabilisé à l'yttrium (YSZ). Il peut fonctionner avec du carburant à l'hydrogène ainsi qu'avec d'autres types de carburant tels que le gaz naturel, le biogaz et le gaz de charbon. Les composants de base et la réaction globale sont similaires dans une SOFC à l'exception des réactions électrochimiques aux électrodes anodiques et cathodiques. À l'électrode cathodique, l'oxygène reprend les électrons et forme un ion oxygéné à charge négative. L'ion oxygène transporte à travers l'électrolyte à membrane ionique à oxyde solide vers l'anode où il se combine avec l'eau produisant du gaz hydrogène et des électrons qui se déplacent vers le côté de la cathode à travers le circuit électrique externe. Les SOFC peuvent également fonctionner avec un certain nombre d'autres combustibles hydrocarbonés, y compris le gaz naturel et le gaz de charbon propre en produisant de l'hydrogène par un processus de reformage interne ou externe [31].

I.3.5 Pile à combustible à méthanol direct

DMFC tire son nom de l'utilisation du méthanol comme carburant au lieu d'hydrogène. Il est similaire à la conception et aux structures du PEMFC, qui comprend une membrane d'électrolyte polymère solide conductrice de protons avec deux électrodes revêtues de catalyseur. L'intervention de base implique l'apport d'un mélange de méthanol et d'eau au niveau de l'anode. Du côté de l'anode, l'hydrogène est séparé du mélange et transformé en protons (H^+) et électrons (e^-) avec la présence d'un catalyseur. L'oxygène et le carbone réagissent également pour former du dioxyde de carbone (CO_2) à l'anode. Les électrons traversent les électrodes et le circuit de puissance externe vers la cathode. Les ions de protons transportent à travers la membrane d'électrolyte et se combinent avec l'oxygène et les électrons de retour pour former de l'eau à la cathode.

Étant donné que le méthanol existe comme un liquide dans la variation de température de -97 °C à 64 °C à la pression atmosphérique, il peut être stocké, transporté et peut être utilisé sous forme liquide similaire à d'autres combustibles liquides comme l'essence et le diesel, ce

qui DMFC compact et adapté aux applications portables telles qu'un substitut de batterie dans les ordinateurs portables. Un inconvénient majeur de la DMFC est sa faible efficacité par rapport aux autres types de piles à combustible. Des défis supplémentaires pour la conception de DMFC incluent la corrosivité et la nature toxique du combustible au méthanol [35].

I.3.6 Pile à combustible à membrane échangeuse de protons

La technologie PEMFC se différencie des autres technologies de piles à combustible en ce sens qu'une membrane polymère en phase solide est utilisée comme séparateur/électrolyte cellulaire. Parce que le séparateur cellulaire est un film polymère et que la cellule fonctionne à des températures relativement basses. Des problèmes tels que l'étanchéité, l'assemblage et la manipulation sont moins complexes que la plupart des autres piles à combustible.

Les PEMFC sont actuellement les types de piles les plus étudiés en raison de leur application potentielle dans les transports. En effet l'électrolyte est solide et la température de fonctionnement est relativement basse (entre 60 et 90 °C). De plus le démarrage est rapide et la dynamique sur le plan électrique est élevée. Par contre, elles présentant des inconvénients liés au faible niveau de température. Les résultats des tests ont démontré que les PEMFC sont capables de densités de courant élevées supérieures à 2 kW/l et 2 W/cm² [35].

Les PEMFC sont les dispositifs les plus répandus dans les applications mobiles de type transport, notamment grâce à leur densité de courant élevée, leur bon rendement, leur durée de vie accrue, leur temps de démarrage rapide (dû à leur basse température de fonctionnement), leur coût raisonnable et leur fabrication relativement aisée [36].

Cette technologie retient l'attention pour :

- Sa température de fonctionnement, relativement basse (de l'ambiante à 100 °C), laisse envisager une technologie simplifiée pour assurer un démarrage rapide et une évacuation aisée de la chaleur produite à température ambiante.
- Elle est insensible à la présence de CO₂ dans l'air contrairement à la filière alcaline.
- Elle est de technologie toute solide et peut donc prétendre à la fois à des durées de vie sensiblement supérieures aux filières à électrolyte liquide avec : une forte densité de puissance, moins de corrosion, sans aucun problème d'aménagement d'électrolyte.
- Ainsi qu'à une industrialisation plus simple de la filière.
- Du point de vue environnement, la PEMFC alimentée en hydrogène (écologique) émet zéro polluant et donc, elle peut prétendre à être plus écologique des piles à combustible.

I.4 Domaine d'application des piles à combustible

Les caractéristiques et les systèmes de production d'énergie dans les piles à combustible sont pris en compte pour une large gamme d'application, y compris le transport, la production d'électricité stationnaire, la génération d'énergies portables et d'autres applications spatiales et militaires

I.4.1 Applications dans le domaine du transport

Les piles à combustible sont l'un des concurrents les plus forts pour remplacer les moteurs à combustion interne en raison de leur efficacité accrue, de leur économie de carburant améliorée et de leur dépendance réduite contre les combustibles conventionnels et des émissions de pollution plus faibles.

En particulier, les PEMFC ont été considérés comme remplaçant les moteurs à combustion interne des véhicules, car elles sont compactes, légères et fonctionnent à basse température. Cette opération à basse température les rend adaptées à un démarrage et à un arrêt rapide et les rend plus sensibles à la variation de charge pendant le fonctionnement du véhicule. Les véhicules à piles à combustible ont été considérés par de nombreux constructeurs automobiles majeurs dans le monde. Les obstacles principaux au développement d'un véhicule électrique à piles à combustible sont les développements d'infrastructure pour les stations de transport, de stockage et de ravitaillement en hydrogène et le stockage à bord d'hydrogène avec une capacité suffisante pour une distance de conduite moyenne.

Différents types de piles à combustible sont pris en compte pour les grands systèmes de production de véhicules et de locomotives. Cela comprend les piles à combustible à haute température telles que les SOFC et les MCFC et les piles à combustible à basse température telles que les AFC et les PEMFC.

I.4.2 Applications stationnaires

Les applications stationnaires incluent la production d'énergie centrale à grande échelle (1 MW et plus), la puissance commerciale et industrielle de milieu de gamme (10-1000 kW) et la puissance résidentielle à petite échelle (5-10 kW) utilisés en cas de panne de courant dans les entreprises, les hôpitaux, les centers des données, etc.

Les piles à combustible sont envisagées pour une application résidentielle en utilisant la ligne d'alimentation en gaz naturel existante et en tant que système de cogénération pour répondre aux besoins de chauffage de l'espace et de chauffage de l'eau. Les utilisations des piles à

combustible pour les applications commerciales et industrielles de taille moyenne sont également prises en compte avec la cogénération de la chaleur et de l'énergie.

Les piles à combustible à haute température sont des prétendants primaires pour les systèmes de production d'énergie centrale à grande échelle, car ils conviennent à une plus large gamme de types de carburant. Il produit également des gaz d'échappement à haute température, ce qui le rend adapté à l'intégration avec d'autres systèmes thermiques pour la cogénération ou la gazéification et pour une meilleure gestion thermique du système global.

I.4.3 Applications portables

Les applications portables des piles à combustible comprennent des unités de puissance auxiliaires et des systèmes d'alimentation de secours, des outils électriques, des ordinateurs portables et d'autres appareils mobiles, y compris, des téléphones cellulaires.

Les demandes augmentent aussi avec les besoins accrus en énergie et en énergie pour l'informatique mobile à large bande.

Les besoins en énergie peuvent varier de quelques watts (<1 W) à quelques centaines de watts ou kilowatts (1-5 kW). Les piles à combustible portables sont souvent classées sur la base des besoins en énergie tels que les applications de moins de 2 W, les applications pour 10 à 50 W et les applications pour 100-250 W.

Certaines des exigences spécifiques à l'utilisateur pour les applications portables sont les suivantes : capacité d'activation et de décollage rapide, répondant à la variation dynamique des besoins énergétiques de l'appareil, compacte, légère et adaptée à l'exploitation sur une large gamme d'ambiance conditions de température et d'humidité.

En outre, les piles à combustible portables devraient fonctionner en toute sécurité, fournissant de l'énergie sans exposer les utilisateurs à des émissions dangereuses ou désagréables, à des températures élevées et à un faible niveau de bruit. Ainsi que DMFC et PEMFC sont considérés comme des applications portables.

I.5 Principe de fonctionnement et composants du PEMFC

I.5.1 Principe de fonctionnement de la pile à combustible PEMFC

Le cœur de pile constitue un assemblage membrane électrode (noté par la suite AME) puisqu'il est constitué de deux électrodes, anode et cathode, séparées par une membrane

polymère. Dans chacune des deux électrodes a lieu une demi-réaction électrochimique. Les électrodes sont alimentées en gaz réactifs via les plaques distributrices. Les protons migrent de l'anode à la cathode au travers de la membrane, tandis que les électrons sont transmis d'une électrode à l'autre via le circuit extérieur pour alimenter une charge électrique [37]

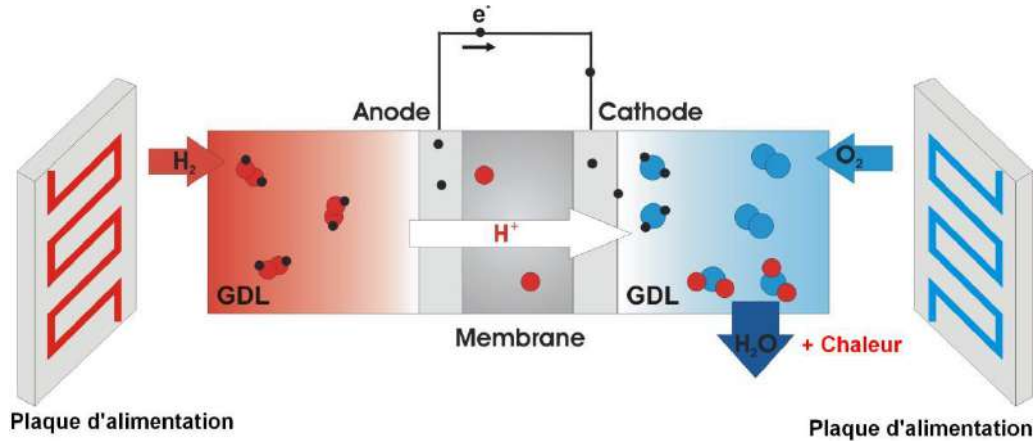


Fig.I.4 Schéma de principe d'une PEMFC.

À l'anode a lieu l'oxydation de l'hydrogène gazeux pour donner des protons et des électrons selon la réaction suivante :



À la cathode a lieu la réaction de réduction de l'oxygène gazeux selon la demi-réaction suivante :



La réaction globale s'accompagne d'une production d'eau, d'électricité et de chaleur :



Une cellule délivre donc une tension théorique d'environ 1.2 V [37]. Afin d'augmenter la tension de sortie, les constructeurs utilisent plusieurs cellules en série pour former un empilement. Le courant délivré dépend alors de la surface des mono-cellules. L'alimentation en gaz des cellules est réalisée en général en parallèle.

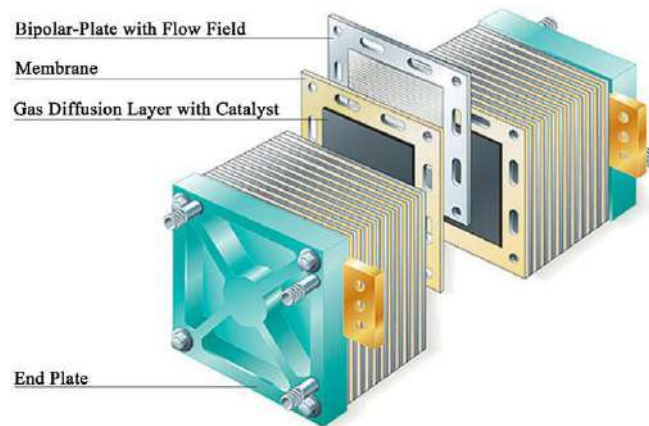


Fig.I.5 Schéma d'un empilement de PEMFC.

I.5.2 Composants de la pile à combustible PEMFC

Dans cette section, les différents composants d'un tel système vont être détaillés. La cellule de type PEMFC est constituée d'une membrane (l'électrolyte), de deux électrodes (catalyseurs), de deux couches de diffusion et deux plaques bipolaires. Au niveau de sa constitution, elle est symétrique comme il est possible de le voir sur le schéma de la figure.I.6 : d'un côté l'oxydation a lieu, à l'anode, de l'autre la réduction, à la cathode.

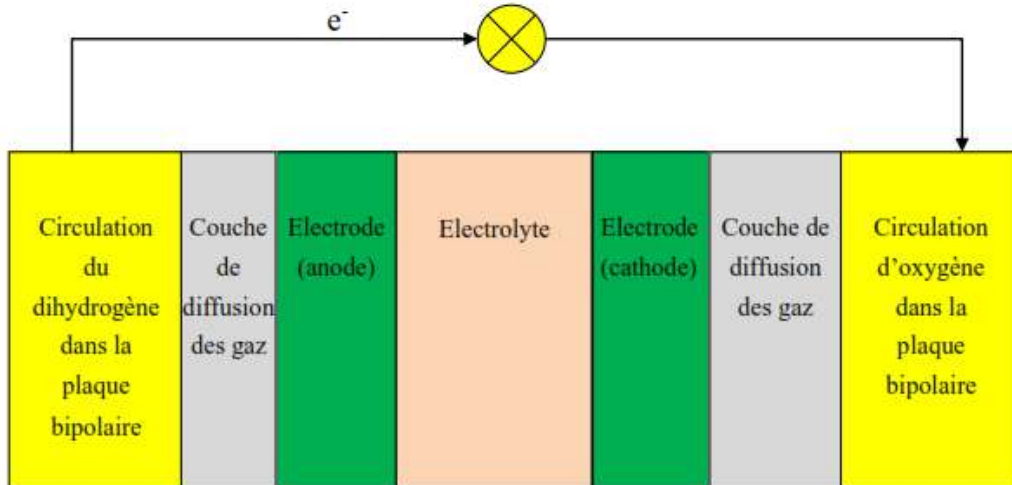


Fig.I.6 Schéma d'une pile à combustible.

I.5.2.1 Membrane (Electrolyte)

Pour les piles PEMFC, l'électrolyte est une membrane polymère ionique de type acide. En général, il s'agit généralement d'une membrane perfluorée sur laquelle sont greffés des groupements acides sulfonates SO_3^- ou $COOH$. Le produit de référence reste le Nafion® produit par Dupont de Nemours qui est un PSFA (perfluorosulfonic acid PTFE copolymer).

La conductivité dépend du degré d'hydratation de la membrane. Une valeur normale est de 20 molécules par site sulfoné.

La conductivité est de l'ordre de 0,1 S/cm, mais elle dépend beaucoup également de l'épaisseur qui résulte d'un compromis entre tenue mécanique et résistance électrique. L'épaisseur est en effet fortement conditionnée par la teneur en eau.

Les membranes fonctionnent à une température entre 60 et 90 °C et à des pressions entre 1 et 5 bars, mais elles ne supportent qu'un différentiel de pression de 0,3 à 0,5 bar.

La résistance mécanique est fonction également de la surface et de la manière de maintenir la plaque.

Les températures de fonctionnement des membranes Nafion sont limitées à 90 °C. En effet, pour des températures supérieures la membrane ne parvient plus à retenir l'eau et le transport des protons devient dès lors impossible. De plus, les contraintes mécaniques subites par la membrane à de telles températures peuvent engendrer des dégâts irréversibles comme l'apparition de fissures.

I.5.2.2 Électrodes (zones actives)

Les électrodes sont le siège des phénomènes d'oxydation et de réduction. Les phénomènes qui y interviennent sont donc de nature électrique, chimique, thermique, de transfert de masse.

Elles comprennent deux zones, une zone active, lieu de la réaction, qui assure la conduction électronique et ionique ; elle contient un catalyseur (Pt) et du téflon (hydrophobe) et une zone diffusionnelle qui assure le transport des gaz jusqu'à la zone active, l'évacuation de l'eau et la conduction électronique. Leur épaisseur varie de 5 à 50 µm.

Le principe de fonctionnement est le suivant. À l'anode, l'hydrogène diffuse à travers le matériau (zone de diffusion). Deux atomes d'hydrogène sont créés au contact du catalyseur.

Les protons H⁺ traversent la membrane de l'anode vers la cathode. À la cathode, le phénomène de réduction nécessite également la présence d'un catalyseur. Le phénomène est complexe [31-38].

I.5.2.3 Couches de diffusion des gaz

Entourant les électrodes, les couches de diffusion ou GDL (gaz diffusion layer) ont des rôles multiples de permettre la diffusion des gaz jusqu'aux électrodes, d'assurer le transfert des électrons vers les électrodes, de faciliter l'évacuation de l'eau et de la chaleur tout en assurant un maintien mécanique. Elles sont à la fois conductrices et poreuses. Elles sont

généralement constituées par un feutre en fibres de carbone. On y dépose une fine couche de poudre de carbone. Les couches de diffusion peuvent être livrées séparément de la membrane ou former un tout selon le fabricant. Ainsi 3M propose des ensembles à 7 couches avec les joints d'étanchéité, la membrane, les couches de diffusion et électrodes anode et cathode.

I.5.2.4 Plaques bipolaires

La plaque bipolaire est une barrière étanche qui sépare les cellules d'un empilement ; elle doit avoir une bonne conductivité électrique et thermique, inerte, chimiquement, dans ce milieu très acide et étanche. Les plaques bipolaires ont plusieurs fonctions :
Relient les cellules en série ; séparent les gaz des cellules adjacentes ; donc elles doivent être imperméables aux gaz ; fournissent l'appui structurel pour la pile ; donc elles doivent avoir une certaine rigidité, et doivent être légères ; servent au refroidissement de la pile ; donc elles doivent avoir une bonne conductivité thermique.

Chapitre II

Etude bibliographique

Introduction

Dans ce chapitre, on trouve des recherches bibliographiques concernant la modification des paramètres de configurations géométriques tels que la longueur, la largeur et la profondeur du canal ainsi que sa section transversale. La forme du circuit d'écoulement et les dimensions générales du PEMFC ont été établies de façon plus étendue. En termes d'objectivité, ce chapitre est divisé en quatre sous-sections :

La première sous-section est relative aux recherches qui visent à étudier les dimensions géométriques du PEMFC afin d'en améliorer la performance, la réduction des coûts et la durabilité.

Tandis que la deuxième concerne les conceptions de la forme des canaux en particulier les formes transversales des canaux dans la plaque bipolaire, dans lequel de nombreux chercheurs l'ont classées comme un aspect important de la réduction des coûts et l'amélioration des performances dans le PEMFC.

Les chercheurs aussi se sont concentrés sur le développement de plusieurs configurations de chemin d'écoulement en tenant compte de leurs natures (écoulements), de leurs propres avantages et inconvénients et ceci figurent dans la troisième sous-section.

Dans la dernière sous-section figure une revue de la littérature présentée par de nombreuses recherches, dans lesquelles sont globalement liés aux configurations innovantes, y compris les nouvelles formes de canaux, les conceptions tubulaires, les obstacles à l'intérieur du canal et les canaux transversaux modifiés du PEMFC.

II.1 Dimensionnement du PEMFC incluant les micro-canaux

Les paramètres géométriques ainsi que les dimensions et les conceptions du canal d'écoulement, la taille des nervures, les épaisseurs du MEA et du GDL etc.... constituent un point clé de la performance de PEMFC. Plusieurs études numériques et expérimentales ont été réalisées pour optimiser les dimensions des canaux [39-42].

Il est révélé qu'une plus petite largeur de canal augmente la puissance produite et les densités de courant. Contrairement, des dimensions plus larges sont meilleures à des faibles densités de courant en raison d'une influence importante sur le transport de masse (nervures) [43].

Chiu et al. [44] ont étudié les effets de la largeur, de la hauteur et du rapport d'aspect du canal sur la performance du PEMFC. Ils ont conclu que la densité de puissance inverse la proportionnalité de la largeur du canal, dans laquelle l'augmentation de la largeur du canal conduit à une faible quantité d'enlèvement d'eau due aux niveaux faibles de vitesse du gaz. Ils

révèlent que si la section transversale du canal est plus petite, le rendement du PEMFC est meilleur en raison des vitesses de gaz plus élevées. De plus, il est possible d'améliorer les performances du PEMFC en optimisant la forme et le rapport d'aspect de la section transversale du canal [45].

Mahmoudimehr et Daryadel [46] ont optimisés les dimensions de la section transversale du canal gazeux de la cathode (largeur et hauteur) du PEMFC en menant une étude numérique sur l'ensemble des parties de la pile. Les résultats de la simulation indiquent que : l'influence des dimensions transversales sur les performances du PEMFC est considérable, et cette influence substantielle ne se limite pas à un ensemble spécifique de conditions de fonctionnement. Les performances du PEMFC peuvent à la fois se détériorer et s'améliorer avec la largeur ou la hauteur du canal, cela dépend de ses conditions de fonctionnement ainsi que de ses dimensions initiales. Parmi tous les paramètres de fonctionnement, l'humidité relative des gaz d'entrée a le plus grand effet sur les dimensions optimales de la section transversale.

Manso et al., [47] ont fait l'objet d'une investigation numérique sur l'influence du rapport d'aspect de la section transversale du canal (c'est-à-dire le rapport hauteur/largeur) sur la performance d'une pile à combustible PEM avec la conception en canal serpentin. Pour comprendre l'effet du rapport d'aspect transversal du canal, 10 rapports d'aspect différents variant entre 0,07 et 15 ont été analysés en termes de densités de courant locales, de distributions de vitesse, de concentration d'eau liquide dans la membrane, de température et des concentrations de l'hydrogène et de l'oxygène. Les résultats obtenus montrent que, à faibles tensions de fonctionnement, la performance de la cellule est indépendante du rapport d'aspect de la section transversale du canal. Aux tensions de fonctionnement élevées, où l'influence de la vitesse de transport de masse est prédominante, à mesure que le rapport d'aspect de la section transversale du canal augmente la performance de la cellule est améliorée. Les modèles avec un rapport d'aspect élevé montrent, en général, des distributions de courant plus uniformes, avec les valeurs d'intensité maximale et minimale plus élevées, des distributions de température avec des gradients plus petits et une teneur en eau plus élevée dans la membrane qui permet d'obtenir une performance supérieure.

Dans la littérature en général, les analyses de la géométrie des canaux étaient limitées à quelques études, Chowdhury et al., [48] ont analysés 73 études de cas pour l'optimisation des canaux et la largeur des nervures. Un modèle mathématique isotherme tridimensionnel monophasique est développé et validé au moyen d'une étude expérimentale visant à optimiser le canal et la largeur de la nervure via la fonction de balayage paramétrique pour un nombre impressionnant de 73 études de cas. Les résultats numériques prédisent que la chute de pression dépend davantage de

la largeur du canal que de la largeur de la nervure et que la chute de pression de l'anode est moins importante que la chute de pression de la cathode. Cependant, la largeur du canal et de la nervure a une importance égale sur la densité de courant de la cellule. Compte tenu de la chute de pression du canal et de la densité du courant, les analyses d'optimisation ont montré que la largeur du canal à la nervure de 1,0 mm/1,0 mm serait mieux adapté à la géométrie du canal du PEMFC.

Muthukumar et al., [49] ont étudiés numériquement les effets des différentes largeurs de canaux aux nervures ($L \times C$) à l'aide d'un modèle 3D d'une PEMFC à une longueur de canal constante de 20 mm et des différentes largeurs de canal à la nervure ($L \times C$) de 0,5 x 0,5, 1x1, 1,5 x1,5, 2x2 mm. Ils ont constaté que le PEMFC avec une largeur de canal à la nervure de 0,5 x 0,5 mm a généré une densité de courant et de puissance élevée par rapport aux trois autres modèles. Les résultats de la simulation ont également indiqué que la plus petite largeur de nervure et de canal est nécessaire pour les sorties de densité de courant et de densité de puissance élevée du PEMFC dû de la meilleure gestion de l'eau.

Un autre point important pour atteindre la performance optimale PEMFC est de travailler sur l'avancement du GDL. De nombreux chercheurs se sont concentrés sur la modélisation de GDL et l'optimisation des paramètres tels que l'épaisseur de GDL, la porosité, la perméabilité des gaz, la gestion de l'eau et leur influence sur la performance [50-55]. Une étude paramétrique a été réalisée pour simuler l'effet du matériau GDL et de la géométrie, comme la porosité et l'épaisseur, sur la performance du PEMFC [56].

Abdollahzadeh et al. [57] ont étudié l'influence de la porosité des électrodes, de leur géométrie, de GDL et de CL sur le rendement du PEMFC à l'aide d'un modèle multidimensionnel non isotherme. Ils ont conclu qu'une GDL plus épaisse conduit à une mauvaise performance ; la porosité de la GDL a un effet important sur la limitation de la densité de courant.

Chun et al. [58] ont analysé l'impact des propriétés de GDL sur le rendement du PEMFC en se basant sur l'étude numérique et expérimentale qui a été réalisée. Une étude numérique unidimensionnelle a été effectuée pour estimer les propriétés optimales de GDL et a conclu que l'épaisseur de GDL de la cathode est un facteur important qui influe sur les performances du PEMFC. Le GDL plus épais provoque une baisse de la performance due à l'augmentation rapide de la saturation en eau liquide.

La revue de littérature montre que divers travaux ont établi que le rendement du PEMFC peut être amélioré en optimisant la structure, la porosité, la charge en platine et l'épaisseur du CL, compte tenu du fait que le CL agit comme le cœur du PEMFC de la cellule [59-62].

Khajeh-Hosseini et al. [63] ont développé un modèle mathématique pour le CL cathodique afin d'étudier numériquement l'effet de nombreux paramètres structurels de ce dernier, soit l'épaisseur du ionomère et la fraction volumique, la charge de platine et l'épaisseur de CL sur la performance. En utilisant un algorithme d'optimisation évolutionnaire, les auteurs prouvent que l'épaisseur du CL cathodique affecte fortement la performance. Avec un intervalle de 10 à 70 μm pour les épaisseurs de CL, l'augmentation de l'épaisseur de CL a un effet sur (1) l'augmentation de la porosité, ce qui diminue l'activation sur potentielle (2), l'augmentation de la longueur de diffusion de l'oxygène conduit à une activation trop élevée en permettant une augmentation de la résistance de diffusion. De plus, l'utilisation de couches multiples de CL donne une puissance maximale par rapport à un PEMFC optimisé avec un seul CL [64].

Srinivasarao et al. [65] ont étudié la possibilité d'améliorer les performances d'un PEMFC à couches multiples. La multiplication de la configuration du CL présente un avantage qui optimise les paramètres de conception de chaque couche avec sa flexibilité en termes qui peuvent répondre aux exigences de cette couche particulière.

Afin d'améliorer l'efficacité et la durée de vie du PEMFC, certains chercheurs ont optimisé le MEA, en particulier les propriétés des membranes comme la structure, la porosité et l'épaisseur [66].

Liu et al. [67] ont étudié systématiquement une cellule unique avec différentes membranes (mince composite Nafion/PTFE et Nafion 211) pour améliorer les performances du PEMFC.

Khazee et al. [68] ont utilisé un code CFD avec des modèles tridimensionnels et monophasés complets pour le PEMFC annulaire afin de simuler les effets de changement des propriétés du matériau membranaire sur la concentration des réactifs, la densité de courant et la performance. Ils ont conclu que l'épaisseur de la membrane influe considérablement sur le rendement. En réduisant l'épaisseur de la membrane, la résistance de la membrane diminue, ce qui signifie que la performance globale du PEMFC est améliorée.

Bien qu'il y ait déjà beaucoup de recherches axées sur la façon dont l'orientation des canaux d'écoulement peut également influencer les performances, l'obscurité et la remise en question se produisent encore lorsqu'il s'agit des dispositions les plus appropriées pour le développement futur du PEMFC.

Alaefour et al. [69, 70] ont examiné expérimentalement les effets des sens d'écoulement co-courant, contre-courant et croisé sur le rendement du PEMFC et la distribution de courant. Dans laquelle la disposition du contre-courant fournit les performances optimales par rapport aux arrangements de croisé et de co-courant.

Même si les travaux de recherche remarquables qui ont été menés et discutés sur l'optimisation de la structure, en tenant compte des approches numériques et expérimentales, l'analyse de l'optimisation des dimensions du PEMFC est encore discutable et non détaillée dans la littérature. Cette question fait l'objet d'une attention considérable quant aux dimensions optimales de la structure du PEMFC qui sont appropriées et prometteuses pour le développement futur et la réduction des coûts. Cependant une étude approfondie des paramètres géométriques, tels que la disposition et les dimensions du canal, la couche de diffusion/catalyseur de gaz et l'épaisseur de la membrane reste une nécessité. Il vaut certainement la peine d'envisager d'améliorer le rendement du PEMFC.

II.2 Forme de micro-canaux au niveau de la section transversale

Des conceptions et des constructions novatrices des canaux de flux de PEMFC ont été réalisées pour réduire le coût de fabrication et augmenter la densité de puissance générée de ce genre de pile. Par exemple, la spirale, radiale, canaux bio-inspirés ainsi que la conception tubulaire pourrait remplacer la conception conventionnelle et améliorer la performance du PEMFC [71-73].

Les CSC ont également un impact important sur la distribution des réactifs ajoutée à la densité de puissance de ce type de pile. Dans ce contexte, plusieurs travaux de recherche se sont concentrés sur les effets du CSC en étudiant et en optimisant différents paramètres impliquant les formes, les dimensions et les rapports du canal à la nervure. La plupart des résultats ont indiqué qu'une augmentation de la chute de pression le long des canaux était perceptible, ce qui a permis d'améliorer efficacement le rendement du PEMFC [74, 75].

Kumar et Reddy [76] ont étudié l'effet des formes CCS sur la consommation d'hydrogène à l'anode et la performance du PEMFC en utilisant des formes triangulaires et hémisphériques. Ils ont rapporté que ces formes augmentent la consommation d'hydrogène de 9 % par rapport à la rectangulaire.

Ahmed et Sung [77] ont étudié numériquement la performance d'un PEMFC à un seul canal droit avec des CCS trapézoïdaux, parallélogrammes et rectangulaires du côté anodique et cathodique. Ils ont constaté qu'une uniformité de distribution des réactifs et de la densité de courant local est obtenue lorsque les CCS ont la forme trapézoïdale.

Sun et al [78] ont proposé et utilisé un modèle de CFD, considérant le CCS sous forme trapézoïdale, pour étudier la distribution de la pression et le croisement d'écoulement à travers le GDL en négligeant la consommation d'oxygène. Les résultats montrent que la forme

trapézoïdale de la section transversale a un effet important sur la variation de pression et sur l'écoulement croisé à travers le GDL du PEMFC.

Owejan et al [79] ont analysé l'effet des canaux d'écoulement déposés sur les distributions d'eau liquide dans des piles à combustible fonctionnant à 50 cm^2 en utilisant la méthode de radiographie neutronique, ils ont révélé que les canaux triangulaires renaient moins d'eau que les canaux rectangulaires pour la même section transversale.

Metz et al [80] ont étudié numériquement et expérimentalement l'effet de l'utilisation de la forme triangulaire du micro-canal cathodique sur le transport des gouttelettes d'eau liquide. Ils ont constaté que cette nouvelle conception de champ d'écoulement améliore et stabilise la performance initiale de la cellule par rapport à la conception standard (CCS carré).

Akhtar et al [81] ont étudié les effets de cinq géométries différentes du canal, y compris la forme triangulaire, de l'évacuation de l'eau et la chute de pression dans le PEMFC. Ils ont conclu que les sections triangulaires augmentent considérablement la chute de pression.

Bunmark et al [82] ont utilisé des canaux inclinés novateurs sur les côtés anodiques et cathodiques de la cellule avec un angle de 20° afin d'améliorer la gestion de l'eau dans le PEMFC. Les résultats expérimentaux ont démontré que la conception du CSC pourrait à elle seule améliorer le rendement du PEMFC.

Zhu et al [83] ont utilisé un modèle tridimensionnel de CFD pour étudier la sensibilité de l'eau liquide, la chute de pression et le rendement du PEMFC avec différents micro-canaux. Les configurations de canaux trapézoïdaux, trapézoïdaux inversées et triangulaires sont comparées à la configuration de canaux rectangulaires. Ils ont conclu que les formes transversales ont un impact important sur le détachement des gouttelettes d'eau et sur la chute de pression globale.

Khazae et al [84] ont étudié expérimentalement l'effet des différents paramètres de fonctionnement et caractéristiques des gaz sur l'efficacité et la performance de la géométrie triangulaire des canaux dans le PEMFC.

Ben Salah et al [85] ont analysé la conception optimale des canaux gazeux pour la gestion de l'eau, y compris les CSC rectangulaires, trapézoïdaux et triangulaires avec les mêmes surfaces de section transversale, même hauteur et largeur dans les canaux anodiques et cathodiques pour toutes les conceptions étudiées. Leurs résultats indiquent que la configuration rectangulaire du CSC permet une meilleure évacuation de l'eau que les deux autres configurations.

Wang et al [86] ont évalué les caractéristiques de transport local et les performances du PEMFC pour plusieurs configurations de CSC cathodiques. Les résultats ont montré que les modèles de canaux triangulaires, semi-circulaires et trapézoïdaux augmentent l'efficacité de l'utilisation de

l'oxygène et améliorent la performance des cellules par rapport à la conception de canaux rectangulaires.

L'influence de la section trapézoïdale dans les canaux serpentins du PEMFC a également été étudiée par Y. Ben Salah [85]. Leurs résultats indiquent clairement que la forme de la section transversale de la plaque bipolaire devrait être prise en compte dans la conception du PEMFC. Khazaei et al [87, 88] ont conçu et construit plusieurs configurations de CSC de la PEMFC (rectangulaires, elliptiques et triangulaires) pour étudier expérimentalement ses effets sur la performance des cellules. Ils ont constaté que la forme de canal rectangulaire améliore la performance de la cellule mieux que les formes de canal triangulaire et elliptique.

L'effet de la géométrie des canaux gazeux sur la performance des cellules a également été étudiée par Ahmadi et al [89]. Ils ont changé la forme carrée du CSC en un trapèze inverse, en augmentant la largeur de la partie supérieure du canal de 1 mm à 1,6 mm et en maintenant la largeur inférieure à 1mm. Les résultats ont montré que le CSC avec une largeur de 1,2 mm en haut du canal est nécessaire pour une meilleure performance PEMFC.

Xu et al [90] ont utilisé un modèle de réseau théorique d'écoulement pour étudier les effets de la plaque bipolaire estampée avec un canal trapézoïdal similaire sur la caractéristique de résistance et la distribution de flux dans le PEMFC.

Korkischko et al [91] ont utilisé des modèles du CFD pour optimiser la forme du canal d'écoulement et améliorer les performances électriques du PEMFC en utilisant une forme trapézoïdale inversée du CSC. Ils ont signalé que le CSC optimisé a amélioré les caractéristiques de génération de courant que le canal d'écoulement rectangulaire classique.

Paulino et al [92] ont analysé numériquement l'influence du CSC (géométries rectangulaires, trapézoïdales et hybrides étagées) dans la distribution d'eau PEMFC. Leurs résultats indiquent que les CSC trapézoïdaux et les CSC étagés présentent moins d'accumulation d'eau que le canal rectangulaire.

Kim et al [93] ont étudié numériquement l'effet de trois types de CSC (rectangulaires, trapézoïdaux avec angles ouverts de 60° et trapézoïdaux avec angles ouverts de 72°) sur le comportement de l'eau liquide et la chute de pression dans le PEMFC. Les résultats ont montré que le CSC avec le trapézoïdal à des angles ouverts de 72° donne les meilleures caractéristiques d'évacuation de l'eau.

Hadjadj et al [94] ont mis en œuvre un modèle tridimensionnel en code CFD pour comparer trois différentes formes de section transversale des deux côtés des cellules (rectangulaires, triangulaires et canaux elliptiques droits) avec la même surface de section transversale et d'étudier les effets de ces configurations sur la performance et les phénomènes de transport

dans le PEMFC. Les résultats de la simulation montrent que la configuration triangulaire dans les canaux de l'anode et de la cathode améliore les performances du PEMFC par rapport aux configurations rectangulaires et elliptiques.

Même si ce sujet a reçu une attention notable dans la littérature, l'amélioration de la performance du PEMFC basée sur l'effet des formes de CSC dans la plaque bipolaire n'est pas encore claire et indéfinie. En outre, la plupart des travaux de recherche se concentrent uniquement sur des formes limitées (rectangulaires, triangulaires, trapézoïdales et elliptiques) sans économiser tous les facteurs de comparaison nécessaires tels que les surfaces de la section transversale, les débits de gaz, le rapport entre les débits de gaz et les dimensions des nervures parce que ces paramètres ont une incidence sur le rendement du PEMFC. Cette question ne peut pas être abordée en changeant la forme CSC d'un côté de la cellule ou en variant la largeur du canal d'une configuration à l'autre, car cela conduit à une inégalité dans le débit des réactifs, le rapport entre les débits de gaz, les dimensions des nervures et la surface CSC.

II.3 Configuration du chemin d'écoulement dans les micro-canaux

Les canaux à l'intérieur des plaques bipolaires et leurs configurations jouent un rôle important, car ils influencent la performance du PEMFC [95]. Récemment, de nombreuses recherches se sont concentrées sur les effets des modèles de canaux de PEMFC sur la performance des cellules et ont été présentées dans la littérature dans laquelle sont globalement liés à la forme de canaux d'écoulement tels que serpentines et canaux parallèles comme les modèles les plus courants dans un PEMFC coince [96], nouveau design en forme tubulaire [97] et un canal de section transversale modifiée du PEMFC [98]. D'autres conceptions ont également été conçues pour optimiser la forme du canal de gaz du PEMFC [99, 100].

De plus, les obstacles insérés à l'intérieur du canal ont été analysés pour améliorer la performance du PEMFC [101, 102]. À ce jour, les méthodes numériques, en particulier les techniques de calcul, sont fortement utilisées pour étudier l'influence des canaux d'écoulement non conventionnels sans construire une structure physique, éliminant les coûts de fabrication et d'usinage [103, 104].

Plusieurs logiciels commerciaux sont disponibles pour la modélisation de PEMFC, y compris les logiciels ANSYS fluent avec le module complémentaire de PEMFC, ce qui peut permettre d'examiner différentes conceptions [105].

Récemment, les configurations du chemin d'écoulement des canaux jouent un rôle important dans la performance du PEMFC. Les chercheurs ont essayé de développer plusieurs

configurations de chemin d'écoulement en tenant compte de leurs caractéristiques d'écoulements, de leurs propres avantages et inconvénients.

Fontana et al [106] ont étudié numériquement l'effet des chemins d'écoulement coniques d'une PEMFC sur la performance. Le logiciel commercial CFD ANSYS Fluent a été utilisé pour déterminer la dépendance de la consommation de réactif, la production d'énergie et le transfert de chaleur sur les trois différents angles d'inclinaison du canal. Ils ont aussi constaté que l'utilisation de canaux plus effilés conduit à une distribution efficace de l'oxygène qui affecte directement les transferts de chaleur à l'intérieur de la cellule. En outre, une inclinaison de 0,75 dans le canal d'écoulement peut effectivement augmenter la densité de courant générée par près de 9,5 % et la densité de puissance maximale de 8 %.

S. Arun Saco et.al [107] ont présenté quatre modèles de canal à savoir serpentine parallèle, serpentine zigzag, droite parallèle, et droit zigzag pour apprécier l'impact de cette conception sur la performance de la pile à combustible PEMFC. Les résultats de l'investigation numérique, via le code ANSYS Fluent CFD, montrent que la densité de puissance développée par le canal droit avec zigzag chemin est de 0,375 8 W/cm² et il s'agissait du maximum des configurations prises en compte, ce qui est dû à une gestion de l'eau efficace avec une chute de pression minimale. De plus, pour le modèle serpentin zigzag, la consommation de réactif est légèrement inférieure à celle du zigzag droit, mais la puissance de sortie est à peine la moitié de celui-ci et cela est dû à une consommation d'oxygène moins élevée et à un taux d'évacuation de l'eau plus faible par rapport à tous les canaux.

Wenkai Li et.al [108] ont établi un modèle de simulation tridimensionnelle, multiphasique, stationnaire, isotherme et laminaire pour étudier l'effet d'un nouveau canal tridimensionnel appelé canal ondulé sur le transfert de masse, gestion de l'eau et performance des cellules. Les résultats de la simulation révèlent que la structure d'onde périodique introduit une variation cyclique de la direction locale d'écoulement, de la vitesse locale et de la pression locale, entraînant ainsi une convection forcée accrue. La performance supérieure de cette conception a également été vérifiée expérimentalement dans cette étude, prouvant qu'elle permet non seulement une chute de pression plus faible sur toute la gamme de densité de courant, mais améliore également les performances de la cellule par rapport aux canaux conventionnels en canal serpentin à haute densité de courant. En particulier, il y a un accroissement de 17,8 % de la densité de puissance de crête en raison de l'utilisation des canaux serpentins ondulés.

Chowdhury et.al [109] ont développés une nouvelle conception de canaux convergents et divergents au moyen de l'inclinaison de l'entrée à la sortie de la plaque bipolaire dans le seul motif de canal serpentin pour la pile à combustible (PEMFC). Quatre différents canaux

convergenents sont fabriqués expérimentalement par la profondeur variable de canal incliné de l'entrée à la sortie comme 1,5 mm 0,5 mm, 2,5 mm 1,5 mm, 3 mm ~ 1 mm et 3,5 mm 0,5 mm, qui sont des canaux divergenents aussi bien en intercalant entre la section d'entrée et de la sortie. Des comparaisons avec deux serpentins classiques montrent que les canaux convergenents et divergenents surpassent les canaux conventionnels. Dans lequel, la performance maximale a été atteinte à partir de modèle convergent C1 (1,5 mm, 0,5 mm) l'amélioration de 19,27 % de la puissance que les deux canaux serpentins conventionnels. Par conséquent, ce nouvel effet serpentins convergent peut améliorer les performances de la pile à combustible PEM par suite à sa conception de plaque bipolaire appropriée.

La méthode de calcul de dynamique de fluide (CFD) a été utilisée par Wen D et.al [110] pour optimiser le nouveau champ d'écoulement avec la structure intersectant pour l'amélioration du PEMFC. En introduisant le canal serpentins unique comme référence pour estimer l'efficacité du nouveau canal, les résultats de la comparaison ont montré que la performance de l'intersectant canal d'écoulement était effectivement meilleure que celle de l'unique serpentins en termes de rapport de réaction et d'uniformité plus élevés.

Chowdhury et al., [111] ont présenté des analyses comparatives entre des champs serpentins convergenents, divergenents et conventionnels pour étudier la densité actuelle, le transfert de masse, la concentration d'eau et la distribution de la pression du PEMFC. À travers une approche numérique, un modèle mathématique tridimensionnel d'état stationnaire pour l'état isothermique du PEMFC à été développé. Les résultats de la simulation numérique révèlent que les canaux serpentins modifier donnent une densité de courant uniforme dû de la fraction massique inférieure de la concentration d'eau sur la zone réactionnelle, ce qui facilite un meilleur transport de masse d'oxygène, ainsi qu'une distribution de pression de canal plus élevée le long du champ d'écoulement de type serpentine.

Linhao Fan et. al [112] ont proposés deux nouvelles conceptions de canaux cathodiques (canal de structure en plusieurs plaques et canal de structure intégré) pour le PEMFC. Un modèle numérique multiphasique tridimensionnel est utilisé pour améliorer le transport des réactifs, l'évacuation d'eau liquide et les performances du PEMFC à un seul canal d'écoulement. Les résultats numériques indiquent que l'arrangement des plaques de guidage pneumatique à un angle de 30 °, à une largeur de 0,5 mm et à une distance de 6,0 mm présentent les meilleures performances, et que l'effet de l'angle des plaques sur les performances du PEMFC est le plus important. Par rapport au canal conventionnel, les nouveaux modèles de canaux se sont avérés capables de forcer plus d'oxygène vers la couche du catalyseur cathodique pour améliorer le taux de réaction électrochimique. En outre, ces deux nouveaux modèles de canaux sont en

mesure d'enlever plus d'eau liquide de PEMFC pour éviter effectivement l'évacuation de l'eau. Selon les résultats de la simulation, l'amélioration maximale des densités de puissance nette PEMFC pour la structure multi plaques et la structure intégrée est de 4,7 % et 7,5 %, respectivement.

Xiaohui Yan et.al [113] ont proposés et développés deux types de canaux PEMFC avec la géométrie des canaux en trois dimensions pour améliorer la gestion de l'eau, la performance des cellules et le transport d'oxygène. Le premier est conçu pour posséder des canaux ondulés afin d'induire une convection locale de l'oxygène à partir de l'interface canal/couche de diffusion à la couche de catalyseur afin d'améliorer l'alimentation en oxygène. Le second possède les canaux ondulés avec la profondeur de canal de gradient qui se résulte par une augmentation de la vitesse d'écoulement à la fois dans le plan et dans les directions à travers le plan de la région en amont à la région en aval, en tenant compte de la distribution inégale de la concentration en oxygène. Ils démontrent expérimentalement que la géométrie des canaux 3D est capable d'améliorer les performances des cellules, en particulier à des densités de courant élevées, qui peuvent être attribuées à l'amélioration du transport de l'oxygène et de l'évacuation de l'eau comme illustrée par une simulation numérique.

Seyed Ali Atyabi et.al [114] ont proposé un champ en forme de nid d'abeille de côté cathodique à l'aide d'un modèle 3D complet multiphasique basé sur CFD d'un PEMFC. Le nouveau modèle composé d'un modèle régulier de broches hexagonales qui sont classées dans le type de canal broche. Les analyses numériques ont révélé que la chute de pression maximale dans le canal cathodique est de 762 Pa, tandis que les distributions de pression et de température sont uniformes à l'interface entre la couche de diffusion gazeuse et la couche de catalyseur (CL). De plus, les résultats indiquent que la teneur en eau est inférieure à 14 dans la membrane, ce qui réduit la possibilité de présence d'eau dans le CL. Ils ont également constaté que la possibilité de points chauds et de phénomènes d'évacuation dans le PEMFC diminuait en augmentant l'uniformité de la distribution des champs de la température, de la pression et de la fraction massique d'oxygène.

Farzin Ramin et al [115] ont introduit dans une nouvelle conception de canaux en forme de casier pour étudier l'impact de la présence de plus petites largeurs de nervure à différentes sections transversales de chaque plaque bipolaire sur le rendement du PEMFC. Un modèle tridimensionnel non isotherme dans ANSYS Fluent est utilisé pour établir les capacités possibles de ce canal en forme de casier. On constate que le fait d'avoir des nervures plus étroites à un certain nombre de sections transversales améliore la densité actuelle par unité de surface active. Des valeurs optimales pour la longueur et le nombre de ces casiers sont fortement

requis lorsque le rendement du PEMFC est maximisé. Les résultats montrent également que les canaux munis de deux casiers de 8 mm de long fournissent des densités de courant considérablement plus élevées. Ces canaux à deux casiers améliorent également la distribution de l'oxygène et de l'eau sur le catalyseur cathodique, ce qui réduit la sur potentialité cathodique dans la cellule. Par conséquent, le canal de forme de casiers proposé améliore considérablement la densité de puissance tout en étant aussi simple et peu coûteux que les canaux conventionnels/classiques droits (sans casier) pour la fabrication.

II.4 Autres géométries

Différentes configurations de canaux d'écoulement ont été proposées, y compris des broches, des mailles, des canaux intégrés, des canaux cascades, des canaux droits, des canaux serpentins et des canaux interdigités. Ce dernier type de canaux est basé sur des modèles de canaux en cul-de-sac, ce qui signifie que les réactifs sont forcés à travers les électrodes poreuses. Les canaux interdigités fournissent une convection sous la nervure pour améliorer le prélèvement d'eau dans ces régions. Des champs serpentins ont été proposés pour résoudre une possible mauvaise distribution des réactifs. Cette configuration peut améliorer la distribution de l'écoulement des réactifs à travers la surface de l'électrode de la pile à combustible. L'augmentation de la vitesse d'écoulement ou du gradient de pression peut améliorer la gestion de l'eau et de la chaleur. Les champs rectilignes imposent une très faible chute de pression le long de ces canaux parallèles en distribuant également le flux. Un autre problème avec cette conception est que si la résistance au débit n'est pas maintenue au même niveau dans chaque écoulement parallèle, une distribution non uniforme des réactifs peut se produire [116, 117]. Les performances de la pile à combustible peuvent être améliorées en utilisant un blocage partiel du flux le long des canaux [118]. Différents types de blocs avec des formes en profilé, carrés, demi-cercle et trapézoïde, ont été utilisés. Il est confirmé que l'indentation du canal augmente le courant électrique produit par rapport à l'absence de dents, également connue sous le nom de cas conventionnel. En outre, l'indentation de canal provoque une chute de pression le long des canaux bosselés [119]. Un autre paramètre qui peut affecter les performances de la cellule est la forme de la section transversale du canal.

Juarez-Robles et al. [120] ont étudié l'influence du nombre de canaux sur la performance des piles à combustible du PEM ; ils ont introduit un modèle numérique tridimensionnelle non isotherme d'une pile à combustible PEMFC planaire avec des canaux d'écoulement en spirale concentrique pour étudier l'effet du nombre de canaux sur la performance de la cellule. Ils ont constaté que l'utilisation d'une plaque bipolaire à quatre canaux augmente la densité de courant

produite, diminue la chute de pression et conduit à une distribution plus uniforme des réactifs, ce qui signifie l'amélioration de la performance de la cellule.

Afin d'étudier les effets de la largeur du canal, le nombre de tours du canal spiralé et la direction du flux sur la consommation de réactifs dans une pile à combustible planaire PEM, un modèle tridimensionnel a été développé [95] ; il s'avère que l'augmentation du rapport de largeur du canal-nervure améliore l'uniformité de la distribution des réactifs et améliore les performances de la cellule. L'augmentation du nombre de tours du canal spiralé donne des résultats similaires. De plus, l'avantage de l'utilisation de la conception en spirale est la création d'une force centrifuge qui améliore les performances des cellules lorsque les réactifs sont injectés par la face externe du canal en spirale.

Pour améliorer la densité de puissance, le coût et la durabilité du PEMFC, on a comparé une PEMFC tubulaire à une autre conventionnelle. En ce qui concerne la distribution de la température et des réactifs, les résultats ont montré que l'architecture tubulaire améliorer la performance et donne une densité de courant plus élevée.

Maher A.R. Sadiq Al-Baghdadi [121] a développé un modèle de dynamique de fluide tridimensionnel non isotherme d'une membrane d'échange de protons (PEM) tubulaire. Ce modèle est utilisé pour étudier les effets de plusieurs paramètres de matériau considérant la nouvelle caractéristique de la géométrie en forme tubulaire de pile à combustible PEM, sur la performance. Des analyses détaillées de la distribution de la température à l'intérieur de la cellule tubulaire sous diverses propriétés des matériaux ont été effectuées et examinées dans le cadre de cette étude. L'analyse a également permis de déterminer les paramètres critiques et de mieux comprendre les mécanismes physiques qui mènent à la performance et à la durabilité des piles à combustible dans diverses conditions matérielles.

Nader Pourmahmoud et al. [122] ont présentés une nouvelle architecture tubulaire multicanal avec des capacités exceptionnelles pour les PEMFC afin d'améliorer la performance de la cellule et la réduction de sa taille et ceci à travers un modèle tridimensionnel non isotherme bien validé dans Fluent. Les résultats comparatifs montrent que les deux modèles tubulaires introduits sont nettement plus efficaces que le PEMFC conventionnel (planaire) ayant la même zone active. De plus, les cellules tubulaires sont considérablement plus petites et nécessitent moins de plaques bipolaires par unité de surface active. Pour ces raisons, la forme tubulaire est supérieure à la conception conventionnelle de PEMFC. La configuration tubulaire de nidification (construction d'un nid) montre une distribution plus uniforme de l'oxygène, de l'eau, de la densité du courant et de la température par rapport aux architectures tubulaires et conventionnelles. En outre, la conception tubulaire de nidification produit également une

densité de courant nettement plus élevée. En résumant les résultats, on constate que la nouvelle architecture tubulaire de nidification améliore considérablement le rendement du PEMFC tout en réduisant sa taille et son coût.

Khazaei et Ghazikhani. [123], introduisent un modèle non isotherme monophasé pour le PEMFC avec section annulaire. Ils ont montré que l'augmentation du nombre de connexions entre GDL et plaques bipolaires améliore les performances de la pile à combustible et augmente la densité de courant.

Akbar Mohammadi-Ahmar et al. [124, 125] ont utilisé un modèle tridimensionnel de PEMFC tubulaire pour étudier les effets de la disposition et du nombre de membranes, de couches de catalyseur et de couches de diffusion gazeuse sur le rendement de la cellule. En utilisant la même surface active et le même débit d'entrée, une comparaison a été effectuée pour différentes dispositions du PEMFC tubulaire. Les résultats montrent qu'en augmentant le nombre de couches, la consommation de réactifs est remarquable, ce qui améliore la densité de puissance produite.

En outre, une simulation numérique, dans des conditions stationnaire et non isotherme, a été développée pour améliorer les performances des piles à combustible en utilisant différentes sections transversales pour le PEMFC tubulaire [126], on constate que les sections transversales circulaires et carrées augmentent la densité du courant et permettent une distribution plus uniforme des réactifs, mais ce n'est pas le cas pour les coupes transversales octogonales.

Sierra et al. [127], ont proposé des géométries cylindriques comportant trois champs d'écoulement, à savoir des canaux serpents, interdigitaux et droits, pour évaluer les performances de la pile à combustible PEM. Les résultats numériques ont montré que la configuration avec des canaux cylindriques réduit la chute de pression en raison de la réduction progressive de l'angle du circuit d'écoulement. Par conséquent, il facilite l'éjection de l'eau liquide des couches de diffusion de gaz.

Comme mentionné ci-dessus, les architectures innovantes et les conceptions de canaux d'écoulement pourraient améliorer la performance des piles à combustible PEM et réduire leur coût. Par conséquent, l'architecture tubulaire est plus avantageuse que l'architecture planaire pour les raisons suivantes : (i) elle entraîne une distribution plus uniforme des réactifs, (ii) une pression plus uniforme appliquée à la MEA par la cathode et (iii) une plus grande surface cathodique qui augmente la quantité de réduction d'oxygène, dont le taux est plus lent que le taux d'oxydation de l'hydrogène [121].

Chapitre III

Modélisation et simulation numériques

Introduction

L'hétérogénéité des réactions électrochimiques et des phénomènes de transport qui peuvent avoir lieu dans une PEMFC nécessitent une attention particulière et l'utilisation d'un code de dynamique des fluides de calcul pour résoudre le modèle mathématique complet qui cerne ces dits phénomènes. La dynamique de calcul des piles à combustible comprend les étapes suivantes : (1) développement du modèle physicochimique ; (2) algorithmes numériques avancés pour résoudre le modèle ; (3) la caractérisation des matériaux et les conditions aux limites appropriées ; (4) et finalement la validation du modèle.

La présente étude est d'abord fondée sur un modèle de pile à combustible planaire tridimensionnelle en régime stationnaire qui est basé sur l'électrochimie, les considérations relatives au transport des espèces, ainsi qu'un code approprié de dynamique des fluides (CFD) qui a été utilisé pour résoudre le modèle. Deuxièmement, il s'agit de développer un programme FORTRAN pour construire la géométrie du domaine de calcul, créer le maillage et résoudre le problème qui régit les équations du PEMFC tubulaire.

Dans ce chapitre, les équations gouvernantes et les équations auxiliaires pour la modélisation des piles à combustible PEM sont exposées. Les procédures numériques pour résoudre les équations sont présentées. Enfin, les paramètres de modélisation sont fournis avec des conditions aux limites adaptées.

III.1 Configuration planaire

III.1.1 Domaine d'étude (modèle physique)

Pour toutes les configurations étudiées dans cette section, le PEMFC planaire utilisée est considéré comme une géométrie d'un seul canal rectiligne, qui se compose de plaques bipolaires anodiques et cathodiques qui fonctionnent comme collecteurs de courant, y compris les deux canaux de gaz, les couches de diffusion de gaz anodique et cathodique (GDL), les couches de catalyseur anodique et cathodique (CL) et la membrane (électrolytique) au milieu du sandwich. **ANSYS-Design Modular Tool** est utilisé pour créer les géométries d'une seule cellule tridimensionnelle d'une PEMFC planaire comme le montre schématiquement la figure III.1

III.1.2 Hypothèses de simplification :

- Le modèle tridimensionnel est résolu en fonction des hypothèses suivantes :
- Le modèle supposé être dans des conditions stables et non isothermes.
 - L'écoulement est laminaire et incompressible.
 - Les zones poreuse (GDL, CL et membrane) sont supposées isotropes et homogènes.
 - L'idéalité dans les gaz réactifs est pris en compte.
 - La production d'eau liquide est envisagée (pour les cas un et deux négligeant le changement de phase de l'eau, seule la vapeur d'eau est considérée).

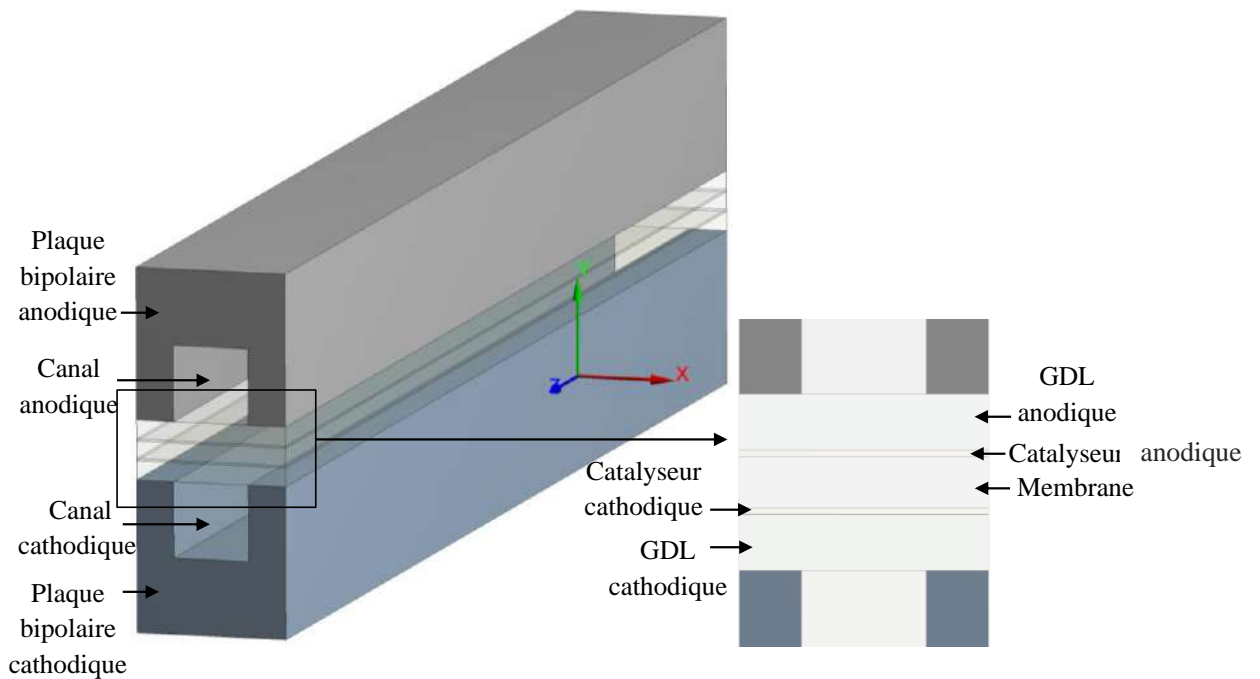


Fig.III.1 Représentation schématique du domaine de calcul PEMFC.

III.1.3 Formulation Mathématiques

Les équations de quantité de mouvement, de chaleur, d'espèces et de transfert de charge sont utilisées dans l'investigation de PEMFC planaire.

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho w)}{\partial x} = S_m \quad (\text{III.1})$$

$$u \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + v \frac{\partial(\rho u)}{\partial y} + w \frac{\partial(\rho u)}{\partial z} = -\frac{\partial P}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu_{\text{eff}} \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu_{\text{eff}} \frac{\partial u}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_{\text{eff}} \frac{\partial u}{\partial z} \right) + S_x \quad (\text{III.2})$$

$$u \frac{\partial(\rho v)}{\partial x} + v \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} + w \frac{\partial(\rho v)}{\partial z} = -\frac{\partial P}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu_{\text{eff}} \frac{\partial v}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu_{\text{eff}} \frac{\partial v}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_{\text{eff}} \frac{\partial v}{\partial z} \right) + S_y \quad (\text{III.3})$$

$$u \frac{\partial(\rho w)}{\partial x} + v \frac{\partial(\rho w)}{\partial y} + w \frac{\partial(\rho w)}{\partial z} = -\frac{\partial P}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu_{eff} \frac{\partial w}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu_{eff} \frac{\partial w}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_{eff} \frac{\partial w}{\partial z} \right) + S_z \quad (\text{III.4})$$

u, v, et w sont les composantes de vitesse dans les directions X, Y, Z, ρ est la masse volumique de gaz et S est le terme source, μ_{eff} est la viscosité effective, P est la pression statique. S_x , S_y et S_z sont les termes sources qui ont les expressions suivantes :

$$S_x = -\left(\frac{\mu u}{k_x} \right) \quad (\text{III.5})$$

$$S_y = -\left(\frac{\mu v}{k_y} \right) \quad (\text{III.6})$$

$$S_z = -\left(\frac{\mu w}{k_z} \right) \quad (\text{III.7})$$

Où μ est la viscosité du gaz et k_x , k_y et k_z sont les perméabilités directionnelles de CL et GDL.

$$u \frac{\partial(\rho c_p T)}{\partial x} + v \frac{\partial(\rho c_p T)}{\partial y} + w \frac{\partial(\rho c_p T)}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left(k_{eff} \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k_{eff} \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(k_{eff} \frac{\partial T}{\partial z} \right) + S_h \quad (\text{III.8})$$

S_h et k_{eff} sont le terme source et la conductivité thermique effective respectivement.

La source de chaleur totale S_h est définie comme suit [128] :

$$S_h = h_{react} - R_{an,cat} \eta_{an,cat} + I^2 R_{ohm} + h_L \quad (\text{III.9})$$

Où h_{react} est le changement net d'enthalpie dû aux réactions électrochimiques, $R_{an,cat}$ est le transfert de courant, $\eta_{an,cat}$ est le surpotentiel, R_{ohm} est la résistivité ohmique et h_L est le changement d'enthalpie de la vaporisation d'eau.

$$u \frac{\partial \rho y_i}{\partial x} + v \frac{\partial \rho y_i}{\partial y} + w \frac{\partial \rho y_i}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho D_i \frac{\partial y_i}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\rho D_i \frac{\partial y_i}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\rho D_i \frac{\partial y_i}{\partial z} \right) + S_i \quad (\text{III.10})$$

Où D_i est la diffusivité de chaque espèce i et S_i le terme source pour chaque espèce i qui peut être exprimé comme suit :

$$S_{H_2} = -\frac{M_{w,H_2}}{2F} R_{an} < 0 \quad (\text{III.11})$$

$$S_{O_2} = -\frac{M_{w,O_2}}{4F} R_{cat} < 0 \quad (\text{III.12})$$

$$S_{H_2O} = \frac{M_{w,H_2O}}{2F} R_{cat} > 0 \quad (\text{III.13})$$

La loi de diffusion de Fick est utilisée pour cette analyse afin de calculer le flux diffusif massique [128].

$$D_i = \varepsilon^{1.5} D_i^0 \left(\frac{p_0}{p} \right) \left(\frac{T}{T_0} \right)^{1.5} \quad (\text{III.14})$$

Où D_i^0 est la diffusivité massique de chaque espèce i à la température et à la pression de référence ($p_0 = 101\,325$ Pa, $T_0 = 300$ K).

Modèle électrochimique

Le transport des électrons dans tous les matériaux conducteurs solides (collecteur de courant, GDL et CL) est représenté par les équations III.15 et III.16, qui représentent le transport protonique. Les deux équations sont les suivantes :

$$\nabla \cdot (\sigma_{sol} \nabla \varphi_{sol}) + R_{sol} = 0 \quad (\text{III.15})$$

$$\nabla \cdot (\sigma_{mem} \nabla \varphi_{mem}) + R_{mem} = 0 \quad (\text{III.16})$$

Où σ , φ et R sont respectivement la conductivité électrique, le potentiel électrique et la densité volumétrique du courant. De même, les indices sol et mem décrivent le solide et la membrane. La densité de courant locale à l'intérieur des couches du catalyseur est calculée à l'aide de la formulation générale de Butler-Volmer. (Eqs. III.17 et III.18).

$$R_{an} = J_{an}^{ref} \left(\frac{H_2}{H_{2,ref}} \right)^{\gamma_{an}} \left[\exp\left(\frac{\alpha_{an} F \eta_{an}}{RT} \right) - \exp\left(-\frac{\alpha_{cat} F \eta_{an}}{RT} \right) \right] \quad (\text{III.17})$$

$$R_{cat} = J_{cat}^{ref} \left(\frac{O_2}{O_{2,ref}} \right)^{\gamma_{cat}} \left[-\exp\left(\frac{\alpha_{an} F \eta_{cat}}{RT} \right) + \exp\left(-\frac{\alpha_{cat} F \eta_{ca}}{RT} \right) \right] \quad (\text{III.18})$$

Dans les équations (17) et (18) $H_2 / H_{2,ref}$ et $O_2 / O_{2,ref}$ représentent la concentration d'espèces locales et la concentration de référence sur l'anode et la cathode, respectivement, J^{ref} est la densité de courant d'échange de référence, α est le coefficient de transfert, γ est le coefficient de concentration et F est la constante de Faraday, η est la surface locale sur potentielle qui entraîne la force pour la cinétique qui est connue comme la perte d'activation. Elle est représentée par la différence entre le potentiel solide et le potentiel membranaire du côté anodique (Eq. III.19) et par la différence entre le potentiel solide et le même potentiel membranaire et la tension en circuit ouvert V_{oc} du côté cathodique (Eq. III.20).

$$\eta_{an} = \varphi_{sol} - \varphi_{mem} \quad (\text{III.19})$$

$$\eta_{cat} = \varphi_{sol} - \varphi_{mem} - V_{oc} \quad (III.20)$$

Pour une membrane considérée comme une zone poreuse, la conductivité protonique s'écrit comme suit [129] :

$$\sigma_{mem} = (0.00514\lambda - 0.00326) e^{1268 \left(\frac{1}{303} - \frac{1}{T} \right)} \quad (III.21)$$

Où λ est la teneur en eau, qui est donnée par la corrélation de Springer comme suit [130] :

$$\lambda = 0.043 + 17.18a - 39.85a^2 + 36a^3 \quad (a < 1) \quad (III.22)$$

$$\lambda = 14 + 1.4(a-1) \quad (a > 1) \quad (III.23)$$

Où a représente l'activité de l'eau qui est écrit comme suit :

$$a = \frac{p_{wv}}{p_{sat}} \quad (III.24)$$

Où p_{wv} et p_{sat} sont la pression de vapeur d'eau et la pression de saturation, respectivement.

Dans le cas où le mode multi phases est considéré :

Un modèle de saturation est utilisé pour tenir compte de la formation et du transport de l'eau. La formation et le transport de l'eau liquide sont régis par une équation de conservation basée sur la fraction volumétrique de l'eau liquide, ou sa saturation.

$$\frac{\partial(\varepsilon \rho_l)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_l \mathbf{V}_l S) = r_w \quad (III.25)$$

L'indice l représente l'eau liquide et r_w le taux de condensation. ε est la porosité ; ρ_l est la densité du liquide (kg m^{-3}) ; \mathbf{V}_l est la vitesse du liquide (m s^{-1}). Le taux de condensation, r_w , est modélisé par :

$$r_w = C_r \max \left(\left[(1-S) \frac{p_{wv} - p_{sat}}{RT} M_{w,H_2O} \right], [-S \rho_l] \right) \quad (III.26)$$

C_r est la constante du taux de condensation. p_{wv} est la pression de la vapeur d'eau p_{sat} est la pression de saturation (N m^{-2}). Un terme de diffusion capillaire remplace le terme convectif de l'équation (12) dans les zones poreuses et devient donc :

$$\frac{\partial(\varepsilon \rho_l)}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\rho_l \frac{KS^3}{\mu_l} \frac{dp_c}{ds} \nabla S \right) = r_w \quad (III.27)$$

Où K est la perméabilité absolue (m^2) ; μ_l est la viscosité cinématique de l'eau liquide (Pa s^{-1}) et p_c est la pression capillaire (N m^{-2}) qui est calculée en fonction de la saturation à l'aide de la fonction de Leverett.

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\sigma_i \cos \theta_c}{\left(\frac{K}{\varepsilon}\right)^{0.5}} (1.417(1-s) - 2.12(1-s)^2 + 1.263(1-s)^3) \theta_c < 90^\circ \\ \frac{\sigma_i \cos \theta_c}{\left(\frac{K}{\varepsilon}\right)^{0.5}} (1.417s - 2.12s^2 + 1.263s^3) \theta_c < 90^\circ \end{array} \right. \quad (\text{III.28})$$

Où σ_i est la tension de surface (N m^{-2}) ; θ_c est l'angle de mouillage des électrodes (90° : hydrophile et $> 90^\circ$: hydrophobe).

Le débit dans les milieux poreux des couches de GDL et de catalyseur est modélisé en ajustant le terme source en ajoutant une source négative qui représente les chutes de pression dans les équations des espèces et en calculant les diffusivités des espèces.

$$S_i = - \left(\frac{\mu}{k} V_i + C_2 \frac{1}{2} \rho V_{mag} V_i \right) \quad (\text{III.29})$$

S_i indique la source dans le sens i . μ est la viscosité cinématique ($\text{m}^2 \text{s}^{-1}$), ρ la densité de fluide (kg m^{-3}), V_i et V_{mag} sont la vitesse et l'amplitude de la vitesse (m s^{-1}), C_2 est le facteur de résistance inertielle (m^{-1}).

$$D_i = \varepsilon^{1.5} (1-S)^{r_s} D_i^{ref} \left(\frac{p_{ref}}{p} \right) \left(\frac{T_{ref}}{T} \right)^{1.5} \quad (\text{III.30})$$

La diffusivité d'une espèce est calculée à l'aide de la diffusivité de référence D_i^{ref} , d'une pression de référence p_{ref} (Pa) et de la température de référence T_{ref} (K) ainsi que de la porosité ε , du terme de saturation s et de l'exposant de blocage des pores r_s .

III.1.4 Conditions aux limites

Les conditions de Dirichlet sont utilisées à l'entrée des canaux cathodiques et anodiques pour les espèces, la chaleur et les équations de conservation de masse.

Les taux de débit massique sont considérés comme constants à chaque entrée de canal dans tous les cas des simulations réalisées. Ces valeurs sont calculées en fonction des conditions d'humidification de l'anode et de la cathode, tenant compte que l'air étant considéré comme l'oxydant.

Les conditions de Neumann sont utilisées pour tous les paramètres. Aux interfaces fluides/solides, la condition de non-glissement et l'absence de flux d'espèces sont considérées.

Aux sorties des canaux, la condition de sortie de pression est prise en compte et un gradient de zéro est utilisé dans la direction d'écoulement (OZ) pour le reste des paramètres.

À la surface extérieure de PEMFC, l'état de la paroi est utilisé dans toutes les simulations réalisées.

III.1.5 Simulation numérique

Le code CFD est utilisé pour simuler toutes les équations de conservation selon l'approche du volume fini pour la discrétisation. Ansys-Fluent logiciel de simulation est déjà utilisé et a démontré sa capacité à gérer avec différents cas de la PEMFC dans beaucoup de travaux numériques [43, 46, 96, 105, 110, 112]. Les équations de transport d'espèces, de Navier-Stokes, de l'énergie, de la conservation de la masse, des charges électriques et Butler-Volmer sont impliquées dans le modèle tridimensionnel PEMFC comme le montre l'algorithme fig. III.2.

Pour plus de détails, le manuel du module complémentaire ANSYS PEMFC décrit en détail les équations du modèle et les méthodes d'implémentation [128].

Le solveur en termes d'équations de pression de vitesse couplées est basé sur l'algorithme SIMPLE qui s'est intégré dans le logiciel pour la procédure de solution. Pour s'assurer que la solution est stabilisée, les facteurs de relaxation sont ajustés pour les équations des espèces, la teneur en eau et l'énergie et fixés à 0,95.

La quantité de mouvement et la pression sous facteurs de relaxation ont été fixées à 0,3 et 0,7, respectivement. De plus, les cycles Multigrid sont changés pour tous les facteurs de relaxation en F-Cycle et la méthode de stabilisation standard est remplacée par BCGSTAB pour les concentrations d'espèces, la saturation en eau, les potentiels électriques et protoniques.

III.1.6 Indépendance de maillage et validation

Pour vérifier l'indépendance des mailles, cinq mailles différentes avec 31 020, 80 640, 104 000, 144 000 et 385 700 cellules hexaèdres sont générées à l'aide de l'outil de maillage ANSYS (fig. III.4). Les simulations de PEMFC planaire sont réalisées dans les mêmes conditions pour les cinq cas avec une grille non uniforme pour les directions x et y et une grille uniforme pour la direction z. L'indépendance de la maille utilisée est montrée à la fig. III.3 en termes de densité de puissance.

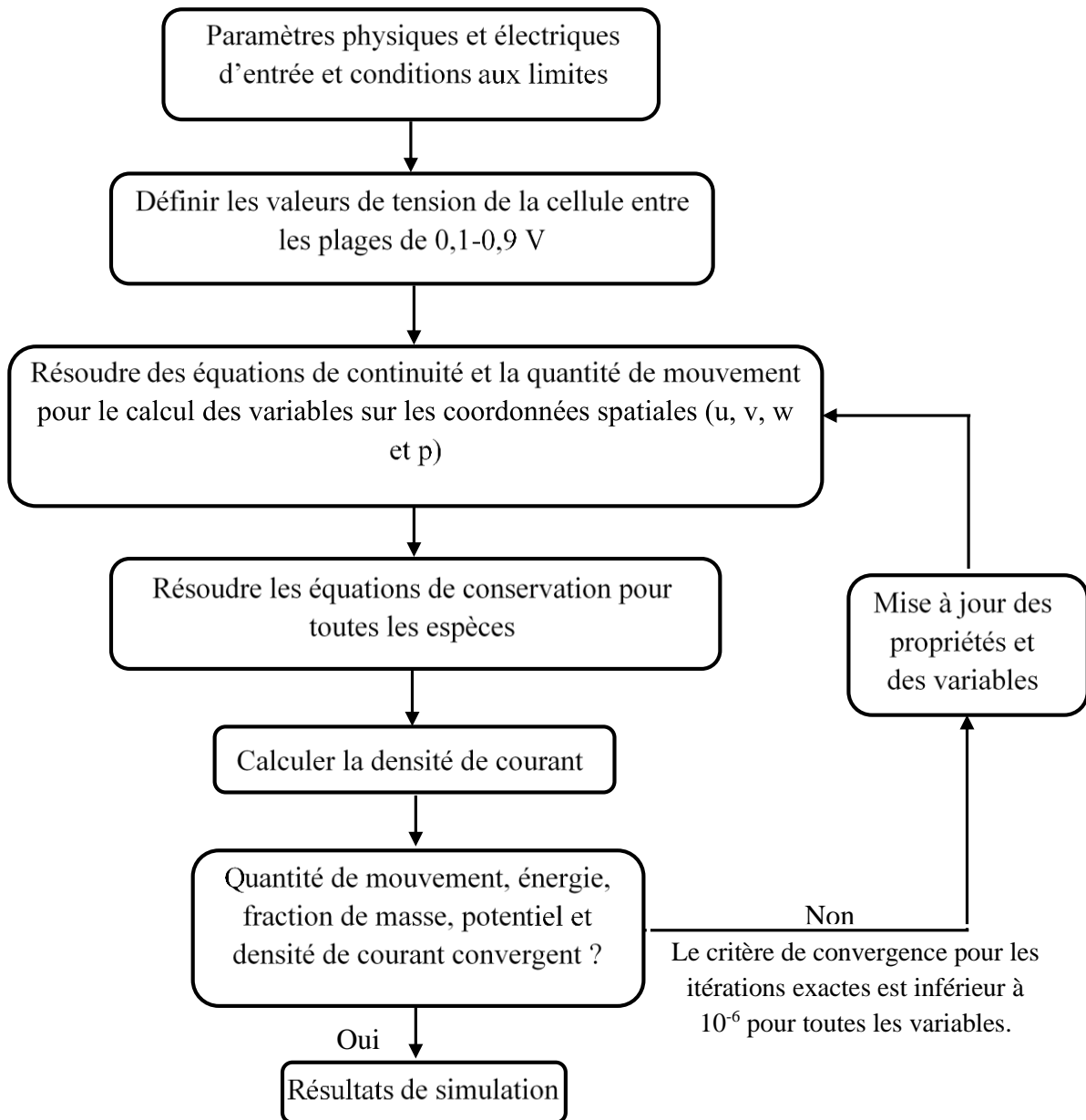


Fig. III.2. Algorithme de simulation numérique.

Compte tenu du temps de calcul et de la précision de cette simulation, le maillage avec 104 000 cellules de calcul hexaédrique est capable de fournir des performances de PEMFC à différentes densités de puissance avec moins de temps de calcul. En outre, ce maillage doit être utilisé pour tous les cas étudiés. Les simulations sont effectuées dans un ordinateur portable (DELL) qui a un Intel Core I5 avec 8,0 Go de RAM, 2,50 Ghz de vitesse CPU et le Windows10 comme un système d'exploitation .

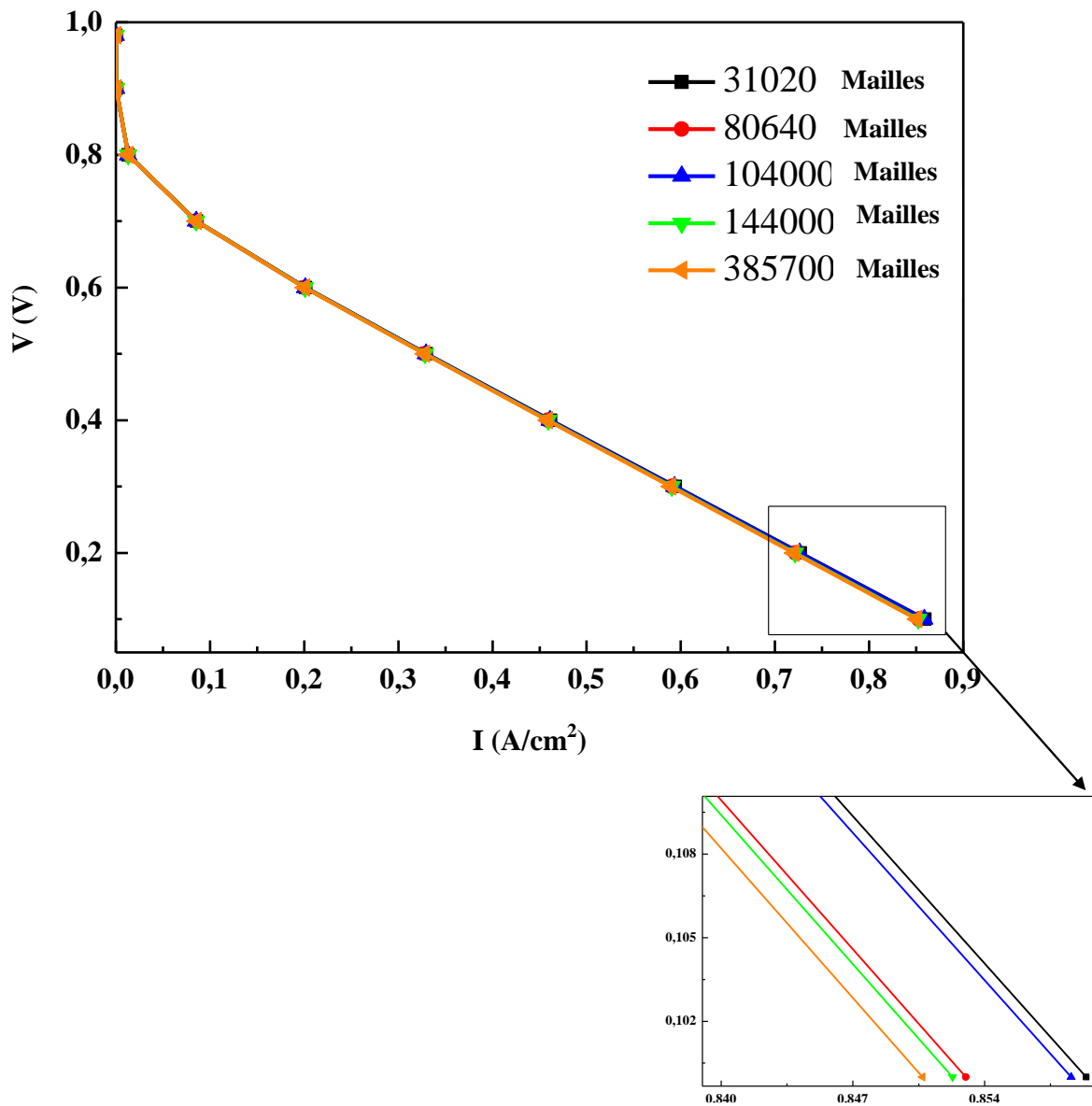


Fig. III.3 Analyse de l'indépendance de maillage.

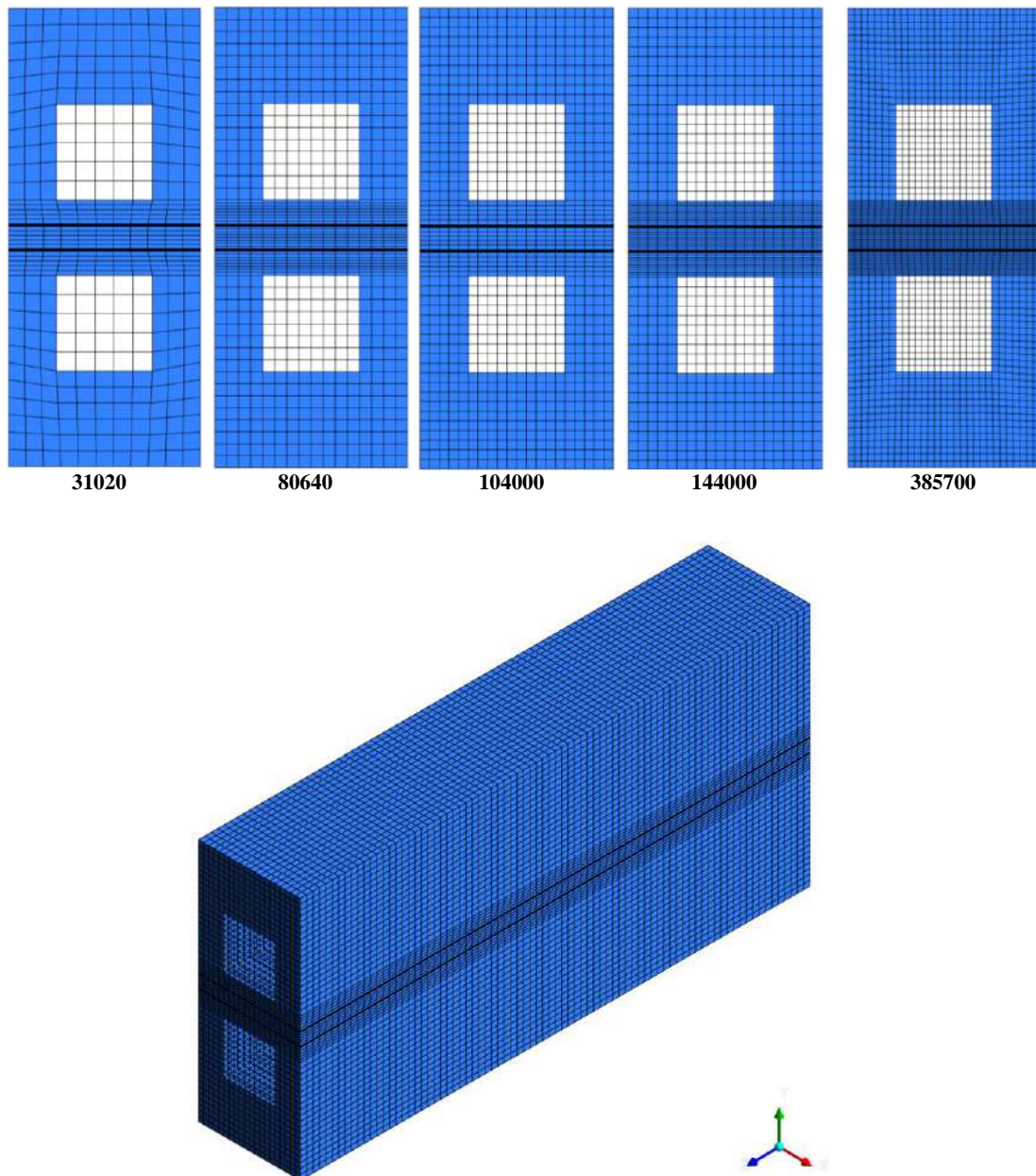


Fig. III.4 Présentation du maillage quadratique utilisé.

Afin d'étudier clairement l'effet de ces paramètres géométriques sur les performances planaires du PEMFC, la courbe de polarisation (I-V) du modèle utilisé est prédite à l'aide d'une simulation à l'état stationnaire.

En outre, une plage de la tension de circuit ouvert (OCV) de 0,9 à 0,3 V est considérée pour obtenir la courbe de validation. La validation de ce modèle incluant tous les paramètres de simulation est prise en compte par un point de vue de la courbe de polarisation I-V. Le PEMFC simulé a une géométrie similaire avec les mêmes dimensions que Hood et al [131] pour assurer une comparaison équitable.

Hood et al [131] ont comparé leur modèle avec deux approches numériques et l'expérience de Ticianelli et al [132] pour assurer la précision du modèle utilisé. Des comparaisons entre nos résultats, les résultats numériques de Hood et al [131] et les résultats expérimentaux de Ticianelli et al [40] sont effectués pour établir l'exactitude des résultats simulés. La comparaison est effectuée pour un PEMFC de 100 mm de long avec une section rectangulaire. À des densités de courant plus faibles, de bons accords entre les données expérimentales de Ticianelli et al [132] et nos résultats de simulation sont considérés comme identiques. On constate des légères différences entre le modèle actuel et l'étude numérique de Hood et al [131] (Fig. III.5).

Dans les régions à haute densité de courant, des accords acceptables sont observés entre la courbe expérimentale de Ticianelli et al [132] et les deux courbes de simulation. La courbe expérimentale est inférieure aux deux courbes numériques (la courbe actuelle prévue et la courbe de polarisation de Hood et al [131]) avec une petite différence (Fig III.5).

Cette différence est attribuée à plusieurs facteurs, notamment les hypothèses simplificatrices utilisées, l'exactitude des erreurs d'arrondi, etc...

La comparaison du modèle ANSYS FLUENT actuel et du modèle numérique de Hood et al [131] avec les données expérimentales de Ticianelli et al [132], les erreurs respectives sont d'environ 7,4 % et 13,3 %.

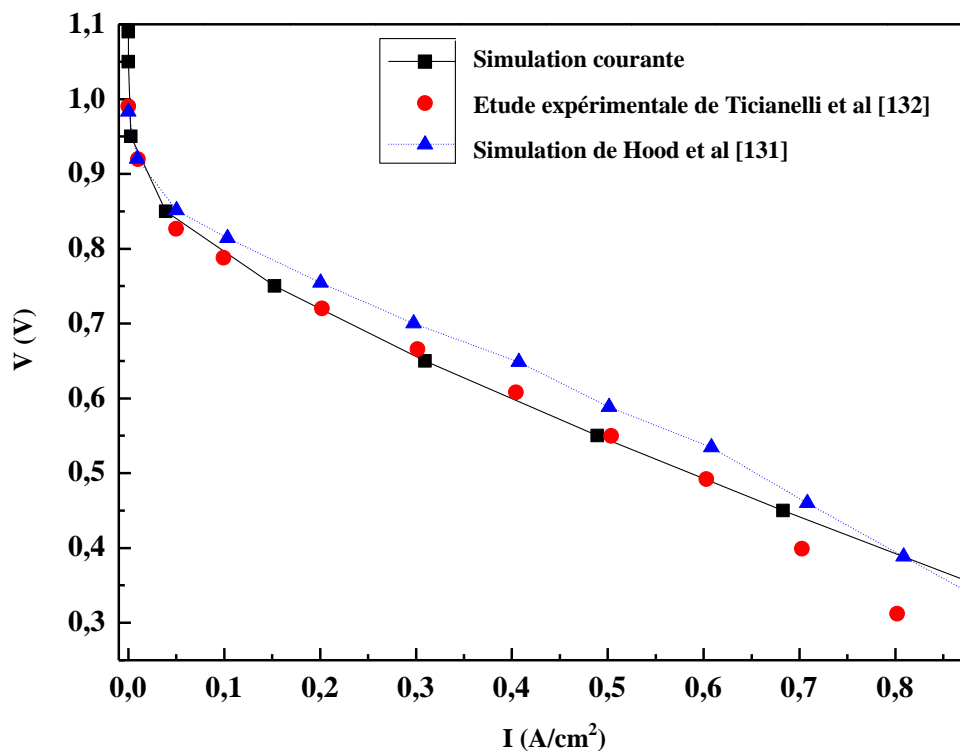


Fig.III.5 Comparaison de la courbe de polarisation entre le modèle actuel, expérimental de Ticianelli et al. [131] et simulation numérique de Hood [132].

III.1.7 Problématique

Au premier cas d'étude, les simulations sont effectuées pour obtenir les dimensions optimales de PEMFC planaire qui améliorent la performance, compte tenu de la vaste gamme d'épaisseurs de GDL et de MEA, les dimensions du canal utilisées dans la littérature pour les cellules à l'échelle réelle de l'industrie ; les limites de ces dimensions n'ont pas été abordées par des travaux de recherche récents.

Cependant, les simulations tentent de résoudre ce problème par des études comparatives en termes de performance et de chute de pression entre cinq dimensions différentes principalement utilisées pour chaque partie de la cellule (GDL, CWH, CL et épaisseurs de membrane). De plus, ces travaux limitent fortement la portée de ces dimensions au meilleur de la connaissance des auteurs.

Les dimensions des composants PEMFC prises dans tous les cas des simulations réalisées (CWH, épaisseur CL, épaisseur CL et épaisseur de la membrane) sont données au tableau III.1 et à la fig. III.6.

Tableau III.1 Détails des paramètres géométriques.

Paramètres	Unités	Symbol	Valeurs			
			Cas 1	Cas 2	Cas 3	Cas 4
Longueur de cellule	mm	L	100	100	100	100
Largeur/hauteur du canal	mm	W/H	0,5/0,5, 0,75/0,75, 1/1, 1,25/1,25, 1,35/1,35	1/1	1/1	1/1
Épaisseur de la couche de diffusion de gaz	mm	D _{GDL}	0,25	0,15, 0,20, 0,25, 0,30, 0,35	0,25	0,25
Épaisseur de la couche du catalyseur	mm	D _{CL}	0,028	0,028	0,008, 0,018, 0,028, 0,038, 0,048	0,028
Épaisseur de la membrane	mm	D _{MEM}	0,23	0,23	0,23	0,10, 0,13, 0,20, 0,23, 0,30

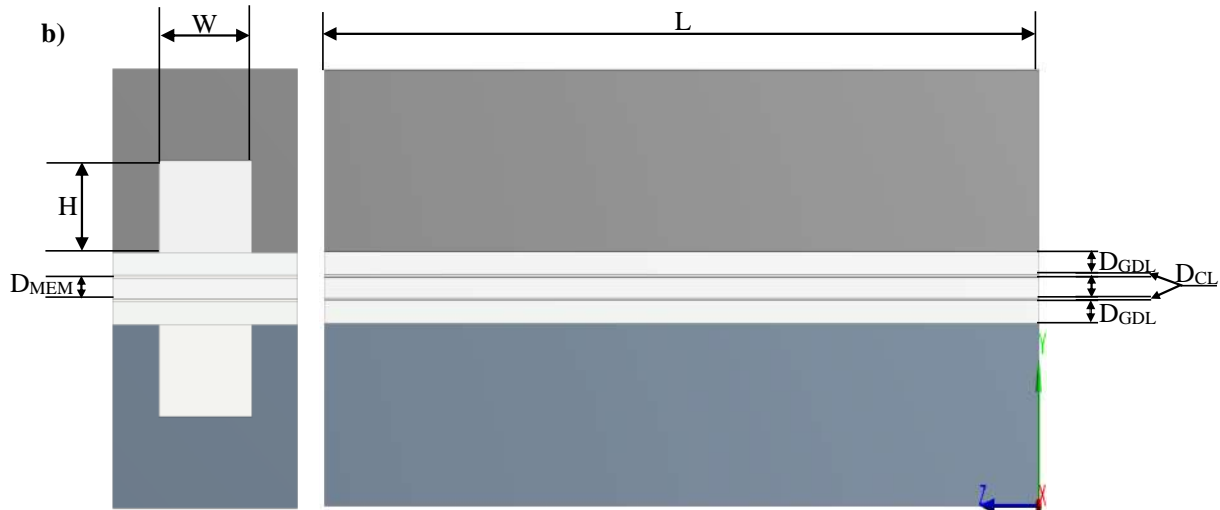


Fig.III.6 Représentation des dimensions du composant PEMFC.

Plusieurs simulations numériques ont été effectuées en utilisant le code commercial CFD (Fluent-ANSYS) pour résoudre les équations gouvernantes. Un nombre total de 20 cas possibles de dimensions du PEMFC planaire sont simulés dans les mêmes conditions de fonctionnement pour les deux arrangements, c.-à-d. contre- et co-courant comme résumé dans le tableau III.2.

L'analyse implique la méthode graphique qui est utilisée pour optimiser les dimensions du PEMFC et pour superviser le comportement de la densité de puissance avec chaque dimension étudiée et estimer l'amélioration de la performance de PEMFC, qui peut être obtenue selon les paramètres géométriques étudiés.

Dans le deuxième cas étudié, 30 modèles de canaux transversaux ont été envisagés, y compris 25 nouvelles configurations innovantes et 5 configurations bien connues, et comme mentionnées ci-dessus ANSYS-Design Modular Tool est utilisé pour créer toutes ces formes CSC (Figure III.7.).

La section transversale des canaux PEMFC de la zone $0,64 \text{ mm}^2$ est maintenue constante pour toutes les formes considérées pour réaliser une comparaison équitable entre les 30 configurations étudiées. En outre, la zone de contact entre les canaux et les électrodes (largeur de canal pour une forme rectangulaire) est maintenue constante pour toutes les formes étudiées afin d'assurer une surface de contact équitable ou égale.

En ce qui concerne le choix des designs CSC, la création de toutes les formes est basée sur une méthode logique et spécifique. Dans la première étape, les 5 formes géométriques bien connues qui sont rectangulaires, triangulaires, trapézoïdales, trapézoïdales inversées et elliptiques ajoutées à la nouvelle configuration elliptique inversée sont utilisées comme configurations de

base. Dans la deuxième étape, afin de combiner ces configurations une par une, les sections transversales des canaux sont divisées en deux parties (en haut et en bas) comme indiqué et nommées dans le tableau III.3.

Tableau III.2 Paramètres électrochimiques utilisés dans les simulations [133].

Paramètre	Unités	Valeurs
Tension de circuit ouvert	V	0,98
Densité de courant d'échange de référence (anode)	A/m ²	4.48x10 ⁵
Densité de courant d'échange de référence (cathode)	A/m ²	4,48
Exposant de concentration (anode)		0,5
Exposant de concentration (cathode)		1
Coefficient de transfert de charge (anode)		1
Coefficient de transfert de charge (cathode)		1
Masse d'entrées de gaz d'anode	kg/s	6.0x10 ⁻⁷
Masse d'entrées de gaz cathodique	kg/s	5.0x10 ⁻⁶
Pression de fonctionnement	Pa	2.0x10 ⁵
Diffusivité de H ₂	m ² /s	8.0x10 ⁻⁵
Diffusivité O ₂	m ² /s	2,0 x10 ⁻⁵
Diffusivité H ₂ O	m ² /s	5. 0x10 ⁻⁵
Température d'air	° C	60
Température d'hydrogène	° C	60
Température de fonctionnement	° C	60
Humidité relatif	%	0
Masse volumique de plaque bipolaire	kg/m ³	1990
Capacité thermique spécifique de la plaque bipolaire	J/(kg·K)	710
Conductivité thermique des plaques bipolaires	W/(m·K)	120
Conductivité électrique plaque bipolaire	1/(Ω·m)	92 600
la Résistance de contact de Plaque bipolaire — couche de diffusion de gaz	Ω·m ²	4,56 x10 ⁻⁶
Porosité de la couche du catalyseur		0,5
Résistance visqueuse de la couche catalyseur	1/m ²	1 x10 ¹²
Masse volumique de la couche de diffusion de gaz	kg/m ³	321,5
Porosité de la couche de diffusion de gaz		0,82
Conductivité électrique de la couche de diffusion de gaz	1/(Ω·m)	280
Couche de diffusion de gaz résistance visqueuse (anode)	1/m ²	1,00 x10 ¹²
Couche de diffusion de gaz résistance visqueuse (cathode)	1/m ²	3,86 x10 ¹²
Masse volumique de la membrane	kg/m ³	1980
Conductivité thermique de la membrane	W/(m·K)	0,16
Poids équivalent de la membrane	kg/kmol	1100



Fig.III.7 Configurations étudiées de la section transversale du canal.

Tableau III.3 Méthodologie de la proposition de forme du CSC.

Haut \ Bas	Rectangulaire (Rct)	Triangulaire (Trg)	Trapèze (Trp)	Trapèze inversé (Itrp)	Demi-elliptique (Hlp)	Demi-elliptique inversé (IHlp)
Rectangulaire (Rct)	Rct	Rct-Trg	Rct-Trp	Rct-Itrp	Rct-Hlp	Rct-IHlp
Triangulaire (Trg)	Trg-Rct	Trg	Trp	Trp — Itrp	Trp — Hlp	Trp — IHlp
Trapèze (Trp)	Trp-Rct	Trg	Trp	Trp — Itrp	Trp — Hlp	Trp — IHlp
Trapèze inversé (Itrp)	Itrp-Rct	Itrp-Trg	Itrp — Trp	Itrp	Itrp — Hlp	Itrp — IHlp
Demi-elliptique (Hlp)	Hlp-Rct	Hlp — Trg	Hlp-Trp	Hlp — Itrp	Hlp	Hlp — IHlp
Demi-elliptique inversé (IHlp)	IHlp-Rct	IHlp-Trg	IHlp-Trp	IHlp-Itrp	IHlp-Hlp	IHlp

Tableau III.4 Propriétés des matériaux et conditions limites utilisées dans les simulations [46].

Paramètre	Units	Value
Tension de circuit ouvert	V	1,09
Densité de courant d'échange de référence (anode)	A/m ²	7,17
Densité de courant d'échange de référence (cathode)	A/m ²	7.17×10 ⁻⁵
Exposant de concentration (anode)		1
Exposant de concentration (cathode)		1
Coefficient de transfert de charge (anode)	Kmol/m ³	0,000 881 4
Masse d'entrées de gaz d'anode	kg/s	6.0x10 ⁻⁷
Masse d'entrées de gaz cathodique	kg/s	5.0x10 ⁻⁶
Pression de fonctionnement	Pa	101 325
Diffusivité de H ₂	m ² /s	1.1x10 ⁻⁵
Diffusivité O ₂	m ² /s	3,2 x10 ⁻⁵
Diffusivité H ₂ O	m ² /s	7.35x10 ⁻⁵
Température de fonctionnement	° K	343
Humidité relative	%	100
Masse volumique de plaque bipolaire	kg/m ³	2719
Capacité thermique spécifique de la plaque bipolaire	J/(kg·K)	871
Conductivité thermique des plaques bipolaires	W/(m·K)	20
Conductivité électrique plaque bipolaire	1/(Ω·m)	20 000
La Résistance de contact de Plaque bipolaire — couche de diffusion de gaz	Ω·m ²	1 x10 ⁻⁶
Porosité de la couche du catalyseur		0,4
Résistance visqueuse de la couche catalyseur	1/m ²	1,76 x10 ¹¹
Rapport surface-volume de la couche du catalyseur	1/m	1.127×10 ⁷
Masse volumique de la couche de diffusion de gaz	kg/m ³	321,5
Porosité de la couche de diffusion de gaz		0,6
Conductivité électrique de la couche de diffusion de gaz	1/(Ω·m)	280
Résistance visqueuse de la couche de diffusion de gaz	1/m ²	1,76 x10 ¹¹
Masse volumique de la membrane	kg/m ³	1980
Conductivité thermique de la membrane	W/(m·K)	0,16
Poids équivalent de la membrane	kg/kmol	1100

La troisième étape concerne la combinaison et le tri des formes géométriques résultantes. La combinaison entre la configuration triangulaire et trapézoïdale est exclue dans les deux parties (haut et bas) dans lesquelles elles ont la même forme lorsque la combinaison a été faite (formes triangulaire et trapézoïdale). Les formes de CSC obtenus par la base trapézoïdale sont éliminées du tableau parce qu'ils sont identiques aux plans CSC obtenus par la base triangulaire.

En outre, les mêmes conditions de fonctionnement, telles que la température, la pression, les taux de débits massiques de gaz réactifs, le rapport entre les débits de gaz, le combustible et l'oxydant, sont prises en compte dans les trente configurations utilisées à des fins de comparaison significatives. Les propriétés des matériaux et les conditions aux limites utilisées dans cette comparaison sont basées sur des expériences antérieures et des études numériques résumées au tableau III.4.

Les collecteurs de courant, les GDL, les CL, les épaisseurs d'anode, de cathode et de membrane sont également conservées pour toutes les conceptions envisagées dans cette étude afin d'assurer une comparaison équitable. Les détails de la géométrie sont énumérés dans le tableau III.5.

Dans le troisième cas étudié, huit types de chemins du canal d'écoulement ont été envisagés, y compris quatre modèles novateurs et les configurations conventionnelles en tant que conception comparative. L'outil modulaire de conception ANSYS est utilisé pour créer toutes ces formes (Fig. 8.).

L'analyse de cette question est basée sur deux développements majeurs ; dans la première étape une comparaison entre quatre hauteurs de sortie de canal déférent (0,8, 0,6, 0,4 et 0,2 mm) qui a fait une inclinaison entre l'entrée et la sortie de canal, et le canal droit (conventionnel). Dans la deuxième étape le modèle de canal prendre une forme de marche d'escalier ; aussi quatre déférents nombre de marche d'escalier (3SW, 5SW, 7SW et 9SW) sont considérés comme des designs innovants.

Les mêmes conditions de fonctionnement, telles que la température, la pression, les débits de gaz réactifs, sont pris en compte dans les huit configurations géométriques utilisées à des fins de comparaison significatives. Les propriétés des matériaux, les dimensions de PEMFC planaire et les conditions aux limites utilisées dans cette comparaison sont basées sur des expériences antérieures et des études numériques résumées au tableau III.6.

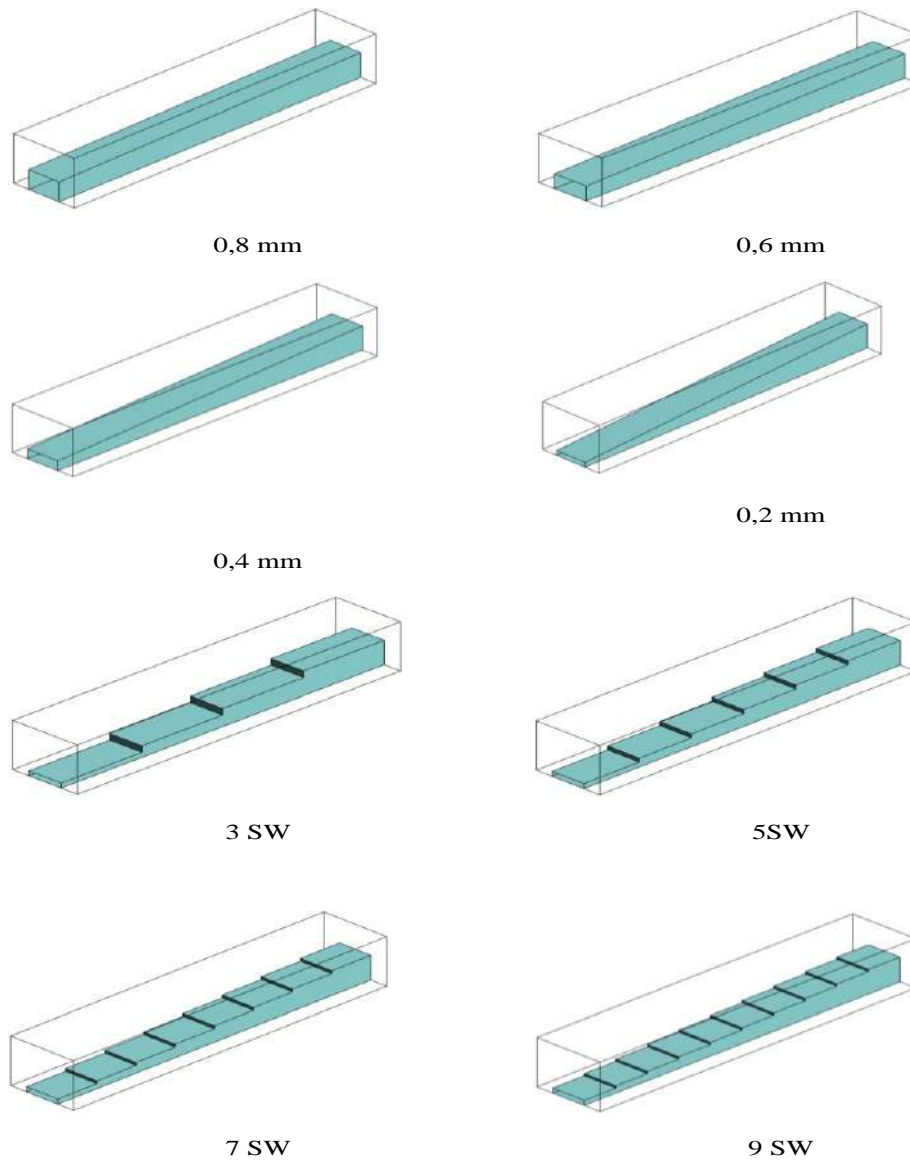


Fig.III.8 Configurations étudiées de chemin d'écoulement dans les canaux.

Tableau III.5 Détails des paramètres géométriques.

Paramètres	Unités	Valeurs
Longueur de cellule	mm	100
Largeur de canal	mm	0,8
Largeur de la zone active	mm	0,8
Surface de section transversale	mm ²	0,64
Épaisseur du collecteur de courant	mm	2
Épaisseur de la couche de diffusion de gaz	mm	0,25
Épaisseur de la couche du catalyseur	mm	0,028
Épaisseur de la membrane	mm	0,23

Tableau III.6 Propriétés des matériaux, dimensions de PEMFC et conditions limites utilisées dans les simulations [50].

Paramètre	Units	Value
Longueur de cellule	mm	100
Langueur de canal	mm	1
Largeur de canal	mm	1
Épaisseur de la couche de diffusion de gaz	mm	0,254
Épaisseur de la couche du catalyseur	mm	0,0287
Épaisseur de la membrane	mm	0,23
Tension de circuit ouvert	V	1,04
Densité de courant d'échange de référence (anode)	A/m ²	7,17
Densité de courant d'échange de référence (cathode)	A/m ²	7.17×10 ⁻⁵
Exposant de concentration (anode)		1
Exposant de concentration (cathode)		1
Coefficient de transfert de charge (anode)	Kmol/m ³	0,000 881 4
Masse d'entrées de gaz d'anode	kg/s	6.0×10 ⁻⁷
Masse d'entrées de gaz cathodique	kg/s	5.0×10 ⁻⁶
Pression de fonctionnement	Pa	101 325
Diffusivité de H ₂	m ² /s	1.1×10 ⁻⁵
Diffusivité O ₂	m ² /s	3,2 ×10 ⁻⁵
Diffusivité H ₂ O	m ² /s	7.35×10 ⁻⁵
Température de fonctionnement	° K	323
Humidité relatif	%	100
Blocage des pores		2
Angle de mouillage (contact)	Degré °	110
Masse volumique de plaque bipolaire	kg/m ³	2719
Capacité thermique spécifique de la plaque bipolaire	J/(kg·K)	871
Conductivité thermique des plaques bipolaires	W/(m·K)	20
Conductivité électrique plaque bipolaire	1/(Ω·m)	20 000
La Résistance de contact de Plaque bipolaire — couche de diffusion de gaz	Ω·m ²	1 ×10 ⁻⁶
Porosité de la couche du catalyseur		0,4
Résistance visqueuse de la couche catalyseur	1/m ²	1,76 ×10 ¹¹
Rapport surface-volume de la couche du catalyseur	1/m	1.127×10 ⁷
Masse volumique de la couche de diffusion de gaz	kg/m ³	321,5
Porosité de la couche de diffusion de gaz		0,6

Conductivité électrique de la couche de diffusion de gaz	$1/(\Omega \cdot m)$	280
Résistance visqueuse de la couche de diffusion de gaz	$1/m^2$	$1,76 \times 10^{11}$
Masse volumique de la membrane	kg/m^3	1980
Conductivité thermique de la membrane	$W/(m \cdot K)$	0,16
Poids équivalent de la membrane	$kg/kmol$	1100

III.2 Configuration tubulaire

III.2.1 Domaine d'étude

Dans cette étude, nous avons utilisé un modèle à une seule cellule, qui se compose d'une membrane, d'une anode et d'une cathode superposées sous forme de trois couches minces tubulaires concentriques et de deux canaux d'écoulement torsadés des deux côtés du MEA tubulaire comme le montre la figure III.9. Les couches de catalyseur sont considérées comme de fines interfaces entre la membrane et les électrodes.

III.2.2 Hypothèses simplificatrices :

Les hypothèses considérées pour un modèle tridimensionnel sont les suivantes :

- L'écoulement dans les canaux est supposé laminaire.
- Le gaz d'entrée est un fluide incompressible.
- Le système fonctionne dans un état stationnaire.
- L'eau dans les canaux et les couches de diffusion de gaz est considérée comme vapeur d'eau.
- L'eau est produite à l'état de vapeur.
- Les couches de diffusion sont homogènes et isotropes.
- La membrane est entièrement humidifiée afin que la conductivité ionique soit constante.

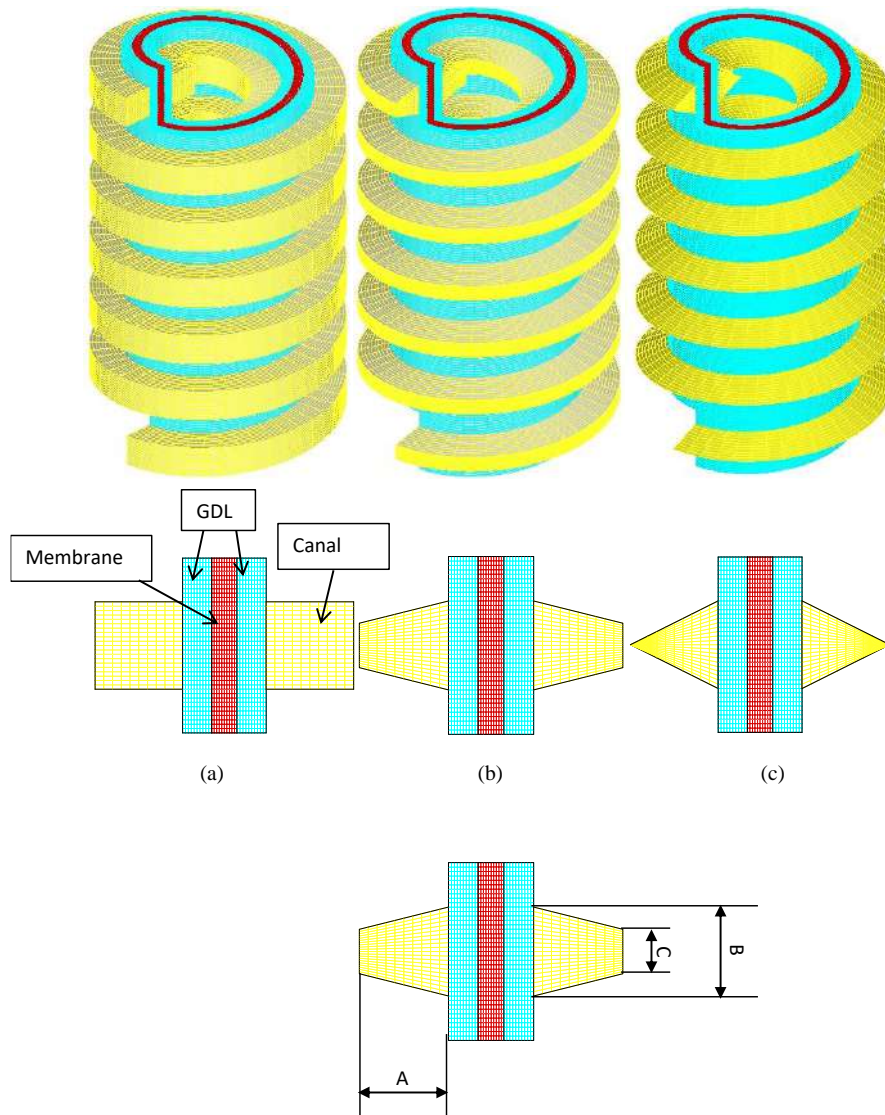


Fig.III.9 Domaine de simulation pour les trois différentes sections transversales étudiées : (a) rectangulaire ; (b) trapézoïdale ; (c) triangulaire.

III.2.3 Formulation mathématiques :

Les équations gouvernantes pour le modèle de pile à combustible PEM tubulaire à l'état stationnaire sont : continuité, conservation de quantité de mouvement et l'équation de transport des espèces. Pour représenter les phénomènes d'électrochimie et de transport à travers la membrane, des termes de source appropriés sont appliqués aux couches de l'anode et du catalyseur cathodique. Comme le modèle est supposé isotherme, l'équation de l'énergie n'est pas prise en compte dans le modèle actuel d'état stationnaire.

Équation de continuité :

$$\frac{\partial(\rho u_r)}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial(\rho u_\theta)}{\partial \theta} + \frac{\partial(\rho u_z)}{\partial z} = 0 \quad (\text{III.31})$$

Équations de quantité de mouvement :

Les équations Navier-Stokes tridimensionnelles sont résolues en coordonnées cylindriques :

$$\frac{\partial \varepsilon \rho u_r}{\partial t} + u_r \frac{\partial \varepsilon \rho u_r}{\partial r} + \frac{u_\theta}{r} \frac{\partial \varepsilon \rho u_r}{\partial \theta} + u_z \frac{\partial \varepsilon \rho u_r}{\partial z} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \varepsilon \mu \frac{\partial u_r}{\partial r} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\varepsilon \mu \frac{1}{r} \frac{\partial u_r}{\partial \theta} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\varepsilon \mu \frac{\partial u_r}{\partial z} \right) + S_r \quad (\text{III.32})$$

$$\frac{\partial \varepsilon \rho u_\theta}{\partial t} + u_r \frac{\partial \varepsilon \rho u_\theta}{\partial r} + \frac{u_\theta}{r} \frac{\partial \varepsilon \rho u_\theta}{\partial \theta} + u_z \frac{\partial \varepsilon \rho u_\theta}{\partial z} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \varepsilon \mu \frac{\partial u_\theta}{\partial r} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\varepsilon \mu \frac{1}{r} \frac{\partial u_\theta}{\partial \theta} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\varepsilon \mu \frac{\partial u_\theta}{\partial z} \right) + S_\theta \quad (\text{III.33})$$

$$\frac{\partial \varepsilon \rho u_z}{\partial t} + u_r \frac{\partial \varepsilon \rho u_z}{\partial r} + \frac{u_\theta}{r} \frac{\partial \varepsilon \rho u_z}{\partial \theta} + u_z \frac{\partial \varepsilon \rho u_z}{\partial z} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \varepsilon \mu \frac{\partial u_z}{\partial r} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\varepsilon \mu \frac{1}{r} \frac{\partial u_z}{\partial \theta} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\varepsilon \mu \frac{\partial u_z}{\partial z} \right) + S_z \quad (\text{III.34})$$

Où S_r , S_θ et S_z représentent le terme source. Il est exprimé pour chaque composante de vitesse comme suit :

$$S_r = - \left(\frac{\mu}{r^2} + \frac{\varepsilon^2 \mu}{k} \right) u_r - \left(\frac{\varepsilon \rho u_\theta^2}{r} + \varepsilon \frac{\partial P}{\partial r} + \mu \varepsilon \frac{2}{r^2} \frac{\partial u_\theta}{\partial \theta} \right) \quad (\text{III.35})$$

$$S_\theta = - \left(\frac{\varepsilon \rho u_r}{r} + \frac{\mu \varepsilon}{r^2} + \frac{\varepsilon^2 \mu}{k} \right) u_\theta - \left(\varepsilon \frac{\partial P}{r \partial \theta} + \mu \varepsilon \frac{2}{r^2} \frac{\partial u_r}{\partial \theta} \right) \quad (\text{III.36})$$

$$S_z = - \frac{\varepsilon^2 \mu}{k} u_z - \varepsilon \frac{\partial P}{\partial z} \quad (\text{III.37})$$

Équation de conservation des espèces

L'équation des espèces représente la conservation de masse pour chaque espèce d'un gaz :

$$\frac{\partial \varepsilon C_k}{\partial t} + u_r \frac{\partial \varepsilon C_k}{\partial r} + \frac{u_\theta}{r} \frac{\partial \varepsilon C_k}{\partial \theta} + u_z \frac{\partial \varepsilon C_k}{\partial z} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \varepsilon D_k \frac{\partial C_k}{\partial r} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\varepsilon D_k \frac{1}{r} \frac{\partial C_k}{\partial \theta} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\varepsilon D_k \frac{\partial C_k}{\partial z} \right) + S_k \quad (\text{III.38})$$

Où S_k le terme source pour l'espèce k , qui peut être oxygène, hydrogène ou eau.

Les diffusivités sont corrigées à l'aide de la formule de correction Bruggemann [77] :

$$D_k^{ef} = D_k \varepsilon^{1.5} \quad (\text{III.39})$$

D_k^{ef} la diffusivité effective de l'espèce k , D_k est la diffusivité de l'espèce k et ε est la porosité de la couche.

La diffusivité de l'oxygène, de l'hydrogène et de l'eau est calculée à l'aide de l'équation III. 40 [77, 122] :

$$D_k = D_k^0 \left(\frac{T}{T_0} \right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{P_0}{P} \right) \quad (\text{III.40})$$

D_k^0 est la diffusivité de l'espèce k à la température et pression de référence $T_0 = 300$ K et $P_0 = 1$ atm, respectivement.

L'épaisseur de la couche du catalyseur est négligeable : elle peut être considérée comme une fine interface entre la membrane et les électrodes [127]. À l'interface de la couche du catalyseur cathodique, les termes sources pour l'eau, l'oxygène et l'hydrogène sont respectivement donnés par :

$$S_{O_2} = -\frac{j_c}{4F} \quad (\text{III.41})$$

$$S_{H_2O} = \frac{j_c}{2F} \quad (\text{III.42})$$

À l'interface de la couche du catalyseur d'anode, le terme source pour l'hydrogène est donné comme suit :

$$S_{H_2} = -\frac{j_a}{2F} \quad (\text{III.43})$$

F est le nombre Faraday et j_a et j_c sont les densités volumétriques du courant à l'anode et à la cathode respectivement.

La densité volumétrique du courant peut être modélisée par l'équation Butler-Volmer [9] :

$$j_c = j_{0,c}^{ref} \left(\frac{C_{O_2}}{C_{O_2}^{ref}} \right)^{\gamma_{O_2}} \left(e^{\frac{\alpha_a F}{RT} \eta_{act,c}} + e^{-\frac{\alpha_c F}{RT} \eta_{act,c}} \right) \quad (\text{III.44})$$

$$j_a = j_{0,a}^{ref} \left(\frac{C_{H_2}}{C_{H_2}^{ref}} \right)^{\gamma_{H_2}} \left(e^{\frac{\alpha_a F}{RT} \eta_{act,a}} + e^{-\frac{\alpha_c F}{RT} \eta_{act,a}} \right) \quad (\text{III.45})$$

Le potentiel cellulaire est déterminé à l'aide de la formule suivante :

$$E_{cell} = E - \eta_{act} - \eta_{ohm} - \eta_{Diff} \quad (\text{III.46})$$

Le potentiel d'équilibre est déterminé à l'aide de l'équation Nernst [14, 121].

$$E = 1.229 - 0.85 \times 10^{-3} (T - 298.15) + 4.3085 \times 10^{-5} T \left[\ln \left(P_{H_2} + \frac{1}{2} P_{O_2} \right) \right] \quad (\text{III.47})$$

L'activation est donnée par : [9, 14, 134]

$$\eta_{act} = - \left[\xi_1 + \xi_2 T + \xi_3 T \ln(C_{O_2}) + \xi_4 T \ln(i) \right] \quad (III.48)$$

Où (i) est la densité actuelle et ξ_1 , ξ_2 , ξ_3 et ξ_4 sont des coefficients paramétriques pour chaque modèle de pile à combustible [9, 134] :

$$\left\{ \begin{array}{l} \xi_1 = -0.948 \\ \xi_2 = 0.00286 + 0.0002 \ln(A_{MEA}) + 4.310^{-5} \ln(C_{H_2}) \\ \xi_3 = 7.610^{-5} \\ \xi_4 = -1.9310^{-4} \end{array} \right. \quad (III.49)$$

La résistance de la membrane, due à la sur potentialité ohmique produite par le transport des ions hydrogène, est donnée par l'expression suivante [9] :

$$\eta_{ohm} = i \frac{\delta_m}{\sigma_m} \quad (III.50)$$

δ_m et σ_m sont respectivement l'épaisseur de la membrane et la conductivité, ce dernier est fonction de la teneur en eau et de la température, sa valeur locale est définie par l'expression empirique suivante [67, 127, 135] :

$$\sigma_m = [0.5139\lambda - 0.326] \exp \left[1268 \left(\frac{1}{303} - \frac{1}{T} \right) \right] \quad (III.51)$$

La teneur en eau λ est donnée par [76, 74, 122, 126, 134] :

$$\left\{ \begin{array}{l} \lambda = 0.043 + 17.10a - 39.85a^2 + 36.00a^3 \quad \text{si } a \leq 1 \\ \lambda = 14.0 + 1.4(a-1) \quad \text{si } a > 1 \end{array} \right. \quad (III.52)$$

L'activité de l'eau peut être exprimée comme suit [9, 118] :

$$a = \frac{C_{H_2O} RT}{P_{sat}} \quad (III.53)$$

La pression de saturation de la vapeur d'eau peut être calculée par l'équation empirique suivante [9, 85, 120, 129] :

$$\begin{aligned} \log_{10} P_{sat} = & -2.1794 + 0.02953(T - 273.15) - 9.1837 \times 10^{-5} \times (T - 273.15)^2 \\ & + 1.4454 \times 10^{-7} \times (T - 273.15)^3 \end{aligned} \quad (III.54)$$

La sur potentielle de diffusion sont donnés par [121, 129] :

$$\eta_{Diff} = \frac{RT}{2F} \ln \left(1 - \frac{i}{i_{max}} \right) \quad (\text{III.55})$$

III.2.4 Conditions aux limites et conditions initiales

La pile est initialement supposée vide (il n'y a pas de réactif) alors que les concentrations initiales des différentes espèces sont nulles. La vitesse est initialisée par une valeur nulle :

$$P_0 = u_{r,0} = u_{\theta,0} = u_{z,0} = C_{k0} = 0 \quad (\text{III.56})$$

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

La pression, la vitesse et les concentrations d'espèces sont imposées (condition Dirichlet) à l'entrée du canal et les flux d'hydrogène et d'oxygène ont été nourris dans la même direction

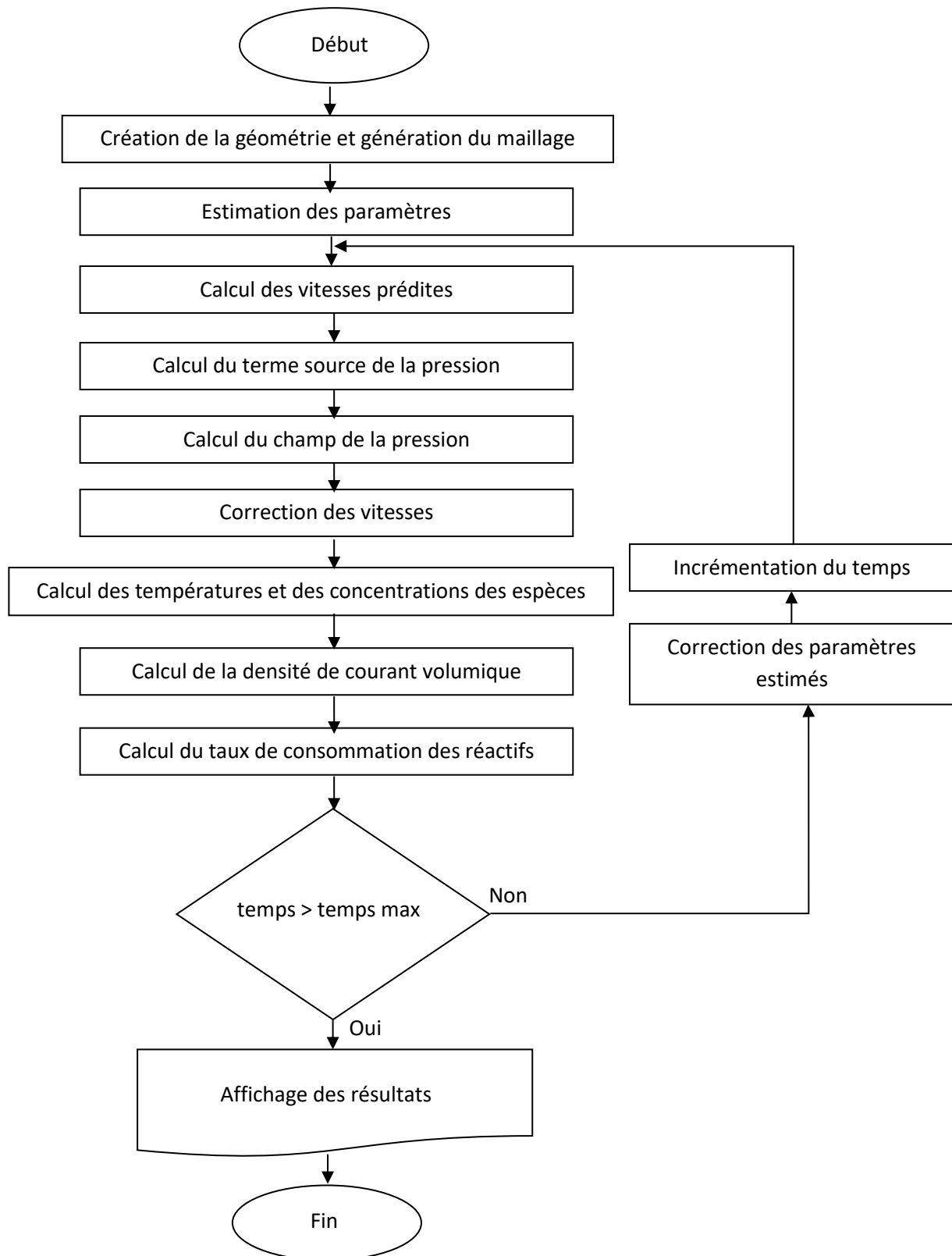
À la sortie des canaux d'écoulement, nous supposons que le gradient de toutes les variables dans la direction d'écoulement est nul (condition Neumann).

$$\frac{\partial u_{\theta}}{r \partial \theta} = \frac{\partial u_r}{r \partial \theta} = \frac{\partial u_z}{r \partial \theta} = \frac{\partial P}{r \partial \theta} = \frac{\partial C_{O_2}}{r \partial \theta} = \frac{\partial C_{H_2}}{r \partial \theta} = \frac{\partial C_{H_2O}}{r \partial \theta} = 0 \quad (\text{III.57})$$

Le gradient de concentration des espèces est nul, ce qui signifie qu'il n'y a pas de matière écoulee à travers les surfaces externes. Les vitesses sur les surfaces extérieures sont nulles en raison de l'état d'adhésion.

III.2.5 Structures de programme

Un programme FORTRAN a été développé pour construire la géométrie du domaine de calcul, pour créer le maillage et résoudre le problème qui régit les équations. Les étapes essentielles du programme de simulation sont illustrées à la **figure III.10**.

**Fig.III.10** Algorithme de calcul.

III.3.6 Résolution numérique

Les équations gouvernantes prennent la forme de l'équation de transport qui peut être écrite comme :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon\rho\phi) + \text{div}(\varepsilon\rho\mathbf{u}\phi) = \text{div}(\Gamma \text{grad}(\phi)) + S_\phi \quad (\text{III.58})$$

La discrétisation des équations de conservation par la méthode du volume fini en coordonnées cylindriques nous conduit à obtenir un ensemble d'équations algébriques linéaires qui doit être résolu. Les équations de conservation ont été discrétisées dans le temps sur un nombre fini d'intervalles de longueur constante $[t_n, t_n + \Delta t]$ selon un schéma implicite qui est inconditionnellement stable. Le schéma a été choisi pour la discrétisation des termes convectifs. Ce schéma a l'avantage qu'il est moins cher que le schéma exponentiel, tout en reproduisant son comportement. Après un réarrangement de la formule (58), nous avons la forme finale :

$$a_p \cdot \phi_p^{t+\Delta t} = a_w \cdot \phi_w^{t+\Delta t} + a_e \cdot \phi_e^{t+\Delta t} + a_s \cdot \phi_s^{t+\Delta t} + a_n \cdot \phi_n^{t+\Delta t} + a_b \cdot \phi_b^{t+\Delta t} + a_t \cdot \phi_t^t + a_p^0 \cdot \phi_p^{t+\Delta t} + S_u \cdot \Delta V \quad (\text{III.59})$$

Le problème des équations de couplage pression-vitesse est résolu à l'aide de l'algorithme de projection [135]. Afin de réduire le problème de dimension de trois dimensions à une dimension, nous avons appliqué la méthode ADI (Alternate Direction Inverse) sur l'ensemble des équations algébriques (59) :

La méthode ADI consiste à diviser chaque pas temporel en trois sous-intervalles : de « t » à « $t + \Delta t/3$ », de « $t + \Delta t/3$ » à « $t + 2\Delta t/3$ » et de $t + 2\Delta t/3$ à « $t + \Delta t$ ». Dans chaque sous-interprétation, une direction est implicite, mais les deux autres directions sont explicites et l'équation (59) peut être écrite dans chaque sous-interprétation comme suit [9] :

Premier subintervalle

$$-aw_{i,j,k} \phi_{i-1,j,k}^{t+\frac{1}{3}\Delta t} + ap_{i,j,k} \phi_{i,j,k}^{t+\frac{1}{3}\Delta t} - ae_{i,j,k} \phi_{i+1,j,k}^{t+\frac{1}{3}\Delta t} = +as_{i,j,k} \phi_{i,j-1,k}^t + an_{i,j,k} \phi_{i,j+1,k}^t + ab_{i,j,k} \phi_{i,j,k-1}^t + at_{i,j,k} \phi_{i,j,k+1}^t + ap_{i,j,k}^0 \phi_{i,i,k}^t + S_{P_{i,j,k}} \Delta V \quad (\text{III.60})$$

Deuxième subintervalle :

La discrétisation sera implicite dans la direction tangentielle θ et explicite dans les deux autres directions :

$$-as_{i,j,k} \phi_{i,j-1,k}^{t+\frac{2}{3}\Delta t} + ap_{i,j,k} \phi_{i,j,k}^{t+\frac{2}{3}\Delta t} - an_{i,j,k} \phi_{i,j+1,k}^{t+\frac{2}{3}\Delta t} = +aw_{i,j,k} \phi_{i-1,j,k}^{t+\frac{1}{3}\Delta t} + ae_{i,j,k} \phi_{i+1,j,k}^{t+\frac{1}{3}\Delta t} + ab_{i,j,k} \phi_{i,j,k-1}^{t+\frac{1}{3}\Delta t} + at_{i,j,k} \phi_{i,j,k+1}^{t+\frac{1}{3}\Delta t} + ap_{i,j,k}^0 \phi_{i,i,k}^{t+\frac{1}{3}\Delta t} + S_{P_{i,j,k}} \Delta V \quad (\text{III.61})$$

Troisième subintervalle :

La discrétisation sera implicite dans la direction tangentielle z et explicite dans les deux autres directions :

$$\begin{aligned}
 -ab_{i,j,k} \phi_{i,j,k-1}^{t+\Delta t} + ap_{i,j,k} \phi_{i,j,k}^{t+\Delta t} - at_{i,j,k} \phi_{i,j,k+1}^{t+\frac{2}{3}\Delta t} = & +aw_{i,j,k} \phi_{i-1,j,k}^{t+\frac{2}{3}\Delta t} + ae_{i,j,k} \phi_{i+1,j,k}^{t+\frac{2}{3}\Delta t} + \\
 as_{i,j,k} \phi_{i,j-1,k}^{t+\frac{2}{3}\Delta t} + an_{i,j,k} \phi_{i,j+1,k}^{t+\frac{2}{3}\Delta t} + ap_{i,j,k}^0 \phi_{i,i,k}^{t+\frac{2}{3}\Delta t} + S_{P,i,j,k} \Delta V & \quad (III.62)
 \end{aligned}$$

Chacune des équations (III.60), (III.61) et (III.62) présente un problème unidimensionnel qui peut être résolu à l'aide de l'algorithme de matrice tridiagonale. Pour chaque étape du temps, l'équation de pression prend la forme de l'équation de Poisson, donc nous l'avons résolu en utilisant la méthode itérative de Gauss-Seidel.

III.2.7 Indépendance de maillage et validation

Pour s'assurer que les solutions sont indépendantes de la taille du réseau, nous avons testé plusieurs grilles de tailles différentes, comme le montre la figure III.11. Une grille avec 590000 cellules a montré une erreur inférieure à 1,5% dans la densité de puissance, qui est l'erreur la plus faible. Cette taille de grille est nécessaire pour fournir une solution acceptable au problème.

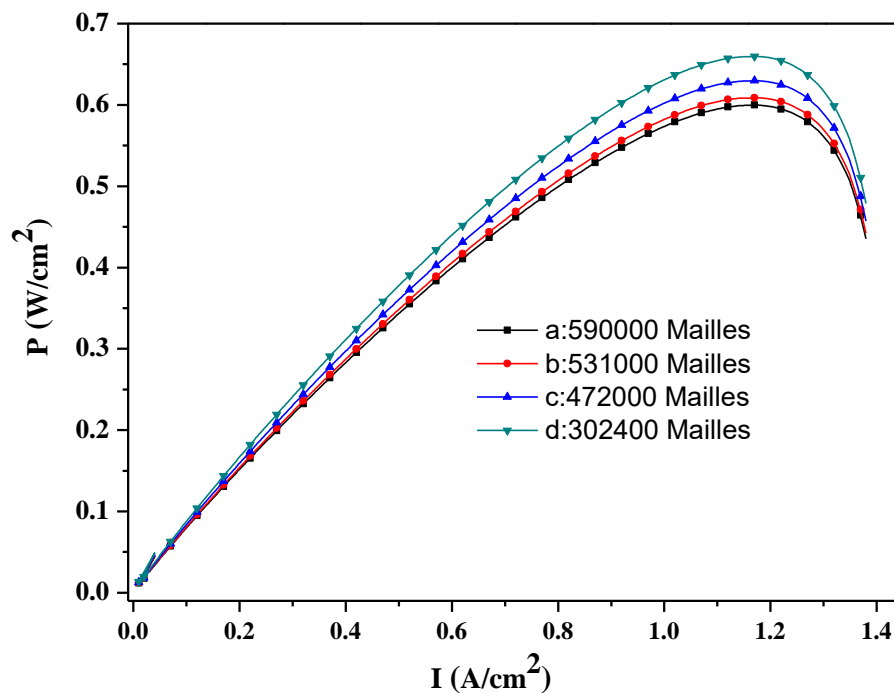


Fig.III.11 Contrôle de l'indépendance du maillage. a :30*295 *40 pour la MEA et 20*295 *20 pour les canaux, b :30*295 *36 pour la MEA et 20*295 *18 pour les canaux, c :30*295 *32 pour la MEA et 20*295 *16 pour les canaux, d :30*295 *28 pour la MEA et 20*295 *14 pour les canaux.

Pour valider le présent modèle, les résultats obtenus pour la courbe de polarisation des piles à combustible PEM ont été comparés aux données expérimentales de Wang et al. [136], qui sont présentées à la figure 12. Toutefois, les résultats indiquent un léger écart par rapport aux expériences, mais montrent une très bonne concordance. Par conséquent, le modèle numérique tridimensionnel peut être utilisé pour analyser avec précision les effets de la forme transversale du canal sur la performance de la pile à combustible tubulaire PEM. Ce comportement indique que le système d'essai PEMFC ne produit pas d'eau liquide même à basse tension de fonctionnement, ce qui confirme que le modèle numérique avec l'hypothèse d'une seule phase d'eau prédit bien les phénomènes de transport à l'intérieur de la cellule.

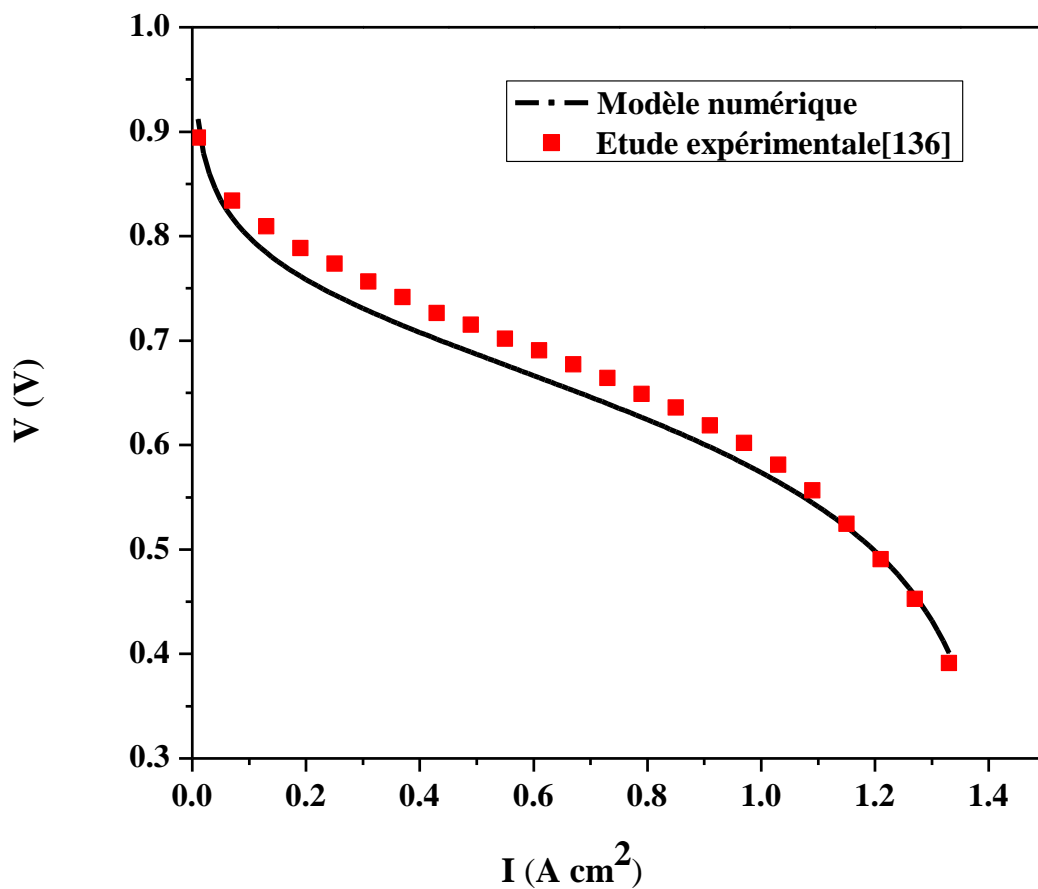


Fig.III.12 Courbe de polarisation de la comparaison entre le modèle numérique et les données expérimentales.

III.2.8 Problématique

Dans la présente étude, une nouvelle géométrie de la pile à combustible PEM tubulaire avec une forme de canal tordu est suggérée pour étudier l'effet de différentes formes de section de canal, à savoir : rectangulaire, trapézoïdale et triangulaire sur la consommation de réactifs et

d'explorer leur potentiel pour être l'une des meilleures configurations candidates pour la prochaine génération de la production de piles à combustible PEM. Le module responsable de la génération de la géométrie et du maillage est illustré à la figure III.13.

Les trois formes de coupe transversale proposées pour le PEMFC ont la même zone active et les mêmes conditions d'exploitation. Les dimensions de chaque composant sont présentées dans le tableau III.7. Les propriétés électrochimiques de la cellule sont également présentées dans le tableau III.8.

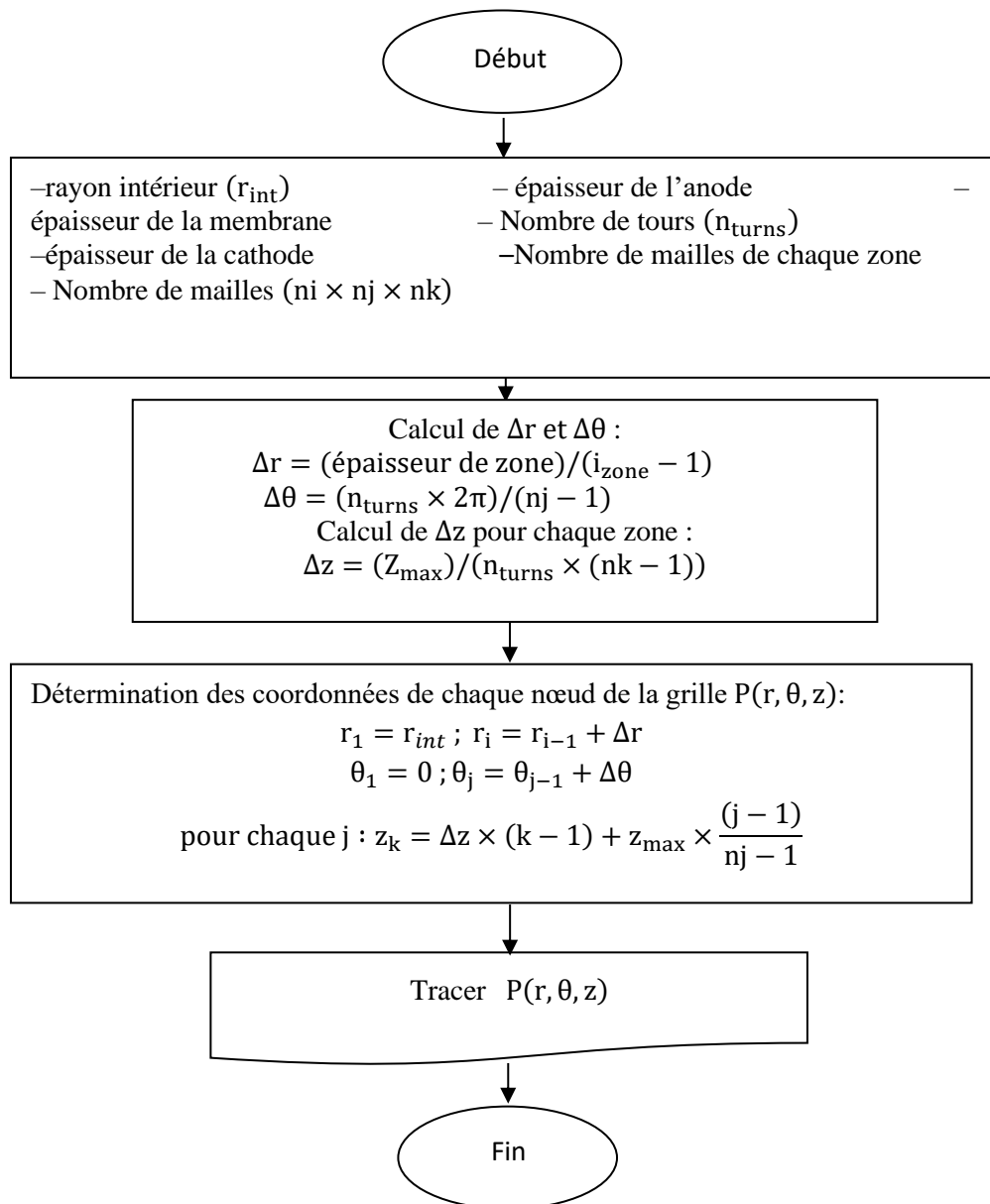


Fig.III.13 Principales étapes de l'algorithme utilisé pour créer la géométrie et le maillage.

Tableau III.7 Dimensions de la section transversale du canal.

Géométrie de la section transversale	Dimensions		
	A (mm)	B (mm)	C (mm)
Rectangulaire	1	1	1
Trapézoïdale	1	1	0,5
Triangulaire	1	1	0

Tableau III.8 Propriétés électrochimiques [75].

Propriété	Unités	Valeurs
Conductivité du catalyseur et GDL	Ω^{-1}/m	53
Porosité GDL	-	0.4
Porosité du catalyseur	-	0.4
Concentration exposant. (Anode)	-	0.5
Concentration exposant. (Cathode)	-	1
Transfer coefficient (Anode)	-	2
Densité de courante référence. (Anode)	A/m^3	10^9
Coefficient de transfert (Cathode)	-	2
Densité de courante référence. (Cathode)	A/m^3	3×10^5
Diffusion de référence de l'hydrogène	m^2/s	1.1×10^{-4}
Diffusivité de référence d'oxygène	m^2/s	3.2×10^{-5}
Diffusivité de référence dans l'eau	m^2/s	7.35×10^{-5}
Perméabilité	m^2	2×10^{-10}

Chapitre IV

Résultats et Interprétations

Introduction

Dans le chapitre précédent, on a dressé les modèles étudiés : modèles monophasique et diphasique concernant le PEMFC planaire tout en utilisant le code commercial FLUENT pour la résolution du système d'équations obtenu. Le modèle monophasique pour le PEMFC tubulaire avec canaux tordus est abordé où un programme Fortran a été développé.

Dans le présent chapitre, les résultats sont présentés en quatre parties, la première partie contient l'optimisation de la géométrie du PEMFC planaire selon un modèle monophasique, les dimensions considérées dans cette optimisation sont inhérentes à la section transversale du canal CHW (hauteur et largeur), les épaisseurs du GDL, du CL et de la membrane. Quant à la deuxième partie, elle concerne l'étude de 30 configurations géométriques de CSC du PEMFC pour déterminer la configuration optimale qui permet de générer la densité de puissance maximale selon un modèle monophasique. Dans la troisième partie, une optimisation de l'angle d'inclinaison de la paroi supérieure de canal est présentée, ainsi que le nombre de marches d'escalier introduit dans la même paroi selon un modèle diphasique. Finalement, une comparaison entre trois types de configurations des canaux (rectangulaire, trapézoïdale et triangulaire) d'une PEMFC tubulaire avec des canaux tordus est présentée dans le but de déterminer la section transversale du canal optimal qui permettra d'avoir la densité de puissance maximale selon un modèle monophasique.

IV.1 Optimisation des dimensions du PEMFC incluant les dimensions micro-canaux

L'objectif de cette partie est de déterminer les gammes de dimensions qui donnent les meilleures productions électriques du PEMFC-SCG. La présentation graphique de tous les cas étudiés a été obtenue par 360 simulations de dimensions PEMFC-SCG pour différentes tensions (de 0,9 V à 0,1 V). Dans cette section, les effets des différents paramètres géométriques tels que les dimensions de la section transversale du canal (hauteur et largeur) et les épaisseurs de GDL, CL et la membrane sur les performances PEMFC-SCG sont présentés.

IV.1.1 Effet du rapport largeur/hauteur du canal transversal

Les simulations du premier cas sont effectuées pour une variation commune de la hauteur et de la largeur du canal de 0,5 à 1,35 mm, avec le maintien d'une valeur constante pour les épaisseurs de GDL, CL et de membrane (0,25 mm, 0,028 mm et 0,23 mm respectivement).

La fig.IV.1a montre les effets du CHW et de la densité de courant sur la densité de puissance du PEMFC-SCG, ainsi que l'impact du CHW et de la tension de la cellule sur la densité de puissance du PEMFC-SCG pour un arrangement co-courant.

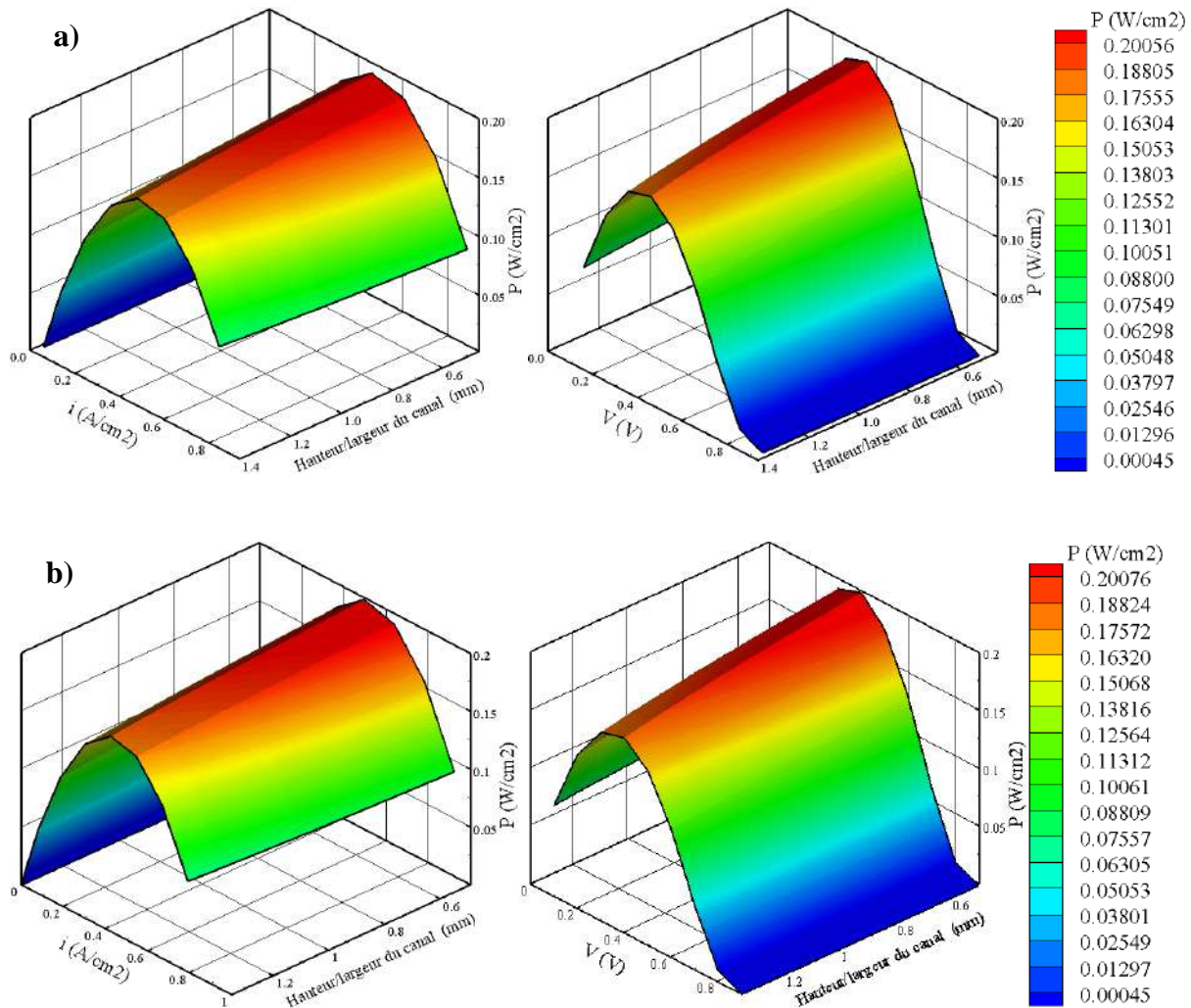


Fig.IV.1 Évolution de la densité de puissance selon le rapport largeur/hauteur de la section transversale du canal, la densité du courant et la tension de la cellule. (a) co-courant (b) contre-courant.

Selon la fig.IV.1a, une amélioration significative de la densité de puissance optimale est obtenue en réduisant la CHW de 1,35 à 0,5 mm. Diminuer le CHW conduit en particulier à augmenter la chute de la pression à travers les canaux qui provoque deux situations : améliorer les performances de la cellule, plus de puissance pour pomper les réactifs qui peuvent diminuer la densité de puissance nette du PEMFC-SCG (clairement observé dans le Tableau IV.1).

Il existe une relation entre la chute de pression dans la cellule et la densité de puissance nécessaire au pompage [121] :

$$W_p = \frac{\Delta P_{tot} A_{ch} v}{A_{tot}} \quad (1)$$

Tableau IV.1 Influence de chaque dimension sur la vitesse d'entrée, la chute de pression, la puissance de pompage et la puissance nette de sortie de la PEMFC.

PEMFC dimensions	Dimensions (mm)	Vitesse d'entrée V_{in} (m s ⁻¹)	Chute de pression ΔP_{tot} (Pa)	Densité de puissance W (W m ⁻²)	Puissance de pompage W (W m ⁻²)	Densité de puissance nette W (W m ⁻²)
Rapport largeur / hauteur du canal	0.5/0.5	10.09	855.65	2005.6	10.79	1994.81
	0.75/0.75	4.51	172.85	1929.2	2.19	1927.01
	1/1	2.54	55.34	1844.4	0.703	1843.69
	1.25/1.25	1.62	22.85	1742	0.29	1741.71
	1.35/1.35	1.39	16.82	1689.6	0.21	1689.39
Épaisseur de GDL	0.15	2.54	55.44	1627.2	0.704	1626.49
	0.20	2.54	55.79	1850.4	0.708	1849.69
	0.25	2.54	55.34	1844.4	0.702	1843.69
	0.30	2.54	54.91	1840	0.697	1839.30
	0.35	2.54	54.51	1836	0.692	1835.30
Épaisseur de catalyseur	0.008	2.54	55.26	1560	0.701	1559.29
	0.018	2.54	55.31	1744.4	0.702	1743.69
	0.028	2.54	55.34	1844.4	0.704	1843.69
	0.038	2.54	55.36	1902.4	0.703	1901.69
	0.048	2.54	55.38	1936.8	0.703	1936.09
Épaisseur de membrane	0.10	2.54	54.90	3188.8	0.697	3188.10
	0.13	2.54	55.05	2748	0.699	2747.30
	0.20	2.54	55.27	2049.2	0.701	2048.49
	0.23	2.54	55.34	1844.4	0.702	1843.69
	0.30	2.54	55.46	1497.6	0.704	1496.89

Où W_p est la perte de densité de puissance due à la chute de pression, ΔP_{tot} est la chute de pression totale à travers la cellule, A_{ch} est la surface d'entrée de la section transversale, A_{tot} est la surface de zone de réaction totale et v est la vitesse d'entrée du comburant.

En outre, lorsque les réactifs sont fournis dans un arrangement contre-courant, on observe un résultat similaire, on remarque une légère augmentation de la valeur de densité de puissance optimale par rapport à l'arrangement de co-courant. (Fig.IV.1b).

La densité de puissance maximale est de 0,20056 W/cm², elle est obtenue par une densité de courant de 0,5014 A/cm² et une tension de 0,4 V pour un arrangement co-courant, et elle est de 0,20076 W/cm² pour une densité de courant de 0,50190 A/cm² et une tension de 0,4 A selon un arrangement contre-courant.

IV.1.2 Effet de l'épaisseur du GDL

Dans ce second cas, la valeur d'épaisseur GDL est prise comme une variable de 0,15 à 0,35 mm et toutes les autres dimensions sont maintenues fixes. Tableau IV.1 et la fig.IV.2a illustrent les effets de la densité de courant et de l'épaisseur de GDL sur la densité de puissance PEMFC-SCG, ainsi que les effets de l'épaisseur de GDL et de la tension sur la densité de puissance PEMFC-SCG selon un arrangement co-courant.

Dans la fig.IV.2a, la densité de puissance reste presque constante pour l'épaisseur de GDL comprise entre 0,20 et 0,35 mm, et lorsque l'épaisseur du GDL est plus mince (0,2 mm), la densité de puissance se détériore. L'augmentation de l'épaisseur de GDL $> 0,2$ mm conduit à une amélioration de la performance de la PEMFC-SCG en raison des pertes de transport de réactifs à travers la GDL.

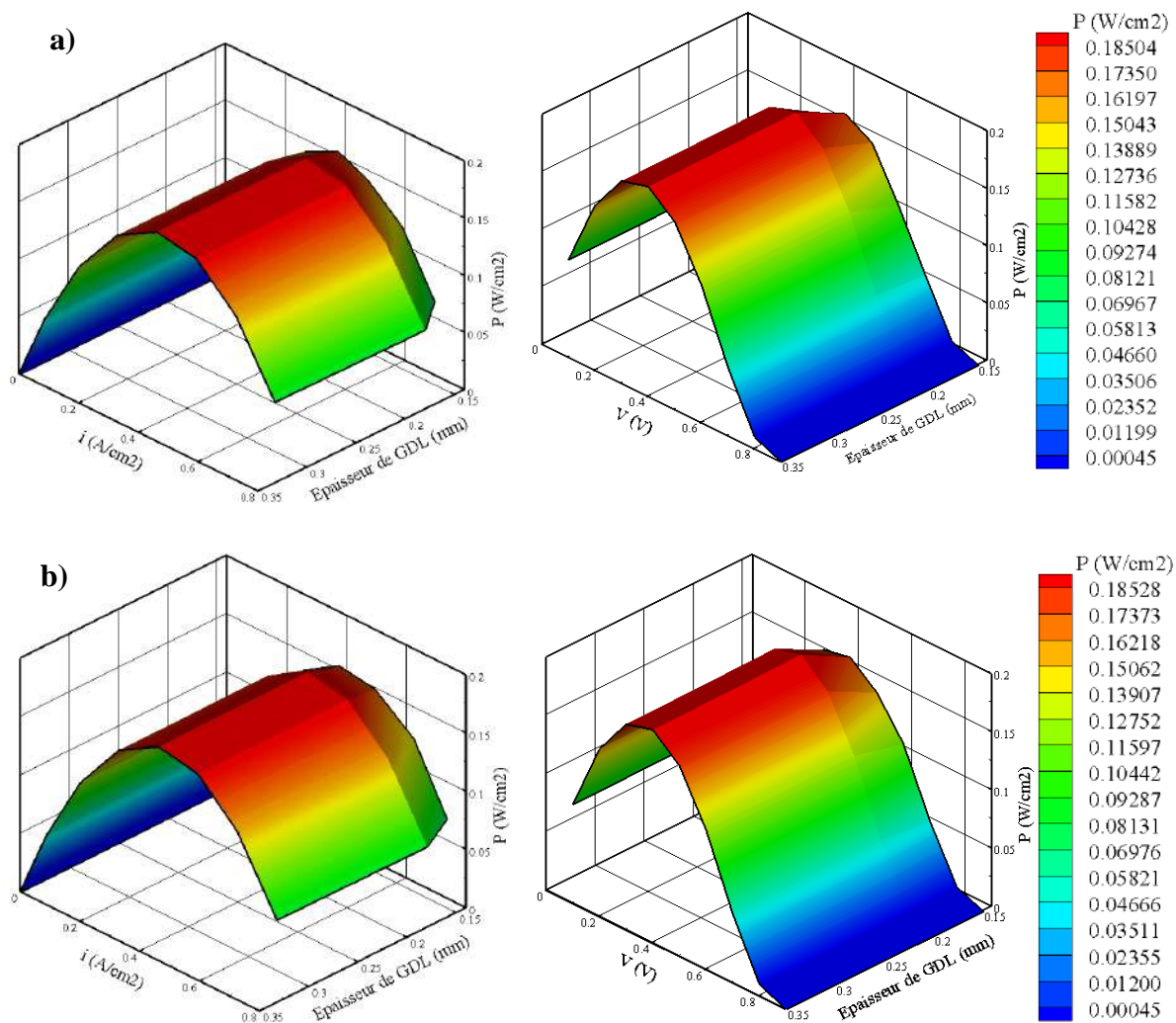


Fig.IV.2 Évolution de la densité de puissance par rapport à l'épaisseur de GDL, la densité de courant et la tension de la cellule. (a) co-courant ; (b) contre-courant.

Dans le cas où les réactifs sont fournis en contre-courant, on obtient un résultat similaire avec une légère augmentation de la densité de puissance maximale (fig.IV.2b). La densité de puissance optimale est de $0,18504 \text{ W/cm}^2$, elle est obtenue par une densité de courant de $0,46260 \text{ A/cm}^2$ et une tension de $0,4 \text{ V}$ pour un arrangement co-courant, et elle est de $0,18528 \text{ W/cm}^2$ pour un arrangement contre-courant selon une densité de courant de $0,46320 \text{ A/cm}^2$ et la même valeur de tension ($0,4 \text{ V}$).

IV.1.3 Effet de l'épaisseur de la couche de catalyseur

Pour le troisième cas, l'effet d'épaisseur CL, la densité de courant et la tension sur la densité de puissance de la PEMFC-SCG sont étudiés pour les arrangements co-courant et contre-courant afin d'obtenir la dimension optimale de CL qui produise la plus haute performance de PEMFC-SCG (fig.IV.3).

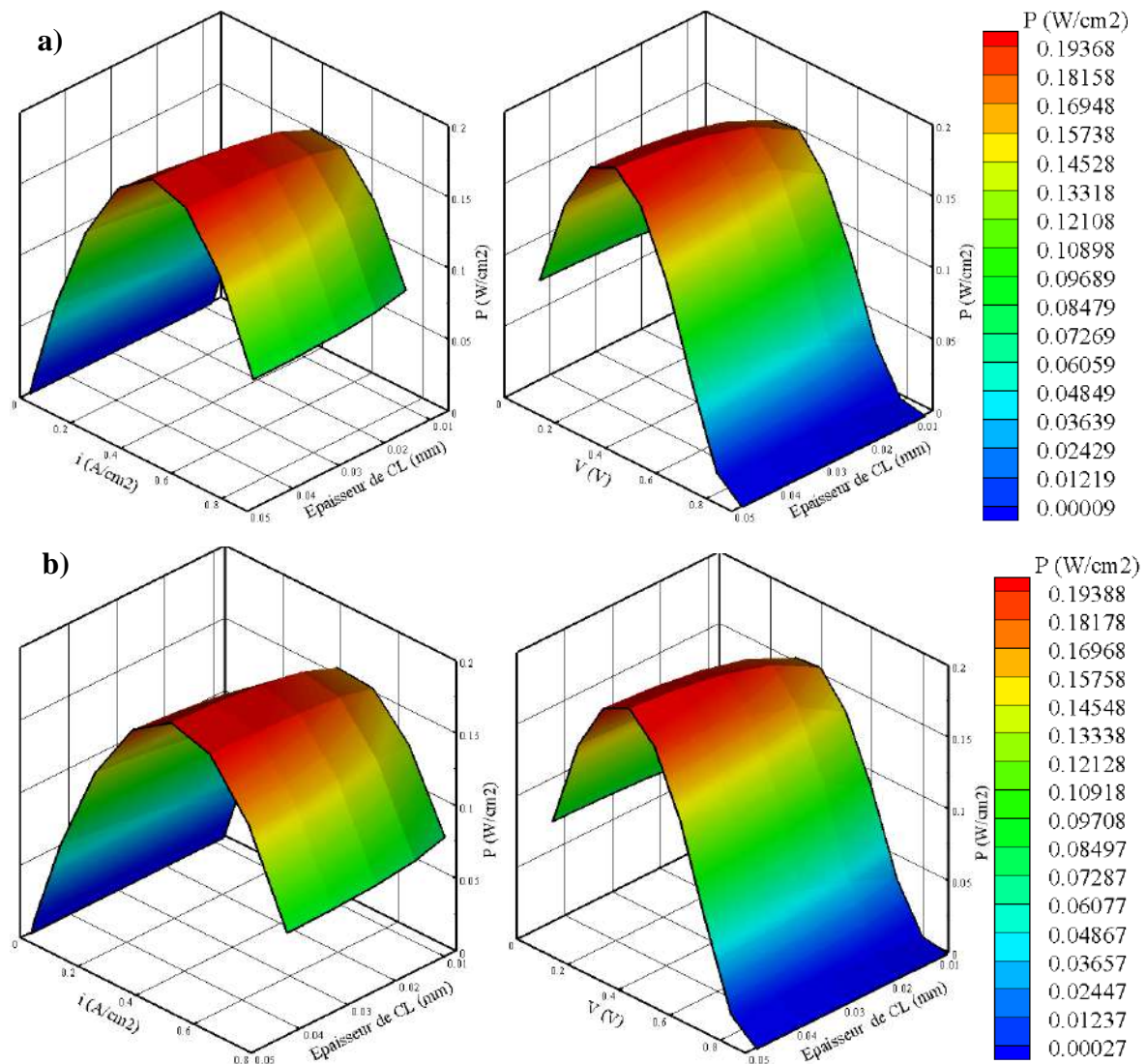


Fig.IV.3 Évolution de la densité de puissance par rapport à l'épaisseur du CL, la densité de courant et la tension de la cellule. (a) co-courant ; (b) contre-courant.

La fig.IV.3a montre que l'épaisseur du CL et la densité de courant influencent la densité de puissance du PEMFC-SCG, ainsi que l'impact de la tension et l'épaisseur du CL sur la densité de puissance du PEMFC-SCG selon un arrangement co-courant.

La fig.IV.3a affiche que la densité de puissance du PEMFC-SCG augmente légèrement lorsque le CL devient plus épais que 0,018 mm. Cela signifie qu'une augmentation de l'épaisseur de la couche du catalyseur cathodique entraîne une augmentation de la résistance du transfert de masse ; cela affecte fortement le transport de masse des espèces et le taux de réaction de cette électrode, ce qui peut affecter considérablement la performance des cellules. Par ailleurs, lorsque le CL devient trop mince, inférieure à 0,018 mm, les réactifs réagissent de façon incomplète et le transport de masse est sévère, ce qui aggrave l'exploitation des PEMFC-SCG et entraîne une diminution du rendement du PEMFC-SCG.

Les mêmes résultats sont obtenus en utilisant un arrangement contre-courant par rapport à l'arrangement de co-courant avec une petite différence dans les valeurs maximales de la puissance de PEMFC-SCG et les densités de courant (fig.IV.3b). La densité de puissance maximale de la PEMFC-SCG de 0,19368 W/cm² est obtenue par une densité de courant de 0,48420 A/cm² et une tension de 0,4 V pour un arrangement co-courant, et un maximum de densité de puissance de 0,19388 W/cm² est obtenu par une densité de courant de 0,48470 A/cm² et la même tension pour un arrangement contre-courant.

IV.1.4 Effet de l'épaisseur de la membrane

Dans ce dernier cas, l'influence de l'épaisseur de la membrane sur la densité de puissance du PEMFC-SCG est examinée pour déterminer l'épaisseur optimale qui correspond à la densité de puissance maximale du PEMFC-SCG. Toutes les dimensions des éléments utilisés sont rassemblées dans le tableau IV.1.

La fig.IV.4a présente les effets de la tension, la densité de courant et l'épaisseur de la membrane sur la densité de puissance du PEMFC-SCG en tenant compte d'un arrangement co-courant. À partir de la fig.IV.4a, il est clairement démontré qu'une réduction de l'épaisseur de la membrane de 0,30 à 0,10 mm diminue la résistance du transport des protons à travers la membrane, ce qui entraîne une amélioration des performances du PEMFC-SCG. De plus, l'épaisseur de la membrane a le plus incidence sur la performance du PEMFC-SCG, et une membrane d'épaisseur inférieure à 0,10 mm est fortement recommandée pour le PEMFC-SCG.

Les effets de l'épaisseur de la membrane, la densité de courant et la tension sur la densité de puissance du PEMFC-SCG selon un arrangement contre-courant sont illustrés dans la fig.IV.4b.

Dans le cas d'un arrangement contre-courant, les mêmes comportements de l'arrangement co-courant sont obtenus avec une légère augmentation des valeurs de densité de puissance. La densité de puissance maximale est de $0,31888 \text{ W/cm}^2$, elle est obtenue par une densité de courant de $0,79720 \text{ A/cm}^2$ et une tension de $0,4 \text{ V}$ pour un arrangement co-courant, et un maximum de $0,31956 \text{ W/cm}^2$ est obtenu par une densité de courant de $0,79890 \text{ A/cm}^2$ et la même tension pour un arrangement contre-courant.

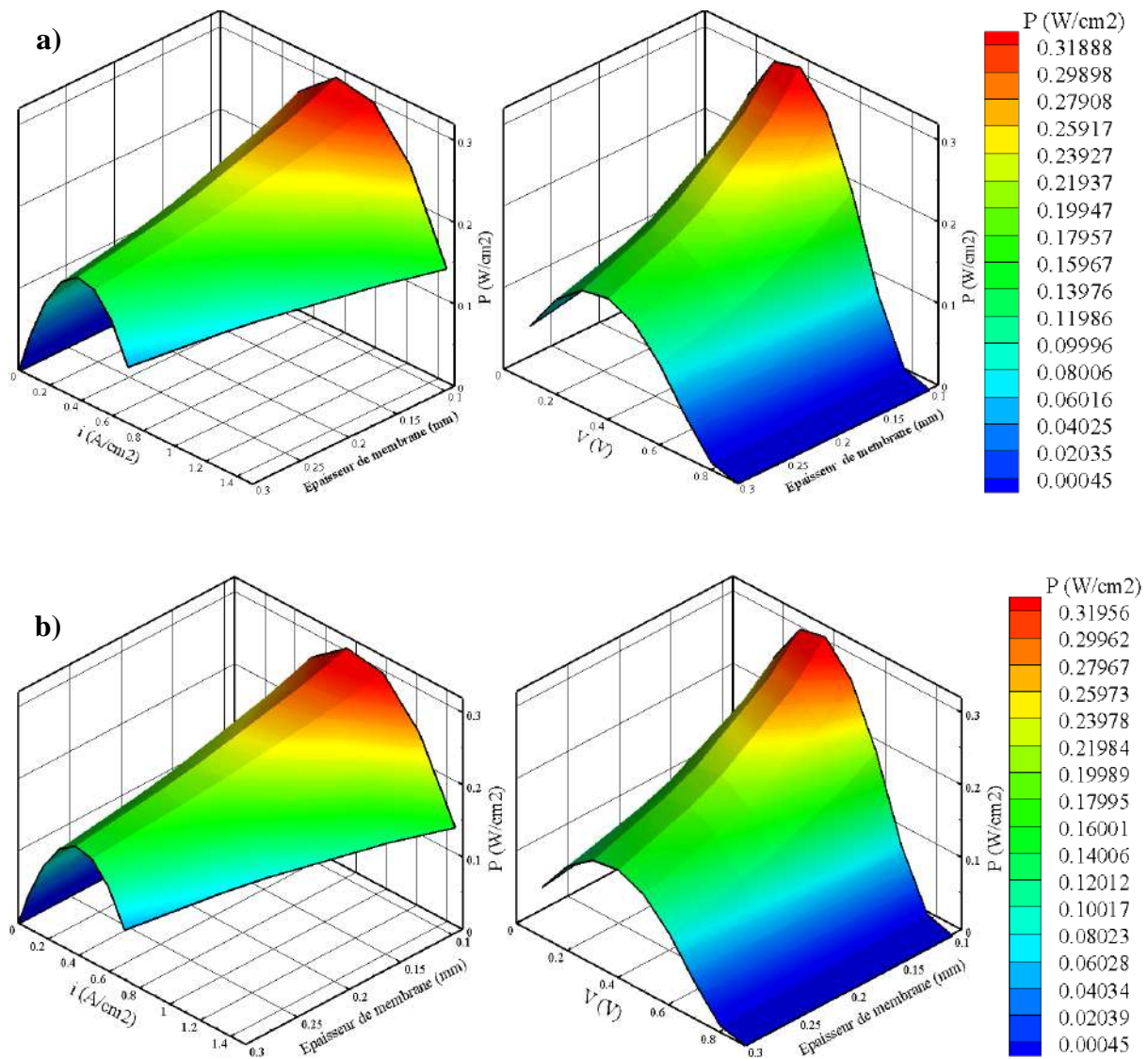


Fig.IV.4 Évolution de la densité de puissance par rapport à l'épaisseur de la membrane, la densité de courant et la tension de la cellule. (a) co-courant ; (b) contre-courant.

Selon les résultats obtenus et présentés dans les figs. IV 1, 2, 3 et 4, il est conclu que l'arrangement de contre-courant donne le rendement optimal PEMFC-SCG.

Comme dernière étape, toutes les dimensions optimales sont rassemblées en tenant compte un arrangement contre-courant afin d'obtenir la meilleure performance. En outre, les mauvaises

dimensions des cas précédents avec un arrangement co-courant sont rassemblées pour obtenir la performance déficiente du PEMFC-SCG (tableau IV.2).

Tableau IV.2 Meilleures et pires dimensions.

Paramètres	Unités	Symbol	Meilleures	Pires
Rapport largeur/hauteur du canal	mm	W/H	0.5/0.5	1.35/1.35
Épaisseur de GDL	mm	D_{GDL}	0.20	0.15
Épaisseur de catalyseur	mm	D_{CL}	0.048	0.008
Épaisseur de membrane	mm	D_{MEM}	0.10	0.30
Arrangement	-	-	contre-courant	co-courant

La Fig.IV.5 montre la courbe de polarisation (densités de puissance/courant) obtenue par les meilleures et les mauvaises dimensions du PEMFC-SCG. Cette figure montre clairement que la densité de puissance obtenue par les dimensions optimales PEMFC-SCG est supérieure à celle obtenue par les non avantageuses dimensions, ce qui démontre l'importance des dimensions PEMFC-SCG. Pour plus de détails, voir annexe I (Fig.AI.1, Fig.AI.2 et Fig.AI.3).

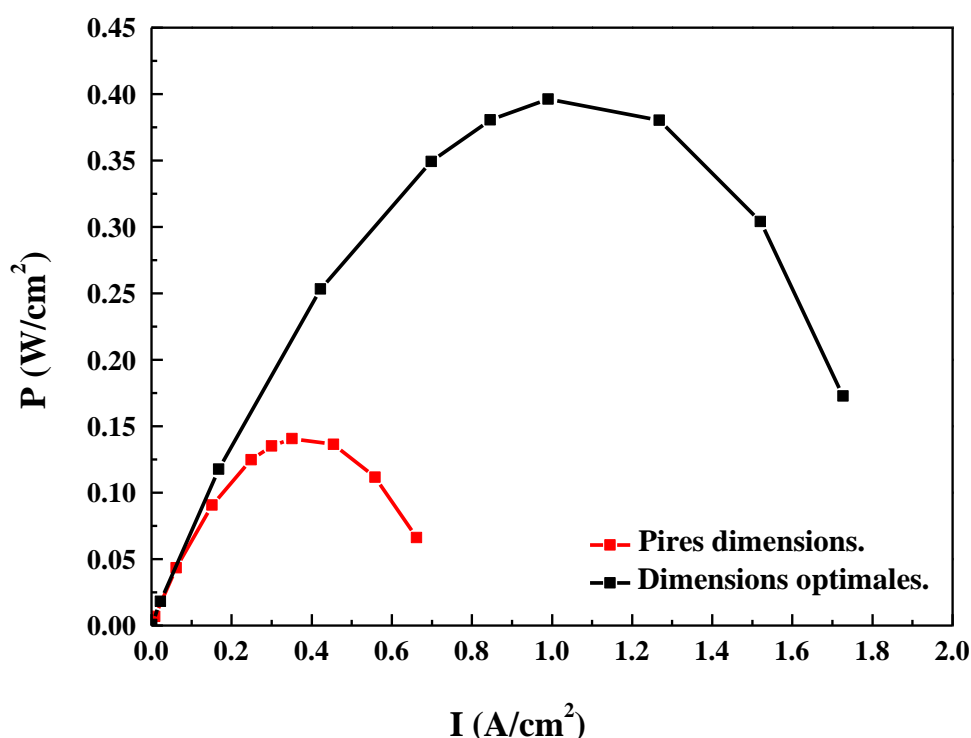


Fig.IV.5 Courbe de polarisation de PEMFC-SCG selon les meilleures et les pires dimensions.

La densité de puissance maximale obtenue selon les dimensions optimales PEMFC-SCG et l'arrangement contre-courant est d'environ $0,39616 \text{ W/cm}^2$ pour une densité de courant de $0,99040 \text{ A/cm}^2$. La densité de puissance maximale obtenue selon les dimensions inadéquates du PEMFC-SCG et l'arrangement co-courant est d'environ $0,14056 \text{ W/cm}^2$ pour une densité

de courant de $0,35140 \text{ A/cm}^2$. Ceci conduit à conclure que la performance du PEMFC-SCG peut être améliorée de 181,84% en se basant uniquement sur ces dimensions étudiées.

IV.2 Optimisation de la forme de la section transversale des micro-canaux

Dans ce sous chapitre et comme mentionné précédemment dans celui de III.2.7 du chapitre III, concernant les configurations géométriques de CSC étudiées, les 30 configurations simulées en utilisant ANSYS-FLUENT sont examinées en termes de densités de puissance, de chutes de pression et d'autres caractéristiques de transport pour obtenir et voir l'effet des configurations géométrique de CSC sur la densité de puissance produite par le PEMFC.

La comparaison entre les 30 configurations étudiées est présentée en six sous-sections. La première sous-section compare les configurations simples, qui sont des configurations bien connues dans la littérature (Rct, Trg, Trp, Itrp, Hlp), en plus la nouvelle configuration proposée (moitié inversée de l'ellipse). Tandis que la deuxième sous-section compare les configurations qui ont une base de CSC rectangulaire (Rct-Trg, Rct-Trp, Rct-Itrp, Rct-Hlp, Rct-Ihlp). La troisième sous-section compare les configurations qui ont une base de CSC trapézoïdale qui est la même base de la géométrie triangulaire (Trp-Rct, Trp-Itrp, Trp-Hlp, Trp-Ihlp). La quatrième compare les configurations qui ont une base de CSC trapézoïdale inversée (Itrp-Rct, Itrp-Trg, Itrp-Trp, Itrp-Hlp, Itrp-Ihlp). La cinquième sous-section compare les configurations qui ont une base semi-elliptique (Hlp-Rct, Hlp-Trg, Hlp-Trp, Hlp-Itrp, Hlp-Ihlp). La dernière sous-section compare les configurations qui ont une base semi-elliptique inversée (Ihlp-Rct, Ihlp-Trg, Ihlp-Trp, Ihlp-Itrp, Ihlp-Hlp).

Afin de mieux comparer les sous-sections présentées et de mieux évaluer les configurations de CSC étudiées, les densités de puissance maximales, des configurations triangulaire et rectangulaire ont été intégrées dans chaque comparaison, car la configuration de CSC triangulaire est considérée comme la meilleure configuration en terme de performance, et la configuration de CSC rectangulaire est la plus utilisée dans la littérature.

IV.2.1 Géométries simples de la section transversale des micro-canaux

Les courbes I-P obtenues par les configurations de CSC simples sont présentées dans la fig.IV.6 a. Il ressort clairement de cette figure qu'à de faibles densités de courant ($0 - 0,5 \text{ A/cm}^2$), toutes les courbes se coïncident presque, ce qui indique que les formes de CSC n'ont pas d'effets importants sur les performances PEMFC et que toutes les configurations de CSC ont donné des densités de puissance presque similaires.

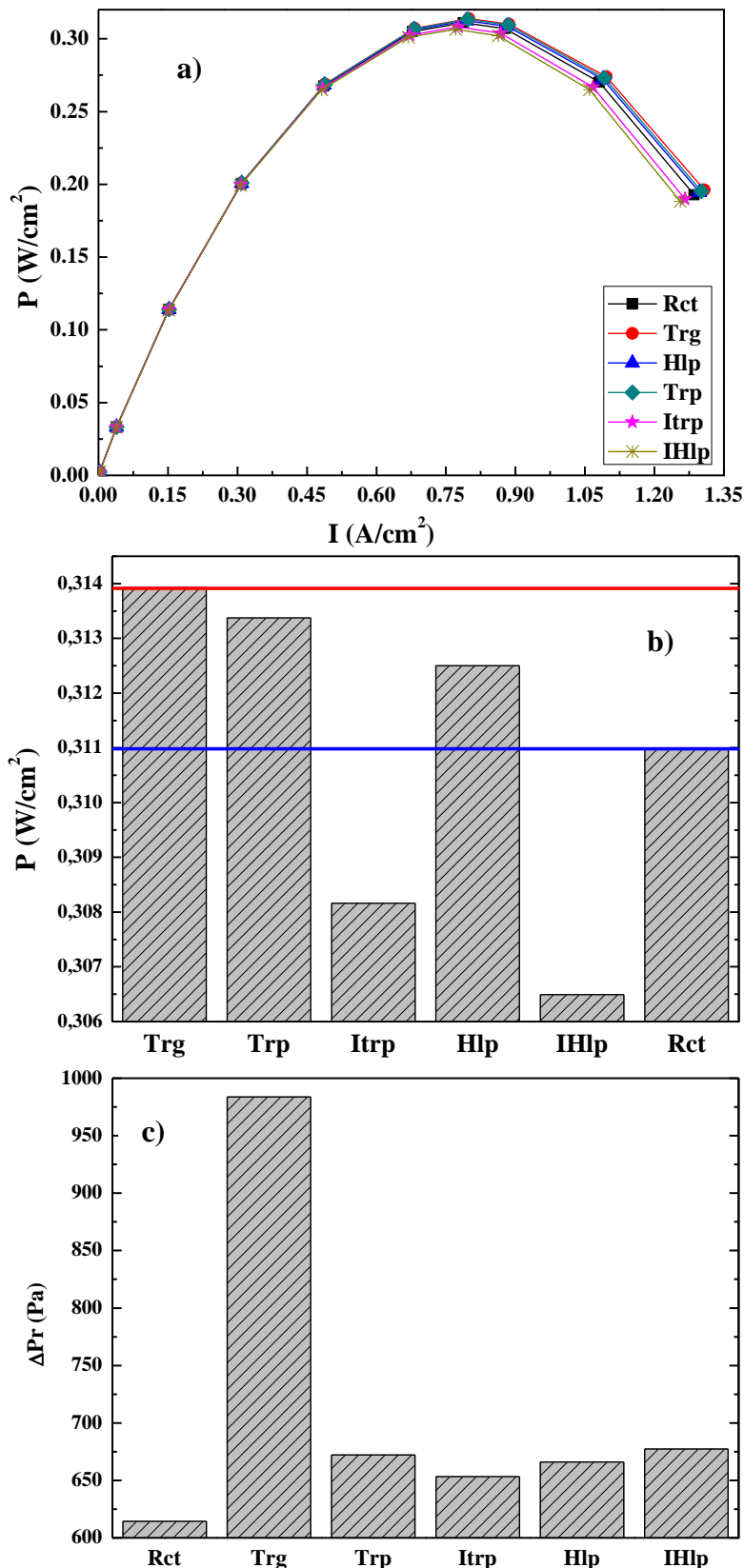


Fig.IV.6 Comparaison entre les configurations de CSC simples. a) courbes I-P, b) densité de puissance maximale, c) chute de pression.

Aux moyennes et hautes densités de courant (0,5 - 1,3 A /cm²), la configuration de CSC devient un paramètre d'influence, qui a un effet notable sur la densité de puissance. Les densités de

puissance les plus élevées sont obtenues par une densité de courant d'environ $0,785 \text{ A/cm}^2$. De plus, la différence entre les densités de puissance obtenues par les différentes configurations de CSC est proportionnelle à la densité du courant (fig.IV.6 a).

La densité de puissance la plus élevée est indiquée par la configuration de CSC triangulaire, elle est de $0,314 \text{ W/cm}^2$. La densité de puissance la plus faible est obtenue par la configuration de CSC de forme demi-section elliptique inversée, elle est de $0,306 \text{ W/cm}^2$.

L'utilisation des configurations trapézoïdales et semi-elliptiques de CSC permet d'obtenir de meilleures densités de puissance par rapport à la configuration de CSC rectangulaire. Les densités de puissance produites par les configurations de CSC trapézoïdal sont supérieures à celles obtenues par la configuration de CSC semi-elliptique. De plus, la densité de puissance produite selon une configuration de CSC trapézoïdal inversé est inférieure à celle obtenue par la configuration de CSC rectangulaire. Figures 6.a et 6.b.

La figure 6.c montre les chutes de pression produites selon les configurations de CSC simples. À partir de cette figure, il convient de noter que la forme de CSC triangulaire provoque la plus grande chute de pression par rapport aux autres formes, elle est d'environ $983,7 \text{ Pa}$. La forme du CSC rectangulaire provoque la plus petite chute de pression ($614,3 \text{ Pa}$). Néanmoins, les baisses de pression obtenues par les autres configurations de CSC (trapézoïdale, trapézoïdale inversée, demi-elliptique et demi elliptique inversée) sont presque identiques et la différence entre ces chutes de pression ne dépassant pas 63 Pa .

La forme de CSC triangulaire force les réactifs à s'écouler à travers une seule trajectoire, ce qui rend la vitesse maximale distribuée près du GDL par rapport aux autres configurations de CSC simples. (Fig. AII.5 Annexe II). De plus, cette configuration de CSC augmente la vitesse maximale de sortie, ce qui entraîne une diminution de la pression totale de sortie et une augmentation de la chute de pression par rapport aux autres configurations de CSC simples (Voir fig. AII.5 et fig. AII.6 en Annexe II). Cela conduit à une augmentation du transfert de masse par convection en raison de l'importance de la vitesse des gaz réactifs qui conduit logiquement à une distribution plus homogène de l'oxygène et de l'hydrogène, ainsi qu'une plus grande concentration d'eau résultante de la haute consommation des réactifs par rapport aux autres configurations de CSC simples (voir fig. AII.1, fig. AII.2 et fig. AII.3 en Annexe II). Par conséquent, la configuration de CSC triangulaire permet une amélioration de la performance du PEMFC par rapport aux autres configurations de CSC simples. De plus, la configuration de CSC triangulaire montre des valeurs de température légèrement inférieures à celles des autres configurations de CSC simples (cf. fig. AII.6 en Annexe II). Même si la densité de puissance du PEMFC est proportionnelle à la température dans les zones de réactions, cela n'affecte pas

la densité de puissance produite, car la différence de température entre toutes les configurations de CSC simples ne dépasse pas 0,2 K.

IV.2.2 Géométrie à base rectangulaire

De la fig.IV.7 a, les densités de puissance les plus élevées générées selon des formes de la base de canaux de CSC rectangulaires sont obtenues par une densité de courant d'environ 0,785 A /cm².

La densité de puissance la plus élevée est portée par la configuration de CSC Rct-Trp, qui est presque de 0,312 W /cm². La plus faible densité de puissance est obtenue par la configuration de CSC Rct-I-Hlp ; elle est presque de 0,308 W /cm². L'utilisation des formes de CSC Rct-Trp, Rct-Trg et Rct-Hlp permet d'obtenir de meilleures densités de puissance par rapport à la forme de CSC rectangulaire. Les densités de puissance obtenues par les formes de CSC Rct-I-Trp et Rct-I-Hlp sont inférieures à celle obtenue par la forme de CSC rectangulaire. De plus, toutes les densités de puissance obtenues à l'aide des formes de CSC de base rectangulaire sont inférieures à celles reportées par les formes triangulaires des CSC (fig.IV.7 a et 7 b).

Les chutes de pression générées de l'entrée à la sortie des PEMFC ayant une configuration de CSC de base rectangulaire sont présentées dans la fig.IV.7 c. Il convient de noter que la configuration Rct-I-Hlp et CSC provoque une chute de pression importante par rapport aux configurations (Rct-Trp, Rct-I-Trp, Rct-Trg et Rct-Hlp). La chute de pression maximale est d'environ 733,7 Pa. La plus petite chute de pression est provoquée par la forme de CSC Rct-Trp; d'environ 626,1 Pa. Même si la forme Rct-Trp du CSC provoque la plus petite chute de pression parmi toutes les configurations de CSC à base rectangulaire, elle permet d'obtenir la plus grande densité de puissance, en raison des vitesses de gaz considérables aux interfaces électrode/canal par rapport aux autres formes de CSC de base rectangulaire. (Voir fig. AII.11 et 12 en Annexe II). Ceci conduit logiquement à une augmentation du transfert de masse convectif des gaz réactifs, ainsi qu'à la concentration d'eau résultante de la conversion et la consommation des réactifs (voir fig. AII.7, 8 et 9 en Annexe II). De plus, la configuration de CSC Rct-Trp présente des valeurs de température plus élevée au niveau d'EMA comparée aux autres formes de CSC à base rectangulaire (voir fig. AII.12 en Annexe II). Cela contribue également à améliorer la densité de puissance du PEMFC.

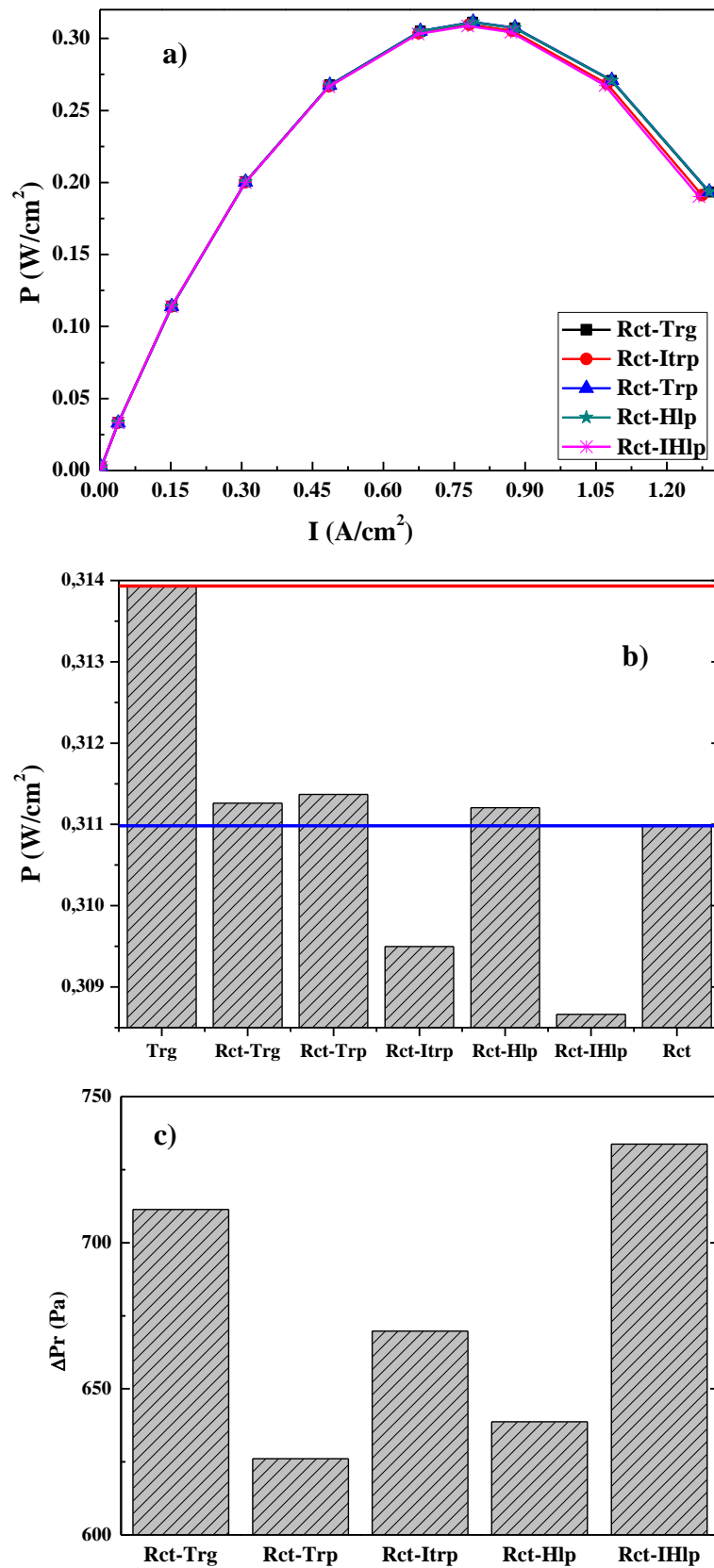


Fig.IV.7 Comparaison entre les configurations de CSC de base rectangulaire. a) courbes I-P, b) densité de puissance maximale, c) chute de pression.

IV.2.3 Géométrie à base trapézoïdale

Les courbes I-P obtenues selon les configurations de CSC à base trapézoïdale sont présentées par la fig.IV.8 a. Les densités de puissance les plus élevées obtenues utilisant les formes de CSC de base trapézoïdale sont obtenues par une densité de courant d'environ 0,797 A/cm². La densité de puissance la plus élevée est indiquée par la configuration de CSC Trp-I-Trp, qui atteint presque 0,315 W / cm². La plus faible densité de puissance est obtenue par la configuration de CSC Trp-I-Hlp ; elle est presque 0,312 W / cm². L'utilisation des formes de CSC de base trapézoïdale permet d'obtenir de meilleures densités de puissance par rapport à la forme de CSC rectangulaire. De plus, la configuration de CSC Trp-I-Trp montre de meilleures densités de puissance par rapport à la configuration de CSC triangulaire. La densité de puissance obtenue à l'aide des formes de CSC Trp-Rct, Trp-Hlp et Trp-I-Hlp sont inférieures à celle obtenue par la configuration de CSC triangulaire (fig.IV.8 a et 8 b).

Les chutes de pression générées de l'entrée à la sortie des cellules ayant une forme de CSC de base trapézoïdale sont présentées dans la fig.IV.8 c. La configuration de CSC Trp-Itrp présente la chute de pression la plus élevée par rapport aux configurations de CSC Trp-Hlp, Trp-Ihlp et Trp-Rct. La chute de pression maximale est d'environ 793,7 Pa. La plus petite chute de pression est provoquée par la forme de CSC Trp-Rct; elle est d'environ 619,7 Pa.

La forme de CSC Trp-Itrp force les réactifs à s'écouler près du GDL avec une vitesse considérable par rapport à d'autres configurations de CSC de base trapézoïdale. (Voir la fig.AII.17 en Annexe II). Cela entraîne une diminution de la pression totale à la sortie de PEMFC et une augmentation logique de la chute de pression. (Voir la fig.AII.16 en Annexe II). Par conséquent, une amélioration du transfert de masse convectif des réactifs, ainsi que la consommation des gaz réactifs traduite par l'évolution et l'amélioration de la concentration d'eau résultante de la conversion électrochimique des réactifs (**voir** fig.AII.13, 14 et 15 en annexe II). De plus, la forme de CSC Trp-I-Trp montre des valeurs de température au niveau d'EMA plus élevée par rapport aux autres formes de CSC à base trapézoïdale (cf. fig.AII.18 en annexe II). Cela contribue également à une augmentation de la densité de puissance produite.

IV.2.4 Géométrie à base trapézoïdale inversée

Les courbes I-P obtenues selon les configurations de CSC de base trapézoïdale inversée sont présentées dans la fig.IV.9 a. Les densités de puissance les plus élevées sont obtenues par une densité de courant d'environ 0,770 A/cm².

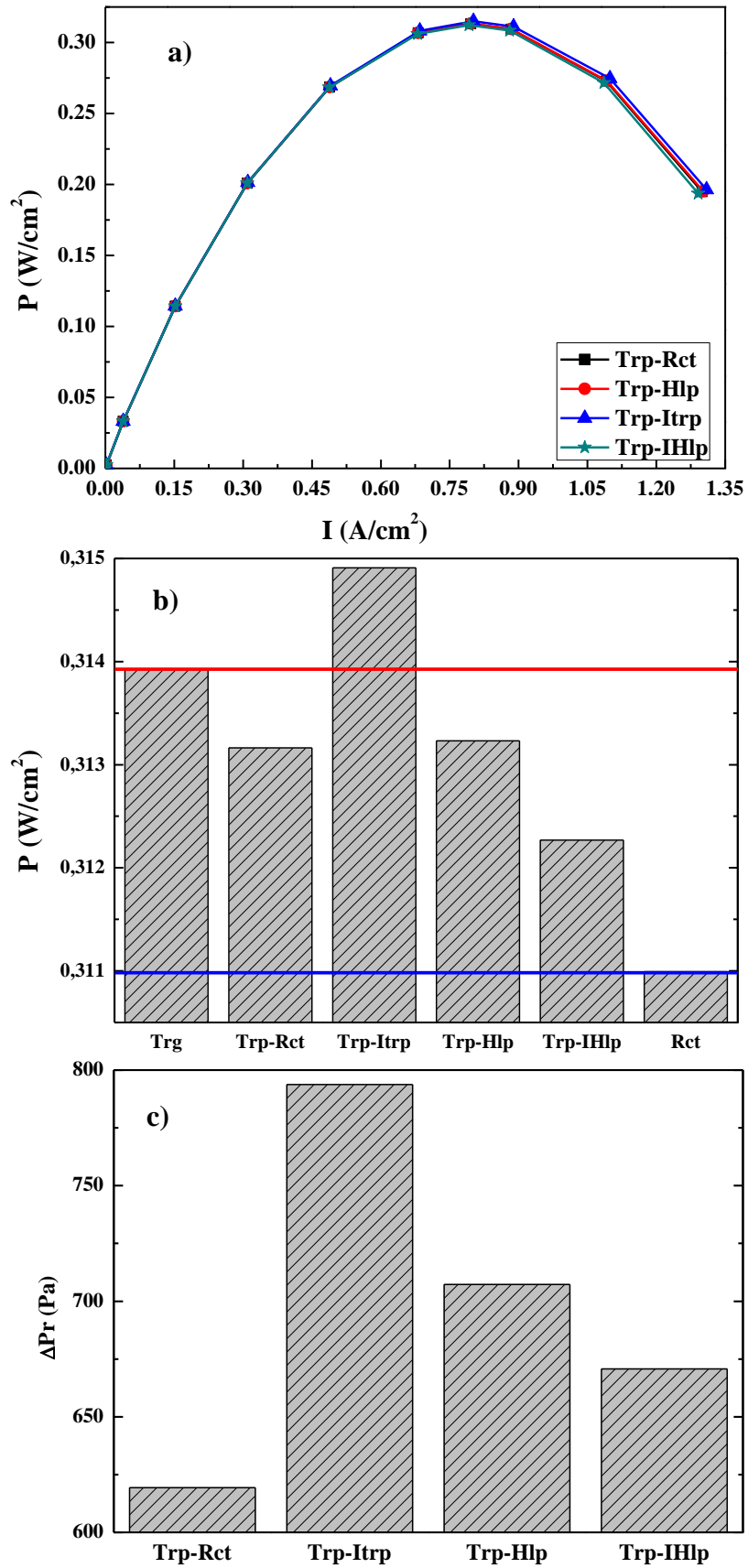


Fig.IV.8 Comparaison entre les configurations de CSC de base trapézoïdale. a) courbes I-P, b) densité de puissance maximale, c) chute de pression.

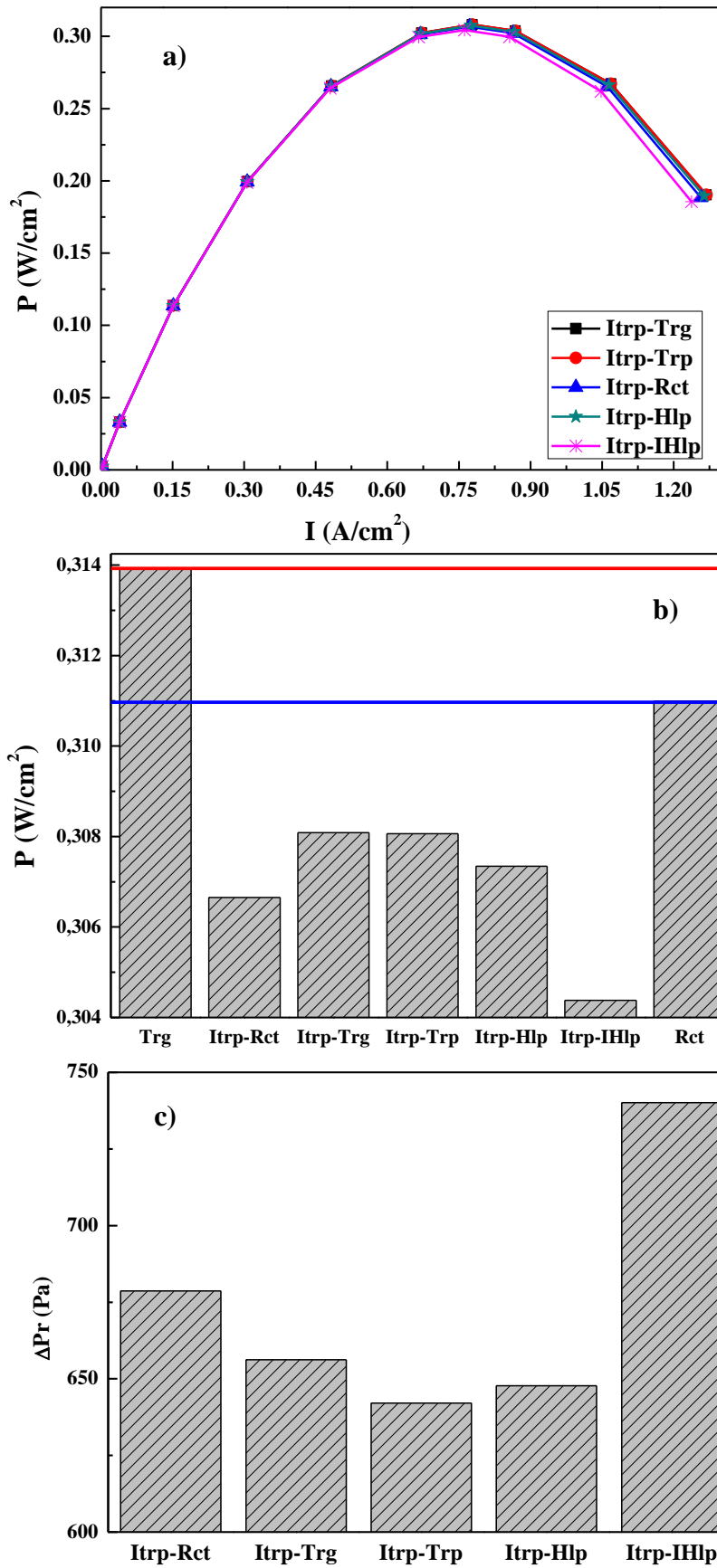


Fig.IV.9 Comparaison entre les configurations CSC de base trapézoïdale inversée. a) courbes I-P, b) densité de puissance maximale, c) chute de pression.

La densité de puissance la plus élevée est générée par les configurations de CSC I-Trp-Trg et I-Trp-Trp ($0,308 \text{ W / cm}^2$). La plus faible densité de puissance est obtenue par la configuration de CSC I-Trp-I-Hlp ($0,304 \text{ W / cm}^2$). L'utilisation des formes de CSC de base trapézoïdale inversée permet d'obtenir des densités de puissance plus faibles que celles obtenues par les configurations de CSC rectangulaire et triangulaire (fig.IV.9 a. et 9 b).

La fig.IV.9 c présente les chutes de pression générées entre l'entrée et la sortie des PEMFC ayant une base trapézoïdale inversée de la configuration de CSC. À partir de cette figure, on peut observer que la configuration de CSC I-Trp-I-Hlp provoque la chute de pression la plus élevée par rapport aux autres configurations de CSC. La chute de pression maximale est d'environ $740,1 \text{ Pa}$, tandis que la plus petite chute de pression est d'environ $642,1 \text{ Pa}$, elle résulte de la configuration de CSC I-Trp-Trp.

Les configurations de CSC de base trapézoïdale inversée ont des parois ouvertes d'une manière divergente du bas au haut du canal, ce qui rend la vitesse maximale de profil de vitesse plus éloigné du GDL et provoque logiquement des baisses de pression relativement faibles par rapport aux autres formes de CSC. (Voir fig.AII.22 et 23 en Annexe II). Ceci conduit raisonnablement à une diminution de la vitesse aux interfaces électrodes/canaux et au transfert de masse convective des gaz réactifs, ainsi qu'à la concentration d'eau dans la GDL par rapport aux autres formes de CSC indiquant une mauvaise consommation des réactifs. (Voir fig.AII.19, 20 et 21 en Annexe II).

Même si ces formes ont des températures relativement élevées par rapport aux autres formes de CSC étudiées, cela n'améliore pas leurs densités de puissance, car l'augmentation de la température obtenue par ces formes de CSC ne dépasse pas $0,2 \text{ K}$. (voir fig.AII.23 en Annexe II).

IV.2.5 Géométrie à base semi-elliptique

La fig.IV.10 montre les courbes I-P obtenues selon les formes de CSC de base demi-elliptiques. Les densités de puissance les plus élevées sont obtenues par une densité de courant d'environ $0,792 \text{ A / cm}^2$. La densité de puissance la plus élevée est reportée par la configuration de CSC Hlp-I-Hlp, qui atteint presque $0,313 \text{ W / cm}^2$. La plus faible densité de puissance est obtenue par la configuration de CSC Hlp-Trp ; qui est presque de $0,311 \text{ W / cm}^2$. L'utilisation des configurations de CSC à base semi-elliptique permet d'obtenir de meilleures densités de puissance par rapport à la forme de CSC rectangulaire. De plus, toutes ces configurations de CSC à base semi-elliptique montrent des densités de puissance plus faibles que celle obtenue par forme de CSC triangulaire (fig.IV.10 a et fig.IV.10 b).

La fig.IV.10 c présente les chutes de pression générées de l'entrée à la sortie des PEMFC ayant une forme de CSC de base semi-elliptique. On peut noter que la configuration du CSC Hlp-Trg présente la plus forte chute de pression par rapport aux configurations (Hlp-I-Hlp, Hlp-Trp, Hlp-Rct et Hlp-I-Trp). La chute de pression maximale est d'environ 899,1 Pa et la plus petite chute de pression est d'environ 726,9 Pa, cette dernière est générée par la configuration de CSC Hlp-I-Trp.

La forme CSC Hlp-I-Hlp force les deux gaz à se déplacer avec une vitesse considérable près de l'interface électrode/canal par rapport aux autres formes de CSC de base semi-elliptique. (Voir la fig.AII.28 en Annexe II). Ces formes provoquent une diminution de la pression totale à la sortie et une augmentation de la chute de pression par conséquent (cf. fig.AII.27 en Annexe II). Logiquement, une augmentation du transfert de masse convectif des gaz réactifs, ainsi que la concentration d'eau résultante indiquent une bonne consommation des réactifs (voir fig.AII.24, 25 et 26 en Annexe II). De plus, la forme de CSC Hlp-I-Hlp montre des valeurs de température plus élevée au niveau de EMA par rapport aux autres formes de CSC à base semi-elliptique (cf. fig.AII.29 en Annexe II). Cette augmentation des valeurs de température contribue également à l'amélioration de la densité de puissance produite.

IV.2.6 Géométrie à base semi-elliptique inversée

Les courbes I-P obtenues selon les formes de CSC de base demi-elliptique inversée sont indiquées dans la fig.IV.11 a. Les densités de puissance les plus élevées générées par les formes de CSC de base semi-elliptique inversée sont obtenues par une densité de courant d'environ 0,763 A /cm². La densité de puissance la plus élevée est portée par la configuration de CSC I-Hlp-Trg, qui est de presque de 0,305 W /cm². La densité de puissance la plus faible est obtenue par la configuration de CSC I-Hlp-I-Trp, elle est presque de 0,301 W /cm². L'utilisation des formes de CSC de base semi-elliptique inversée permet d'obtenir des faibles densités de puissance par rapport aux formes de CSC triangulaire et rectangulaire (fig.IV.11 a et fig.IV.11 b).

La fig.IV.11 c présente les chutes de pression générées de l'entrée à la sortie des PEMFC ayant une forme de CSC de base demi-elliptique inversée. La configuration de CSC I-Hlp-I-Trp présente la chute de pression la plus élevée par rapport aux autres configurations CSC. La chute de pression maximale est d'environ 840,9 Pa. La plus petite chute de pression est d'environ 679,8 Pa, qui est généré par la configuration de CSC I-Hlp-Hlp.

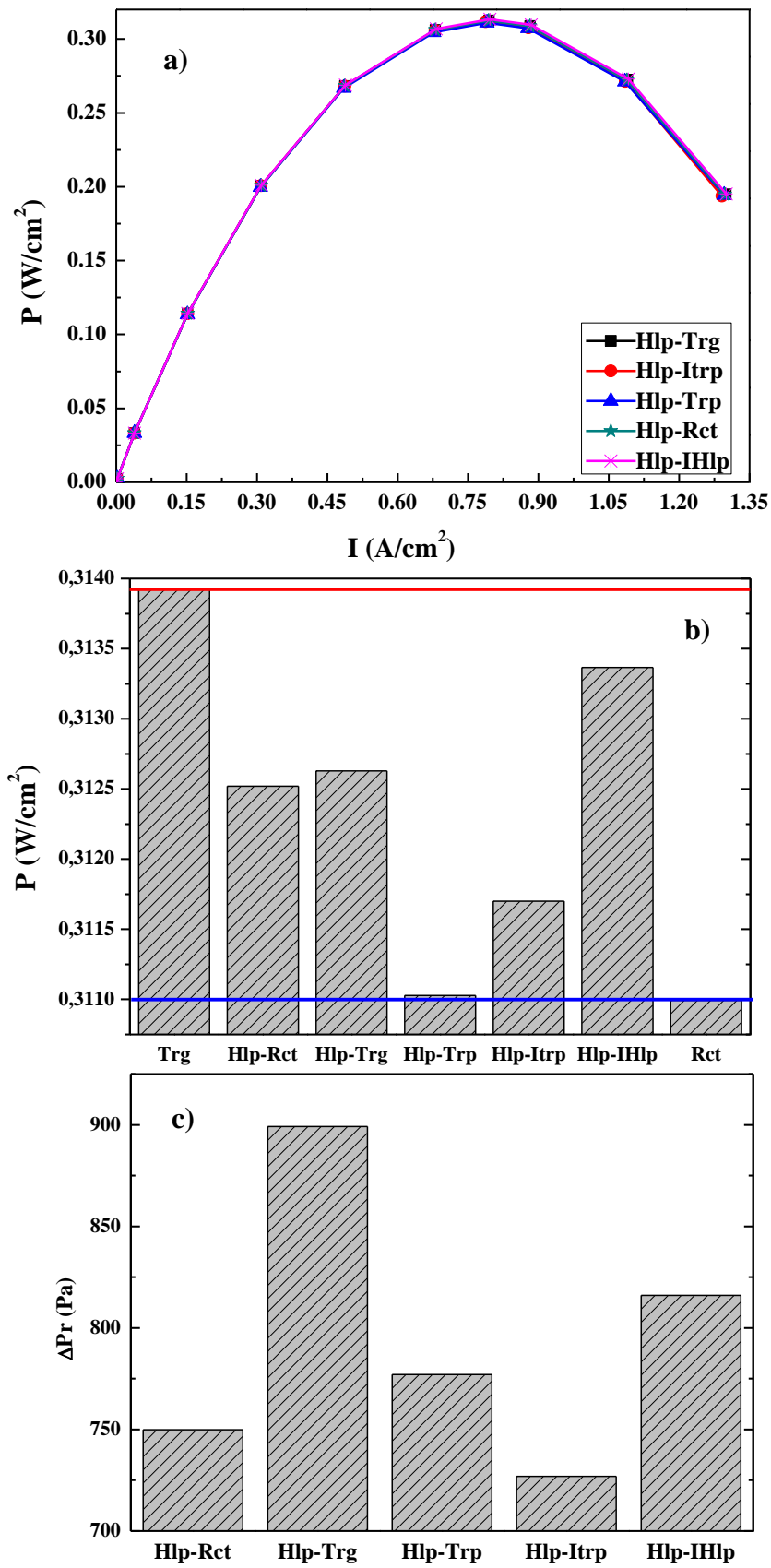


Fig.IV.10 Comparaison entre les configurations de CSC à base elliptique. a) courbes I-P, b) densité de puissance maximale, c) chute de pression.

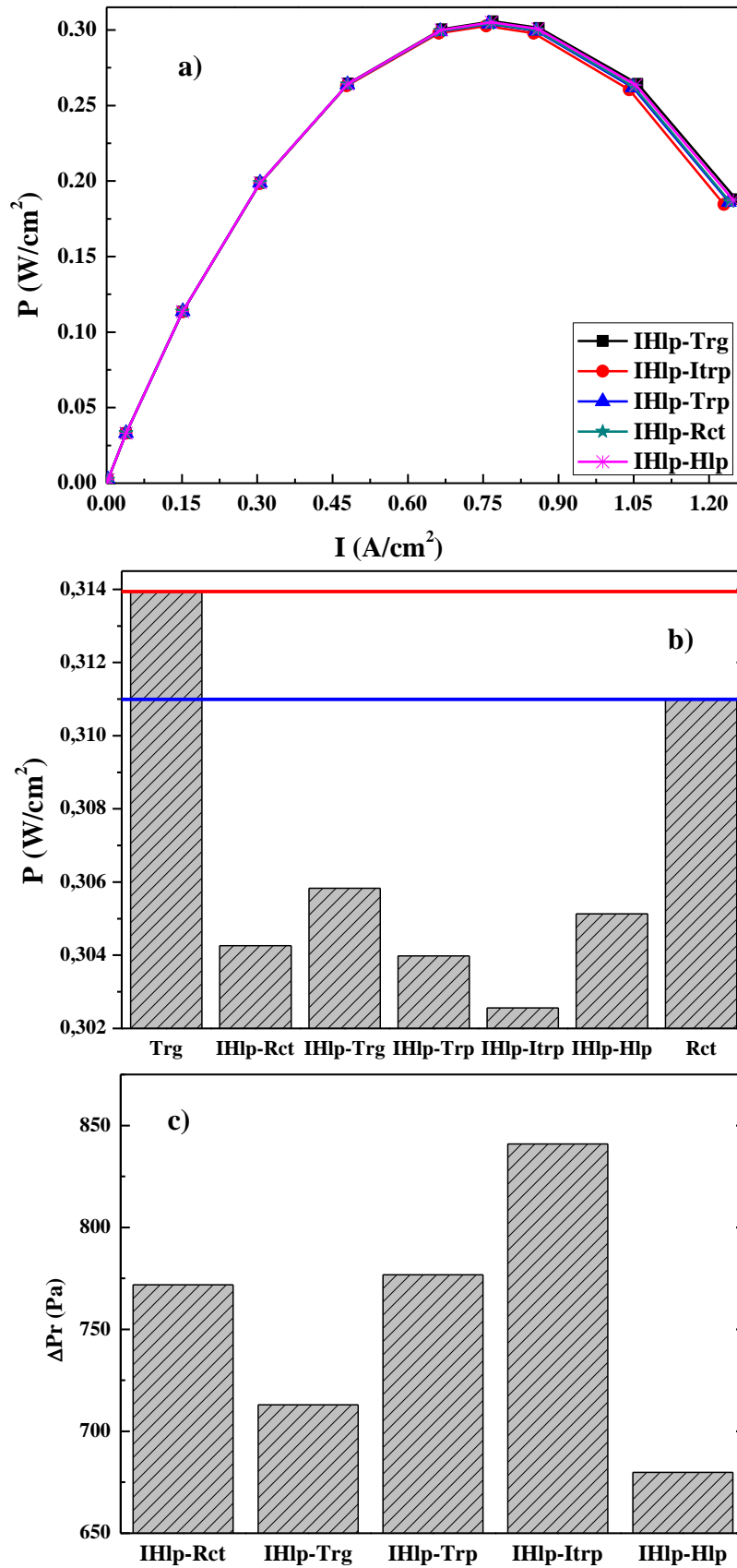


Fig.IV.11 Comparaison entre les configurations de CSC de base elliptique inversée. a) courbes I-P, b) densité de puissance maximale, c) chute de pression.

Les configurations de CSC de base semi-elliptique inversée ont une forme divergente du bas vers le haut de canal ; cela réduit la vitesse de gaz aux interfaces électrodes /canaux et produit relativement des faibles pressions par rapport aux autres formes de CSC. (Voir fig.AII.33 et 34 en Annexe II). Cela se traduit par une diminution du transfert de masse convectif des gaz réactifs et par une concentration d'eau par rapport aux autres configurations de CSC. (Voir fig.AII.30, 31 et 32 en Annexe II). En outre, ces formes ont une légère augmentation de la température par rapport aux autres formes de CSC (0,2 K), ce qui ne contribue pas vraiment à l'amélioration de la densité de puissance de ces formes. (Voir la fig.AII.35 en Annexe II).

IV.3 Optimisation du chemin d'écoulement des micro-canaux

Une comparaison entre les huit configurations de chemin d'écoulement du canal a été étudiées et présentée en deux sous-sections. Tout d'abord, la première sous-section compare les hauteurs de sortie de canal avec la hauteur de sortie de canal conventionnelle. En fin, la deuxième sous-section compare les configurations qui ont des différents nombres de marches d'escalier avec la configuration conventionnelle.

IV.3.1 Effet de la hauteur de sortie des canaux

Les courbes de polarisation obtenues selon les différentes hauteurs de sortie du canal sont présentées dans la fig.IV.12 a. Il ressort clairement de cette figure qu'à de faibles densités de courant (0 - 0,6 A/cm²), toutes les courbes se coïncident presque et la hauteur de sortie du canal ne semble pas être un facteur important influant la performance de la PEMFC, et que toutes les configurations ont des densités de puissance similaires. À des densités de courant moyennes et élevées (0,5 – 1 A/cm²), la hauteur de sortie de canal devient un paramètre considérablement influençant la performance de PEMFC qui provoque un effet notable sur la densité de puissance.

La densité de puissance la plus élevée est obtenue par une hauteur de sortie du canal de 0,2 mm, soit presque de 0.2706 W/cm². La densité de puissance la plus faible est obtenue par le canal conventionnel, qui est égal à 0.26784 W/cm². La réduction de hauteur de sortie de canal permet d'obtenir de meilleures densités de puissance par rapport aux classiques (fig. IV. 12 a et 12 b). La fig.IV.12 c présente les chutes de pression produites à l'intérieur de PEMFC selon les différentes hauteurs de sortie du canal. À partir de cette figure, il convient de noter que la hauteur de sortie de canal de 0,2 mm provoque la plus grande chute de pression par rapport aux autres hauteurs de sortie de canal, soit d'environ 1796 Pa. La variation de hauteur de sortie de canal représente un changement logique de l'angle d'inclinaison de la paroi supérieure du canal, pour

une hauteur de canal maximal l'angle d'inclinaison est minimal et inversement, car elles sont inversement proportionnelles. L'augmentation de l'angle d'inclinaison permet une augmentation de la vitesse des gaz et oblige les réactifs à pénétrer dans les couches de diffusion de gaz produisant une plus grande concentration d'eau, consommation, densité de puissance et de chute de pression (Voir annexe III fig. AIII.1 et fig. AIII.2).

Même si la densité de puissance de la PEMFC est proportionnelle à la température dans les sites de réaction, cela n'affecte pas fortement la densité de puissance produite puisque la différence de température obtenue entre toutes les configurations simples est très faible (Voir annexe III fig. AIII.3).

IV.3.2 Effet du nombre de marches d'escalier

La fig.IV.13a montre les courbes I-P obtenues selon les différents nombres de marches d'escalier. La densité de puissance la plus élevée est reportée par trois marches d'escalier ; qui est presque de 0.27112 W/cm^2 . L'utilisation de plusieurs escaliers le long du canal d'écoulement permet d'obtenir de meilleures densités de puissance, car toutes ces configurations permettant des densités de puissance plus élevées par rapport à la configuration sans marche d'escalier (conventionnelle). Fig.IV.13 a et fig.IV.13 b.

La fig.IV.13 c présente les chutes de pression générées entre l'entrée et la sortie des PEMFC pour l'ensemble des cas étudiés dans cette partie. Les configurations possédant une marche d'escalier ont une chute de pression élevée par rapport à la configuration sans marche. La chute de pression maximale est d'environ 2636.3 Pa , elle est obtenue selon trois marches, soit environ 11 fois de la valeur obtenue pour le canal droit sans marche (225.9 Pa).

Pour être plus précises, ces différences considérables de chute de pression sont dues au changement de trajet d'écoulement et des lignes de courant, ce qui nécessite une augmentation logique de la puissance de pompage indispensable pour assurer un bon fonctionnement de la PEMFC. Cela entraîne une perte de densité de puissance nette de la PEMFC (fig.IV.14 a, b).

Ces configurations qui ont des marches d'escalier dans les canaux forcent les gaz à se déplacer à travers les couches de diffusion de gaz avec une vitesse remarquable plus proche des interfaces électrodes/canaux par rapport à l'ensemble des configurations étudiées. (Voir Annexe III fig. AIII.3).

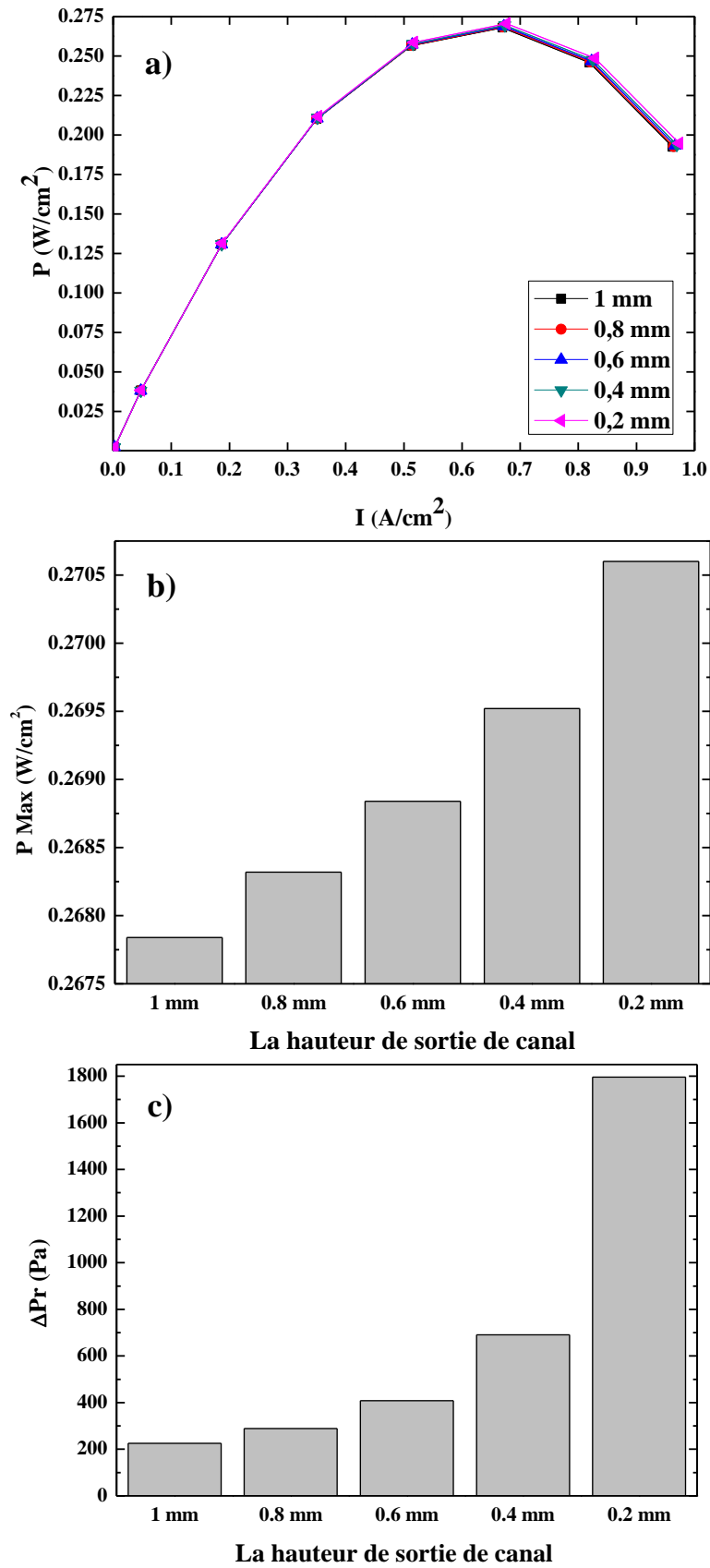


Fig.IV.12 Comparaison entre les différentes hauteurs de sortie de canal. a) courbes I-P, b) densité de puissance maximale, c) chute de pression.

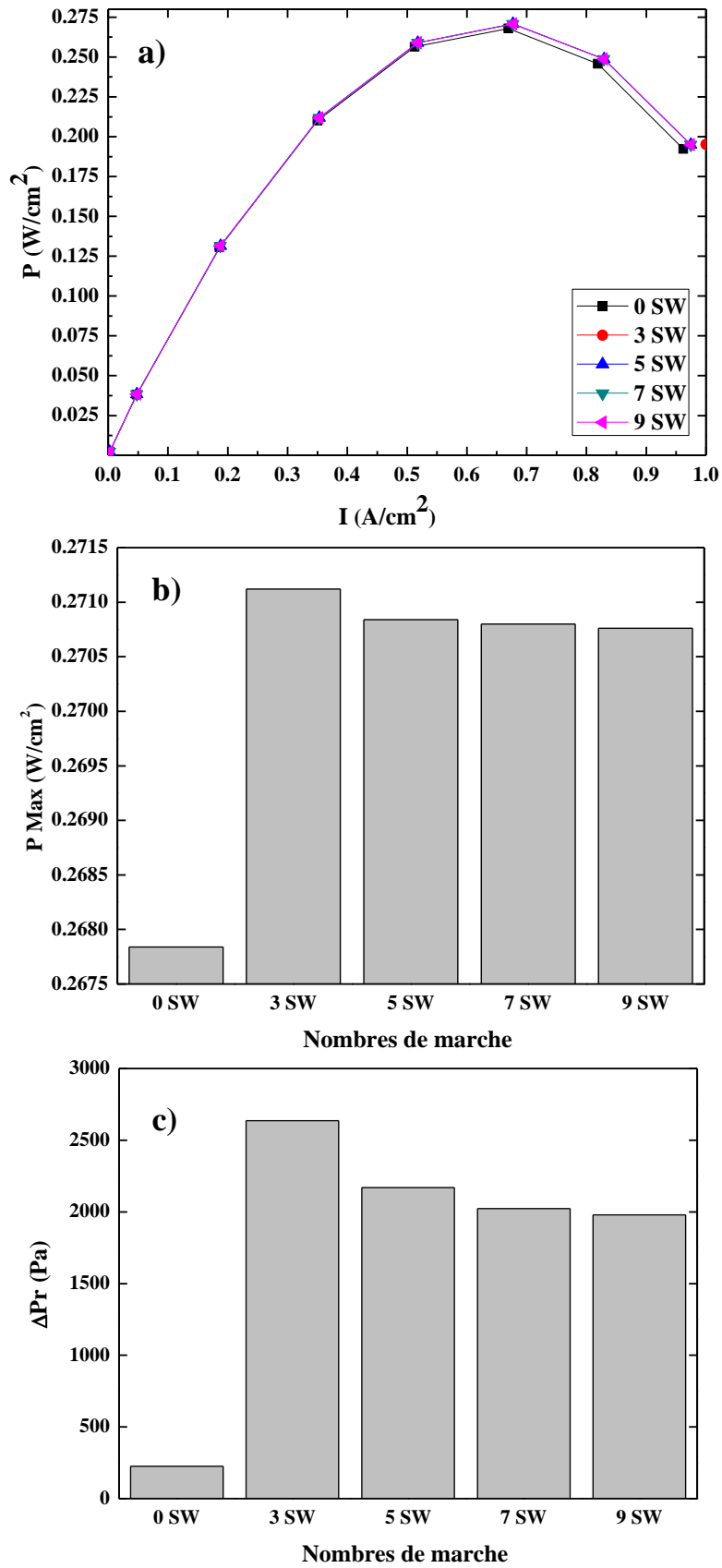


Fig.IV.13 Comparaison entre les différents nombres de marches. a) courbes I-P, b) densité de puissance maximale, c) chute de pression.

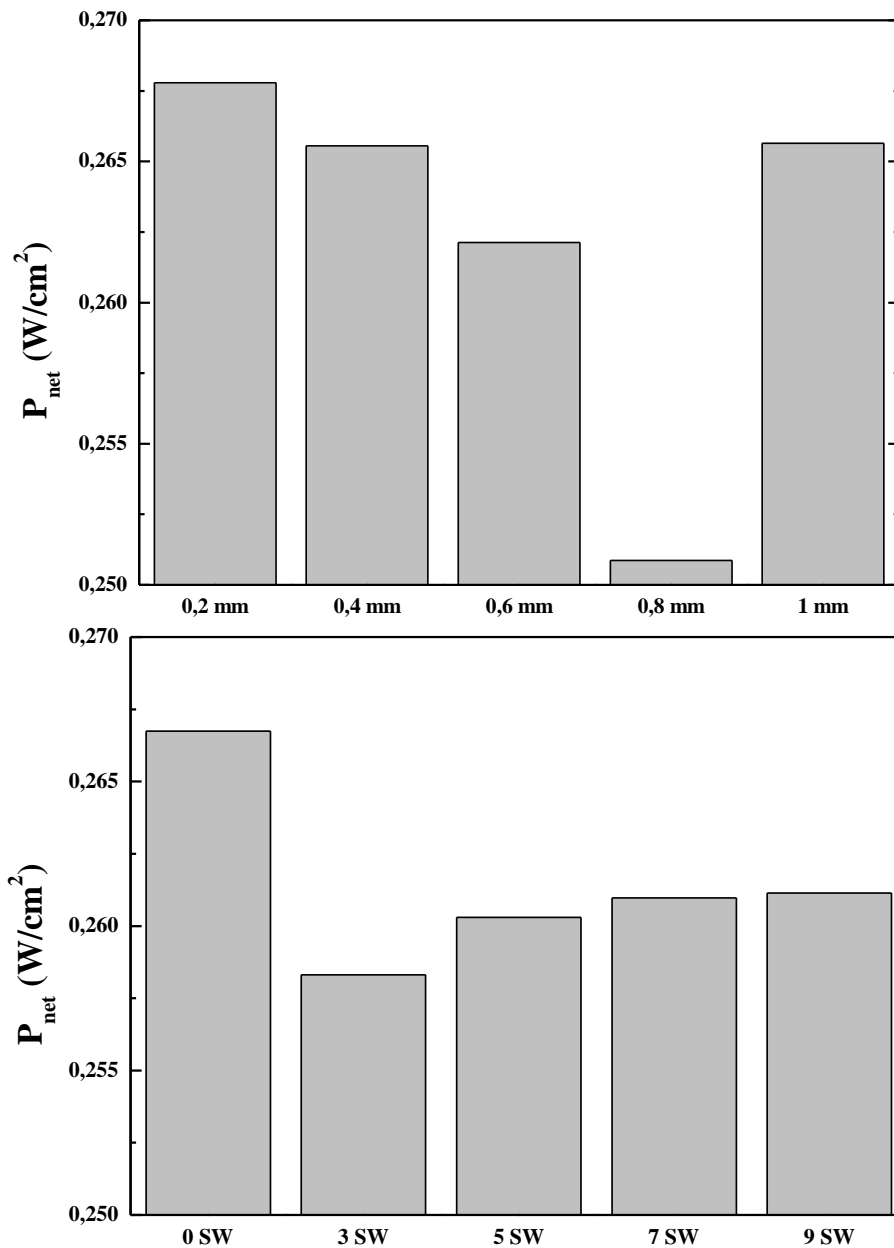


Fig.IV.14 Comparaison entre les différents nombres d'escaliers de canal. a) courbes I-P, b) densité de puissance maximale, c) chute de pression.

Aussi, une diminution de la pression totale à la sortie et une augmentation logique de la chute de pression sont obtenues par ces configurations. (Voir annexe III fig. AIII.3). Par conséquent, une augmentation du transfert de masse convectif des gaz réactifs, ainsi que la concentration d'eau résultante. (Voir annexe III fig. AIII.1 et fig. AIII.2).

De plus, la configuration qui possède trois marches dans les canaux montre des valeurs de température plus élevée de l'entrée à la sortie de PEMFC par rapport aux autres configurations (Voir figure 39 en annexe). Cette augmentation contribue également à l'amélioration de la densité de puissance produite.

IV.4 Géométrie tubulaire

Dans le but de définir l'effet de la section transversale du canal sur la consommation de réactifs, les résultats de la simulation, pour trois types de configurations (rectangulaire, trapézoïdale et triangulaire) sont utilisés, présentés et discutés dans cette partie. Les profils de vitesse, de concentration d'oxygène, d'hydrogène et d'eau, ainsi que les courbes de polarisation sont présentées.

La fig.IV.15 présente les champs de vitesse obtenus utilisant les trois sections transversales. Les trois PEMFC de différentes configurations de la section transversale du canal sont alimentées avec les mêmes débits de réactifs. Nous pouvons observer dans le cas de la section transversale rectangulaire que la distribution de vitesse maximale est située au centre du canal le long de la PEMFC. Dans le cas de la section transversale triangulaire, la vitesse maximale est située près de l'interface canal-GDL en raison de la zone morte développée au sommet de la section triangulaire transversale.

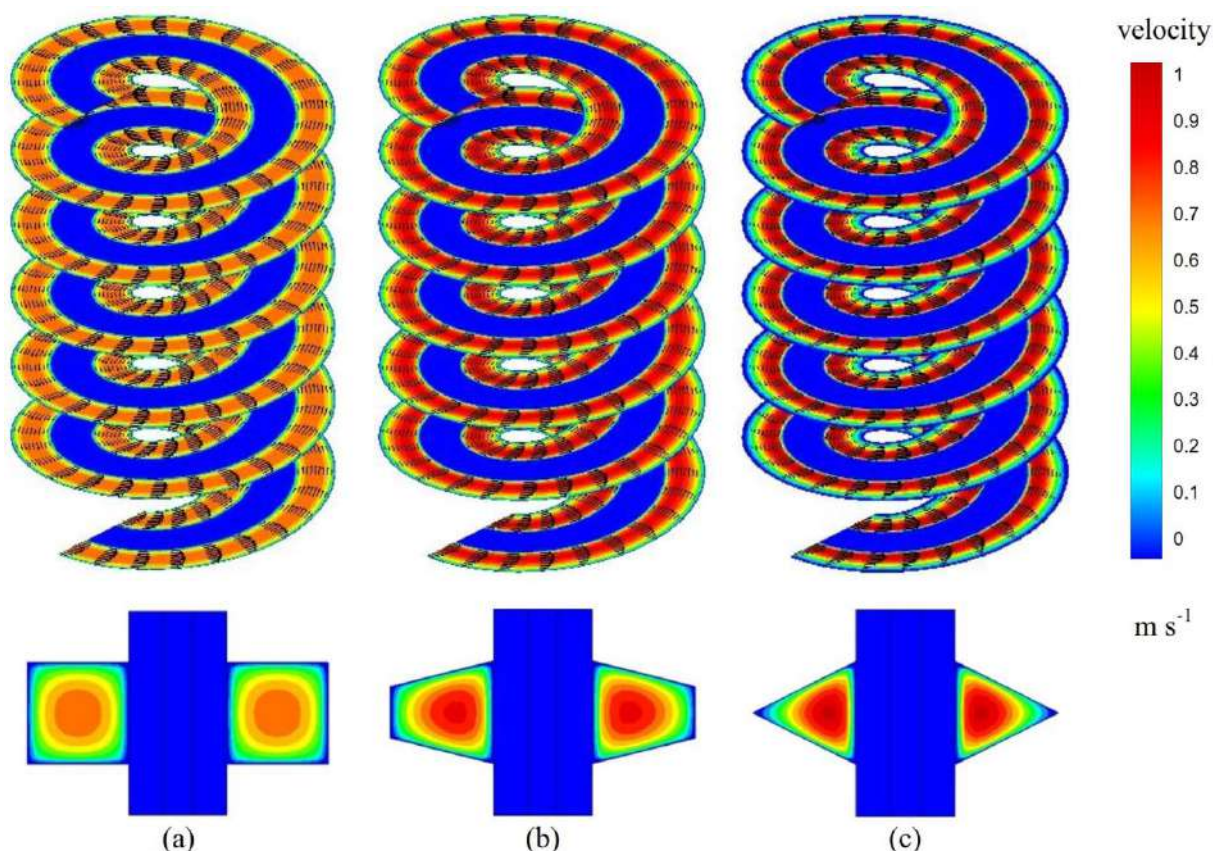


Fig.IV.15 Répartition de la vitesse le long des canaux tordus : (a) rectangulaire, (b) trapézoïdale, (c) triangulaire.

De même, le remplacement de la section rectangulaire par la section trapézoïdale entraîne un déplacement de la position de la vitesse maximale dans la même direction de la configuration

triangulaire ; la forme trapézoïdale de la section transversale est une configuration intermédiaire entre les formes rectangulaire et triangulaire. Nous remarquons également que la section rectangulaire semble indiquer la plus grande section de canal et la vitesse maximale la moins élevée par rapport aux deux autres formes, ce qui peut affecter la distribution et la consommation des réactifs.

Les distributions d'hydrogène et d'oxygène sont respectivement présentées dans les figs.IV.16 et 17 selon les trois différentes configurations étudiées. Comme indiqué dans la figure, les concentrations de gaz diminuent le long des canaux de l'entrée et la sortie en raison de la consommation de réactifs. Pour une meilleure évaluation de l'effet de la forme de la section transversale du canal sur la consommation de réactifs, nous prenons la forme rectangulaire comme configuration de référence.

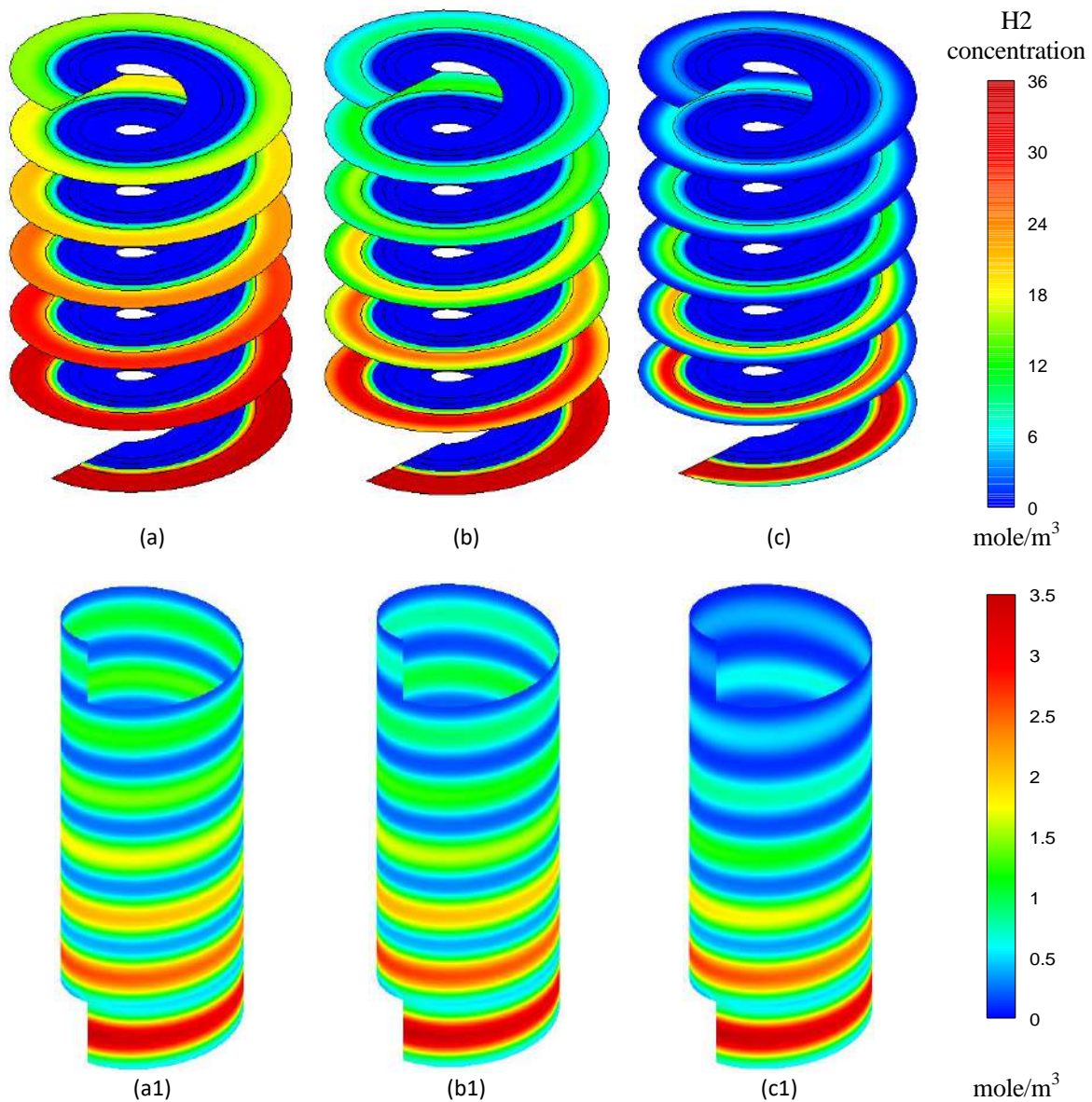


Fig.IV.16 Répartition de la concentration d'hydrogène le long du trajet tordu : a) b) et c) dans toute la cellule, a1), b1) et c1) dans l'interface CL/GDL de la cathode.

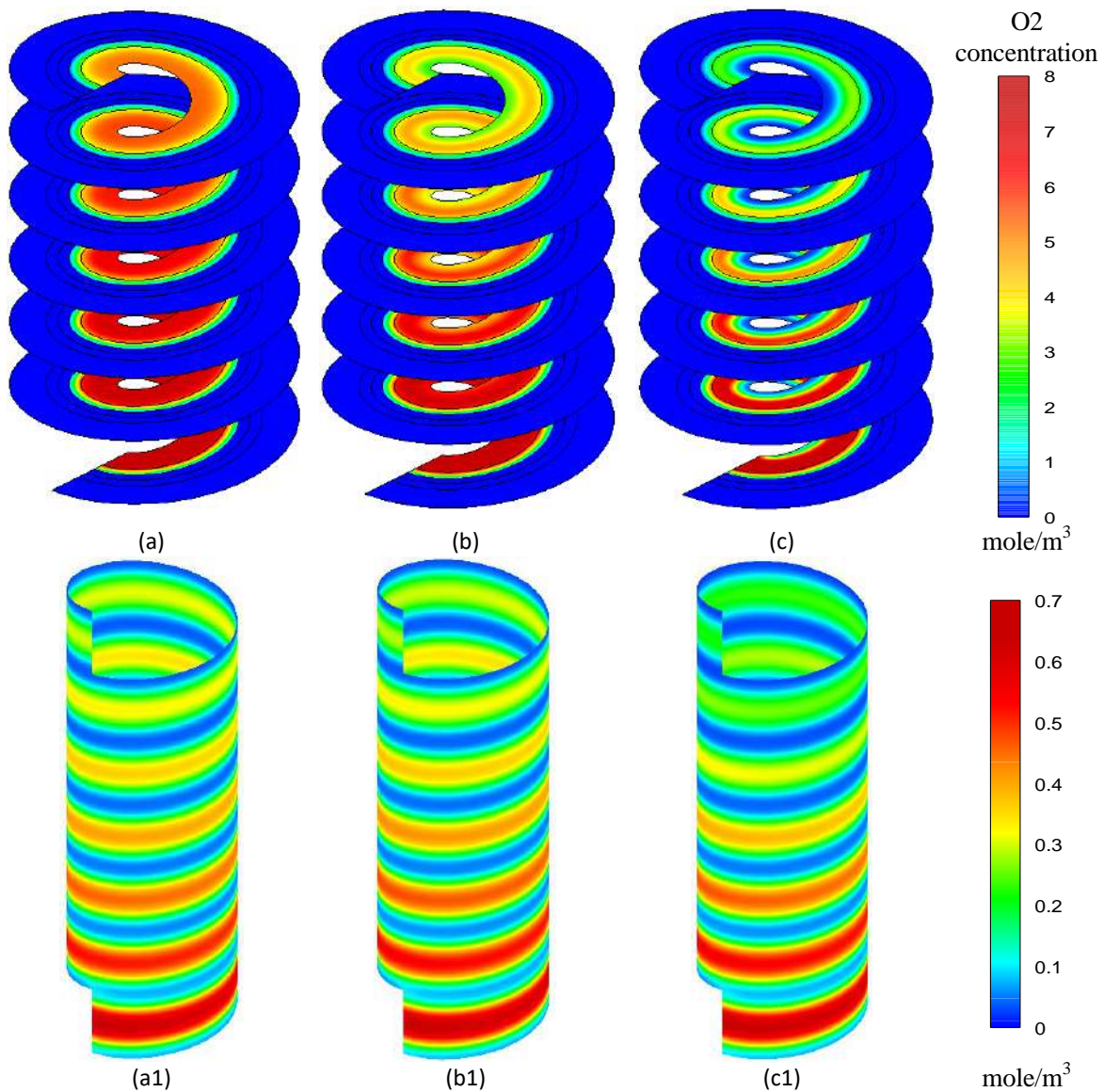


Fig.IV.17 Répartition de la concentration d'oxygène le long du trajet tordu : a) b) et c) dans toute la cellule, a1), b1) et c1) dans l'interface CL/GDL de la cathode.

Le remplacement de la configuration de la section transversale rectangulaire par la configuration de la section transversale trapézoïdale diminue la surface de la section transversale du canal et augmente la vitesse d'écoulement, ce qui améliore le processus de transfert de masse des réactifs. Pour un plus d'infiltration de réactifs dans les couches de diffusion des gaz, une consommation des gaz réactifs est obtenue logiquement.

L'amélioration de la diffusion des gaz améliore le processus de conversion électrochimique et logiquement la densité de courant et la performance de la PEMFC (fig. IV 18). La forme de la section transversale du canal triangulaire présente la meilleure performance ; la zone morte au sommet du canal triangulaire agit comme un obstacle qui force le flux s'écouler vers le GDL à

travers lequel les réactifs vont pénétrer la couche du catalyseur. Par conséquent, la conservation du débit d'entrée et de la surface de contact entre le canal et le GDL ont permis de conclure que la plus petite section transversale du canal produira une vitesse plus élevée qui augmentera l'infiltration de réactifs dans le GDL, ce qui améliorera les performances de la PEMFC.

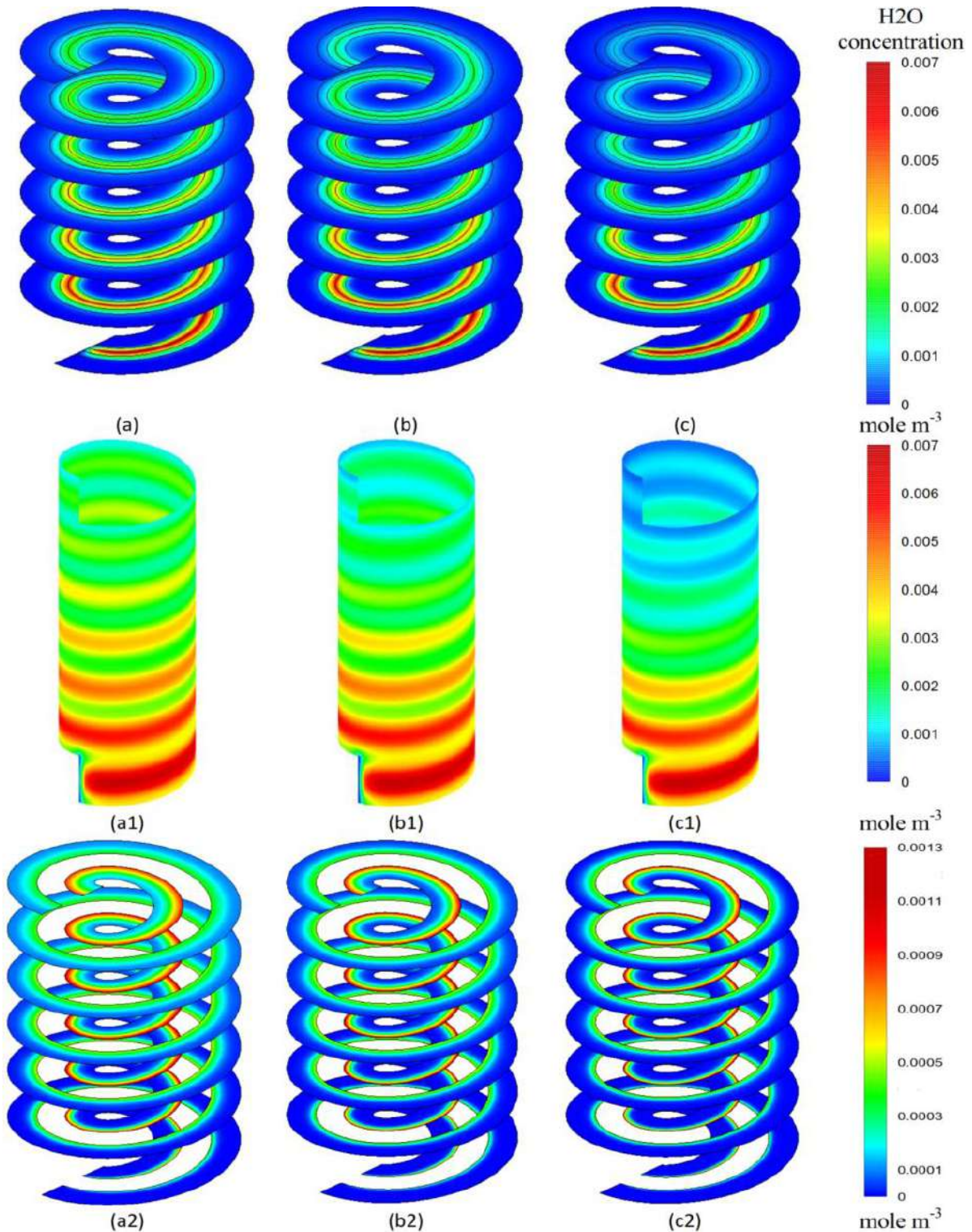


Fig.IV.18 Répartition des concentrations d'eau. (a) , (b) et (c) : dans toute la cellule (a1), (b1) et (c1) : à l'interface CL/GDL de la cathode, (a2), (b2) et (c2) : dans les canaux.

L'étude de la concentration et de la distribution de l'eau est nécessaire pour éviter, en même temps, le séchage et l'immersion de la membrane et permettra d'assurer un bon fonctionnement de la PEMFC. La distribution de la concentration molaire de l'eau dans la PEMFC des trois formes étudiées est illustrée à la fig.IV.18. Comme on le voit sur cette figure, les champs de distribution de l'eau dans l'anode et la cathode pour les trois formes de section transversale, rectangulaire, trapézoïdale et triangulaire, selon une géométrie tubulaire de la PEMFC sont présentés. L'eau est produite au niveau de la couche catalytique du côté cathodique, où l'on peut voir que sa concentration atteint des valeurs maximales dans cette zone. L'eau produite à la cathode est divisée en deux parties. La première partie passe à travers la membrane et la couche de diffusion jusqu'au canal anodique et la seconde à travers le GDL jusqu'au canal cathodique.

L'eau dans les canaux est transportée par convection dans la direction de l'écoulement et est éjectée vers l'extérieur ; c'est la raison pour laquelle la concentration d'eau dans les canaux augmente progressivement de l'entrée à la sortie, dans laquelle la concentration maximale de l'eau dans cette zone est observée (fig.IV.18 (a2), (b2) et (c2)).

La concentration d'eau dans le côté cathodique de la PEMFC est supérieure à celle du côté anodique en raison de la production d'eau produite dans le côté cathodique et de la faible perméabilité de la membrane. Par rapport aux configurations de la section transversale du canal rectangulaire et trapézoïdale, la section transversale du canal triangulaire a la valeur maximale de la concentration d'eau dans le MEA en raison du taux de consommation le plus élevé.

Comme le montre la fig.IV.15, la section triangulaire a la vitesse la plus importante, ce qui génère une force convective plus importante par rapport aux autres configurations de section transversale du canal et améliore le processus d'évacuation de l'eau; tandis que la section transversale du canal rectangulaire assure une plus grande distribution d'eau le long du chenal, ce qui signifie que l'eau n'est pas retirée dans les sites de réaction, mais elle est accumulée dans les parties de la PEMFC. Par conséquent, elle réduit les performances de la cellule faisant de la section transversale rectangulaire la pire performance de la configuration du canal pour les PEMFC tubulaire de canaux tordus. En bref, ces nouvelles géométries tubulaires affectent considérablement la production d'eau et sa distribution le long de la cellule.

Finalement, la Fig.IV.19 présente les courbes de polarisation obtenue par les trois différentes sections transversales du canal étudié.

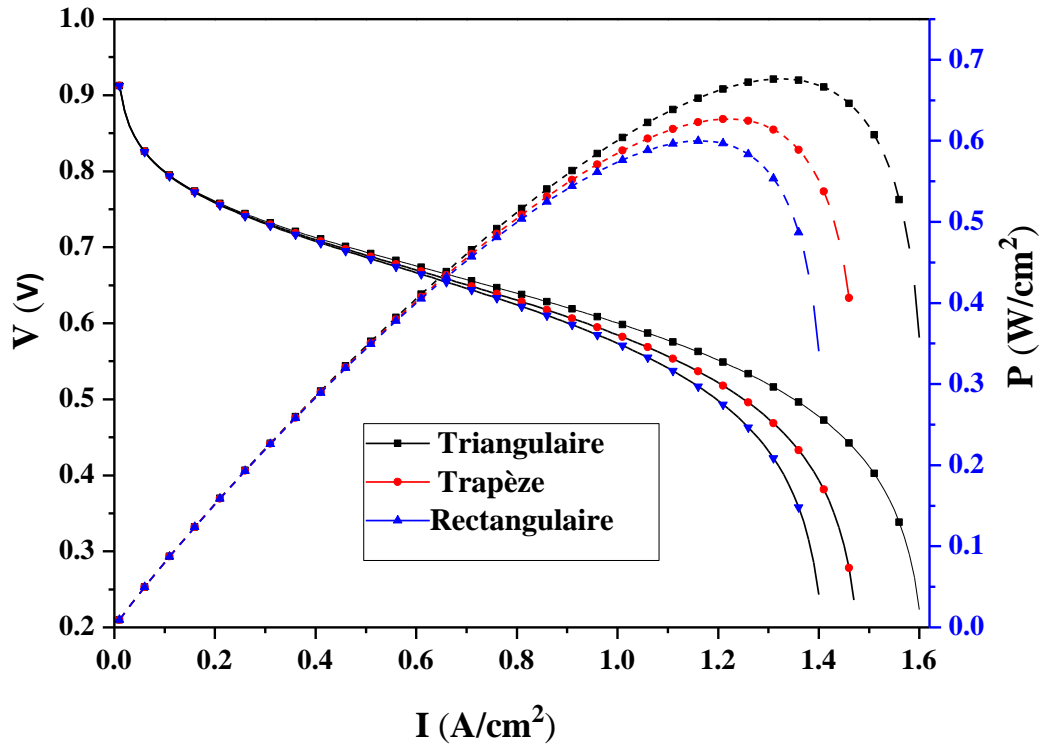


Fig.IV.19 Courbe de polarisation pour des trois différentes sections transversales.

(Tension : — ; Densité de puissance : - - - - -)

Conclusion générale

Cette étude purement numérique est relative à l'influence de la configuration des mini-canaux sur la consommation des combustibles dans une pile à combustible de type PEMFC. Une première phase de cette étude, s'intéressé à un modèle CFD tridimensionnel tout en utilisant le logiciel ANSYS-Fluent et son module PEMFC dans le but d'examiner les dimensions et les formes des canaux ainsi que les formes de cannelures transversales sur la performance d'une PEMFC planaire.

L'optimisation des dimensions nécessite des analyses numériques où deux cents cas de simulations ont été réalisés à l'aide du code Fluent-ANSYS. Les épaisseurs du : CHW, GDL, CL et membrane sont considérés pour cibler l'attitude de la densité de puissance avec chaque dimension.

D'un autre côté, une analyse de l'effet des formes transversales du canal sur la chute de pression, les phénomènes de transport et la densité de puissance a été menée. Trente configurations du CSC ayant la même surface côté anodique qu'à cathodique, dont cinq configurations bien connues et vingt-cinq nouvelles configurations innovantes de CSC ont été étudiées.

Dans un autre volet, le modèle multiphasique est pris en compte pour voir l'effet des formes de canal sur les caractéristiques de cette pile. Quatre autres formes : hauteurs de sortie de canal différentes côté anode et côté cathode et des nouvelles configurations comme des marches d'escalier ont été étudiées. Dans ces cas, les résultats obtenus ont été comparés aux résultats expérimentaux obtenus par d'autres auteurs.

Une deuxième phase de cette étude réside dans le développement d'un logiciel en langage FORTRAN en collaboration avec l'équipe travaillant sur les piles à combustible, dans le but de voir l'effet des différentes formes de section du canal sur la distribution de la vitesse, les consommations des réactifs et la production d'eau dans le but d'évaluer le rendement de la nouvelle pile à combustible tubulaire PEM. La méthode des volumes finis a été utilisée comme outil numérique pour résoudre les équations de conservation, sous l'état instationnaire dans toutes les parties de la cellule tubulaire.

Les conclusions relatives de la première phase peuvent être résumées comme suit :

Les résultats obtenus illustrent l'importance de l'influence de la CWH de la section transversale sur la performance du PEMFC-SCG. La diminution du CWH augmente la densité de puissance du PEMFC-SCG et offre les meilleures performances. Par conséquent, des CWH de 0,5/0,5 mm ont été identifiés comme des dimensions optimales. L'effet d'épaisseurs de GDL sur les performances du PEMFC-SCG est significatif entre la plage de dimensions de 0,15 et 0,20 mm

Les performances du PEMFC-SCG augmentent lorsque l'épaisseur du CL augmente et les densités de puissance maximales sont généralement obtenues par des couches de catalyseur plus épaisses.

L'épaisseur de la membrane est la dimension qui a le plus d'influence sur les performances du PEMFC-SCG. La nature de l'écoulement dans le canal affecte et améliore la performance globale et le type contre-courant fournit la meilleure performance de PEMFC-SCG.

La performance PEMFC-SCG peut être augmentée de 181,84% selon les paramètres géométriques étudiés. A basse densité de courant et haute tension, les formes de CSC ont peu d'influence sur la densité de puissance (performance de la cellule) ; contrairement, à haute densité de courant et de basses tensions. La configuration du CSC influe énormément sur le rendement du PEMFC.

Les configurations Trp, Hlp, Rct-Trg, Rct-Trp et Rct-Hlp CSC ont une densité de puissance plus élevée que la configuration rectangulaire CSC contrairement aux celles Itrp, Ihlp, Rct-Itrp et Rct. Les conformations CSC Ihlp ont les mauvaises performances de la cellule sur la configuration rectangulaire. Toutes les formes à base trapézoïdale et semi-elliptique du CSC ont une densité de puissance plus élevée que celle rectangulaire. À l'inverse, les formes à bases trapézoïdales inversées et semi-elliptiques inversées du CSC ont les performances cellulaires non avantageuses que celles forme rectangulaire. La configuration Trp-Itrp CSC a une densité de puissance supérieure au nombre total de configurations CSC étudiées, y compris la configuration triangulaire CSC qui est considérée comme la meilleure configuration dans la littérature. Le gain de densité de puissance signalé à l'aide de la configuration Trp-Itrp CSC atteint presque 4,65 %. La chute de pression la plus importante est obtenue par la configuration triangulaire CSC ; à l'inverse, la chute de pression la plus faible est signalée par la configuration rectangulaire CSC. La configuration Trp-Itrp CSC permet de réduire la chute de pression de 19,31 % par rapport à la configuration triangulaire CSC.

La modification géométrique du chemin d'écoulement dans le canal peut être un facteur d'influence qui améliore la performance de la cellule à des densités de courant moyennes à élevées. La réduction des hauteurs de sortie de canal permet d'obtenir de meilleures densités de puissance, une bonne consommation des réactifs le long du canal et une meilleure gestion de l'eau par rapport au canal sans inclinaison d'entrée/sortie (PEMFC classique).

Les formes de marches réalisées le long du côté de l'anode et celui de la cathode forcent les deux gaz à pénétrer dans les couches de diffusion de gaz avec une vitesse remarquable près des extrémités des électrodes/cannelures par rapport à l'ensemble de la configuration étudiée. Il en résulte une diminution de la pression totale de sortie et une augmentation de la chute de pression

par rapport à la configuration des hauteurs de sortie de canal et le celui sans marche d'escalier (PEMFC conventionnelle). Cependant, ces différences considérables dans la chute de pression en raison de la modification du circuit d'écoulement se sont produites, ce qui a entraîné une augmentation de la puissance nécessaire pour enrichir le débit entre les canaux. Cela entraîne une perte de densité de puissance nette pour ces nouvelles configurations innovantes.

Les conclusions relatives à la deuxième phase peuvent être résumées de la manière suivante :

Les champs de concentrations et de vitesse ont révélé que les consommations des réactifs utilisant la section triangulaire sont beaucoup plus élevées que les autres configurations.

Avec la plus grande surface transversale du canal, la vitesse d'écoulement dans la section transversale rectangulaire est bien inférieure aux autres configurations qui affectent directement les distributions et la consommation des réactifs.

La performance de la cellule dépend fortement des formes de la section transversale du canal. Par rapport aux configurations des canaux rectangulaires et trapézoïdaux, le canal triangulaire améliore considérablement le processus d'évacuation de l'eau qui améliore les performances de la cellule. Elle est bien meilleure que les canaux trapézoïdaux et rectangulaires en termes d'efficacité, d'uniformité de distribution des réactifs et d'eau. Par conséquent, la configuration triangulaire de la section transversale peut être considérée comme la conception de base pour la nouvelle génération du PEMFC tubulaire.

Références bibliographiques

Références Bibliographiques

- [1] ZITOUNI Bariza, Etude Numérique des Phénomènes de Transfert dans les Piles à Combustible à Oxyde Solide de Type Planaire. Thèse de doctorat. UNIVERSITÉ DE BATNA 2007
- [2] HADDAD Djamel, modélisation et simulation numérique des phénomènes de transport dans une pile à combustible de type PEMFC. Thèse de doctorat. UNIVERSITÉ DE BATNA 2012
- [3] TAMERABET Monsaf, contribution à l'étude des transferts de masse et de chaleur dans une pile à combustible de type PEMFC. Thèse de doctorat. UNIVERSITÉ DE BATNA 2017
- [4] SAHLI YOUCEF, Contribution à l'étude numérique tridimensionnelle des phénomènes de transfert de chaleur dans la pile à combustible SOFC planaire. Thèse de doctorat. UNIVERSITÉ DE BATNA 2019
- [5] ABDENEBI Hafsia, Étude Numérique des Champs Thermiques dans une Pile à Combustible SOFC Planaire: Effet des Sources de Chaleur. Thèse de doctorat. UNIVERSITÉ DE BATNA 2019
- [6] Sahli Youcef, Zitouni Bariza, Ben Moussa Hocine, and Abdenebi Hafsia. Three-Dimensional Numerical Study of the Heat Transfer on the Planar Solid Oxide Fuel Cell: Joules Effect. Springer International Publishing Switzerland 2015 / Progress in Clean Energy, volume 1, I. Dincer et al. (eds.). DOI 10.1007/978-3-319-16709-1_32.
- [7] Djamel Haddad, Kafia Oulmi, Hocine Benmoussa, Zeroual Aouachria, and Sahli Youcef. Modeling of Heat Transfer in the PEMFC: Velocity Inlet and Current Density Effect. Springer International Publishing Switzerland 2015 / Progress in Clean Energy, volume 1, I. Dincer et al. (eds.). DOI 10.1007/978-3-319-16709-1_33.
- [8] Hafsia Abdenebi, Bariza Zitouni, Hocine Ben Moussa, Djamel Haddad, Hadda Zitouni, and Youcef Sahli. Inlet Methane Temperature Effect at a Planar SOFC Thermal Field under Direct Internal Reforming Condition. Springer International Publishing Switzerland 2015 / Progress in Clean Energy, volume 2, I. Dincer et al. (eds.). DOI 10.1007/978-3-319-17031-2_41.
- [9] Tamerabet Monsaf, Ben Moussa Hocine, Sahli Youcef, Mohammedi Abdallah. Unsteady three-dimensional numerical study of mass transfer in PEM fuel cell with spiral flow field. International Journal of Hydrogen Energy, 12 January, issue 2, 42 (2017) 1237-1251. <http://dx.doi.org/10.1016/j.ijhydene.2016.12.084>.

- [10] Youcef Sahli, Bariza Zitouni, Hocine Ben-Moussa. Solid Oxide Fuel Cell Thermodynamic Study. Çankaya University Journal of Science and Engineering, November, issue 2, 14 (2017) 134-151. ISSN 1309-6788.
- [11] Youcef Sahli, Bariza Zitouni, Hocine Ben-Moussa. Thermodynamic Optimization of the Solid Oxide Fuel Cell Electric Power. University Politehnica of Bucharest Scientific Bulletin Series B-Chemistry and Materials Science, June, issue 2, 80 (2018) 159-170. ISSN 1454-2331.
- [12] Y Sahli, B Zitouni, H Benmoussa. Etude numérique tridimensionnelle de l'effet de la température d'entrée des gaz sur la production de chaleur dans une pile à combustible SOFC planaire. Revue des Energies Renouvelables, Novembre, issue 2, 21 (2018) 173-180. ISSN 1112-2242.
- [13] Youcef Sahli, Hocine Ben-Moussa, Bariza Zitouni. Optimization Study of the Produced Electric Power by SOFCs. International Journal of Hydrogen Energy, August, issue 39, 44 (2019) 22445-22454. <http://dx.doi.org/10.1016/j.ijhydene.2018.08.162>.
- [14] Abdenebi, H., Zitouni, B., Ben Moussa, H., Haddad, D. Thermal field in SOFC fed by CH₄ : Molar fractions effect. Journal of the Association of Arab Universities for Basic and Applied Sciences 17 (2015) 82-89.
- [15] Belkhiri, Z., Zeroual, M., Ben Moussa, H., Zereg, M., Zitouni, B. Numerical simulation of exchange membrane fuel cells in different operating conditions. International Journal of Hydrogen Energy 37(2012) 5444-5451
- [16] Oulmi, K., Zitouni, B., Ben Moussa, H., Abdenebi, H., Andreadis, G.M. Total polarization effect on the location of maximum temperature value in planar SOFC. International Journal of Hydrogen Energy 36(2011) 4236-4243
- [17] Zitouni, B., Andreadis, G.M., Hocine, B.M. et al. Two-dimensional numerical study of temperature field in an anode supported planar SOFC: Effect of the chemical reaction. International Journal of Hydrogen Energy 36(2011) 4228-4235
- [18] Zitouni, B., Moussa, H.B., Oulmi, K., Saighi, S., Chetehouna, K. Temperature field, H₂ and H₂ O mass transfer in SOFC single cell: Electrode and electrolyte thickness effects. International Journal of Hydrogen Energy 34(2009) 5032-5039
- [19] Ben Moussa, H., Zitouni, B., Oulmi, K., (...), Belhamel, M., Mandin, P. Hydrogen consumption and power density in a co-flow planar SOFC. International Journal of Hydrogen Energy 34 (2009) 5022-5031
- [20] Zitouni, B., Ben Moussa, H., Oulmi, K. Studying on the increasing temperature in IT-SOFC: Effect of heat sources. Journal of Zhejiang University: Science A 8 (2007) 1500-1504.

- [21] Belkhiri, Z., Moussa, H.B., Haddad, D., Oulmi, K. Effect of permeability on the dynamic field in the PEM fuel cell. *International Journal of Hydrogen Energy* 40(2015)13789-13798.
- [22] Haddad, D., Oulmi, K., Benmoussa, H., Aouachria, Z., Bourmada, N. Transport phenomena effect on the performance of proton exchange membrane fuel cell (PEMFC). *International Journal of Hydrogen Energy* 38(2013) 8550-8556
- [23] Haddad, D., Benmoussa, H., Bourmada, N. et al. One dimensional transient numerical study of the mass heat and charge transfer in a proton exchange membrane for PEMFC. *International Journal of Hydrogen Energy* 34(2009) 5010-5014
- [24] Halitim S. Houria, Zitouni Bariza, Haddad Djamel, Benmoussa Hocine. DMFC water management in presence of heat sources. *MATHEMATICAL MODELLING OF ENGINEERING PROBLEMS*. 4 (2017) 59-62.
- [25] B. Zitouni, H. Ben Moussa, K. Oulmi et S. Saighi. Multi modélisation des phénomènes thermiques dans les piles type SOFC planaire. *Revue des Energies Renouvelables* 7 (2007) 281 –286.
- [26] H. Ben Moussa 1, D. Haddad 1, K. Oulmi 2, B. Zitouni 1, B. Mahmah 3 et M. Belhamel. Modélisation et simulation numérique des transferts fluidique et thermique dans le canal et couches cathodiques d'une PEMFC. *Revue des Energies Renouvelables* 10 (2007) 139 – 156
- [27] Z. Belkhiri, M. Zeroual, H. Ben Moussa and B. Zitouni. Effect of temperature and water content on the performance of PEM fuel cell. *Revue des Energies Renouvelables* 14 (2011) 121 – 130.
- [28] S. Abdessamed, H. Ben Moussa, B. Zitouni, B. Rousseau et M. Zeroual. Influence du rayonnement thermique sur le champ de température d'un cœur de pile à combustible SOFC à anode supportée Effet des températures de gaz *Revue des Energies Renouvelables* 13 (2010) 537 – 544.
- [29] H. Ben Moussa, B. Zitouni1, K. Oulmi, S. Saighi, B. Mahmah and M. Belhamel. Etude de l'effet thermique des différentes polarisations dans une pile à combustible de type SOFC. *Revue des Energies Renouvelables* Vol. 10 (2007) 345 – 355
- [30] Mohammedi, A., Sahli, Y., & Ben Moussa, H. (2019). 3D investigation of the channel cross-section configuration effect on the power delivered by PEMFCs with straight channels. *Fuel*, 116713. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2019.116713>
- [31] Frano barber/ *PEM Fuel Cells: Theory and Practice*/Elsevier 2005/ ISBN: 978-012-387710-9
- [32] *Recent Trends in Fuel Cell Science and Technology*/ ISBN 0-387-35537-5

- [33] 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.
- [34] Milewski, J. (2011) / Advanced Methods of Solid Oxide Fuel Cell Modeling./ Springer ISBN 978-0-85729-261-2
- [35] Sebnem Pehlivan-Davis/ Polymer Electrolyte Membrane (Pem) Fuel Cell Seals Durability/ A Doctoral Thesis / Loughborough university October 2015
- [36] 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
- [37] Matthew M. Mench/Fuel Cell Engines/ John Wiley & Sons, Inc. 2008
- [38] 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.
- [39] Yang, W. J., Wang, H. Y., Lee, D. H., & Kim, Y. B. (2015). Channel geometry optimization of a polymer electrolyte membrane fuel cell using genetic algorithm. *Applied Energy*, 146, 1–10. <https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2015.01.130>
- [40] Rostami L, Mohamad Gholy Nejad P, Vatani A. A numerical investigation of serpentine flow channel with different bend sizes in polymer electrolyte membrane fuel cells. *Energy* 2016;97:400–10. doi:10.1016/j.energy.2015.10.132.
- [41] Cooper, N. J., Smith, T., Santamaria, A. D., & Park, J. W. (2016). Experimental optimization of parallel and interdigitated PEMFC flow-field channel geometry. *International Journal of Hydrogen Energy*, 41(2), 1213–1223. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2015.11.153>
- [42] Randrianarizafy, B., Schott, P., Chandesris, M., Gerard, M., & Bultel, Y. (2018). Design optimization of rib/channel patterns in a PEMFC through performance heterogeneities modelling. *International Journal of Hydrogen Energy*, 43(18), 8907–8926. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2018.03.036>
- [43] Scholta, J., Escher, G., Zhang, W., Küppers, L., Jörissen, L., & Lehnert, W. (2006). Investigation on the influence of channel geometries on PEMFC performance. *Journal of Power Sources*, 155(1), 66–71. <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2005.05.099>
- [44] Chiu HC, Jang JH, Yan WM, Li HY, Liao CC. A three-dimensional modeling of transport phenomena of proton exchange membrane fuel cells with various flow fields. *Appl Energy* 2012;96:359–70. doi:10.1016/j.apenergy.2012.02.060.

- [45] Hsieh SS, Chu KM. Channel and rib geometric scale effects of flowfield plates on the performance and transient thermal behavior of a micro-PEM fuel cell. *J Power Sources* 2007;173:222–32. doi:10.1016/j.jpowsour.2007.08.005.
- [46] Mahmoudimehr J, Daryadel A. Influences of feeding conditions and objective function on the optimal design of gas flow channel of a PEM fuel cell. *Int J Hydrogen Energy* 2017;42:23141–59. doi:10.1016/j.ijhydene.2017.07.196.
- [47] Manso AP, Marzo FF, Mujika MG, Barranco J, Lorenzo A. Numerical analysis of the influence of the channel cross-section aspect ratio on the performance of a PEM fuel cell with serpentine flow field design. *Int J Hydrogen Energy* 2011;36:6795–808. doi:10.1016/j.ijhydene.2011.02.099.
- [48] Chowdhury, M. Z., Genc, O., & Toros, S. (2018). Numerical optimization of channel to land width ratio for PEM fuel cell. *International Journal of Hydrogen Energy*, 43(23), 10798–10809. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2017.12.149>
- [49] Muthukumar, M., Karthikeyan, P., Vairavel, M., Loganathan, C., Praveenkumar, S., & Senthil Kumar, A. P. (2014). Numerical studies on PEM fuel cell with different landing to channel width of flow channel. *Procedia Engineering*, 97, 1534–1542. <https://doi.org/10.1016/j.proeng.2014.12.437>
- [50] Arvay A, Yli-Rantala E, Liu CH, Peng XH, Koski P, Cindrella L, et al. Characterization techniques for gas diffusion layers for proton exchange membrane fuel cells - A review. *J Power Sources* 2012;213:317–37. doi:10.1016/j.jpowsour.2012.04.026.
- [51] Cindrella L, Kannan AM, Lin JF, Saminathan K, Ho Y, Lin CW, et al. Gas diffusion layer for proton exchange membrane fuel cells-A review. *J Power Sources* 2009;194:146–60. doi:10.1016/j.jpowsour.2009.04.005.
- [52] Chippar P, Kyeongmin O, Kang K, Ju H. A numerical investigation of the effects of GDL compression and intrusion in polymer electrolyte fuel cells (PEFCs). *Int J Hydrogen Energy* 2012;37:6326–38. doi:10.1016/j.ijhydene.2011.04.154.
- [53] Fadzillah DM, Rosli MI, Talib MZM, Kamarudin SK, Daud WRW. Review on microstructure modelling of a gas diffusion layer for proton exchange membrane fuel cells. *Renew Sustain Energy Rev* 2017;77:1001–9. doi:10.1016/j.rser.2016.11.235.
- [54] Perng SW, Wu HW, Shih GJ. Effect of prominent gas diffusion layer (GDL) on non-isothermal transport characteristics and cell performance of a proton exchange membrane fuel cell (PEMFC). *Energy* 2015;88:126–38. doi:10.1016/j.energy.2015.02.083.

- [55] Khazaei I, Ghazikhani M, Esfahani MN. Effect of gas diffusion layer and membrane properties in an annular proton exchange membrane fuel cell. *Appl Surf Sci* 2012. doi:10.1016/j.apsusc.2011.03.062.
- [56] Berning T, Djilali N. Three-dimensional computational analysis of transport phenomena in a PEM fuel cell - A parametric study. *J Power Sources* 2003;124:440–52. doi:10.1016/S0378-7753(03)00816-4.
- [57] Abdollahzadeh M, Ribeirinha P, Boaventura M, Mendes A. Three-dimensional modeling of PEMFC with contaminated anode fuel. *Energy* 2018;152:939–59. doi:10.1016/j.energy.2018.03.162.
- [58] Chun JH, Park KT, Jo DH, Kim SG, Kim SH. Numerical modeling and experimental study of the influence of GDL properties on performance in a PEMFC. *Int J Hydrogen Energy* 2011;36:1837–45. doi:10.1016/j.ijhydene.2010.01.036
- [59] Xing L, Song X, Scott K, Pickert V, Cao W. Multi-variable optimisation of PEMFC cathodes based on surrogate modelling. *Int J Hydrogen Energy* 2013;38:14295–313. doi:10.1016/j.ijhydene.2013.08.104.
- [60] Hu G, Li G, Zheng Y, Zhang Z, Xu Y. Optimization and parametric analysis of PEMFC based on an agglomerate model for catalyst layer. *J Energy Inst* 2014;87:163–74. doi:10.1016/j.joei.2014.03.004.
- [61] Perng SW, Wu HW. Effect of the prominent catalyst layer surface on reactant gas transport and cell performance at the cathodic side of a PEMFC. *Appl Energy* 2010;87:1386–99. doi:10.1016/j.apenergy.2009.08.006.
- [62] Mathieu-Potvin F, Gosselin L. Optimal topology and distribution of catalyst in PEMFC. *Int J Hydrogen Energy* 2014;39:7382–401. doi:10.1016/j.ijhydene.2014.02.098.
- [63] Khajeh-Hosseini-Dalasm N, Fesanghary M, Fushinobu K, Okazaki K. A study of the agglomerate catalyst layer for the cathode side of a proton exchange membrane fuel cell: Modeling and optimization. *Electrochim Acta* 2012;60:55–65. doi:10.1016/j.electacta.2011.10.099.
- [64] Srinivasarao M, Bhattacharyya D, Rengaswamy R. Optimization studies of a polymer electrolyte membrane fuel cell with multiple catalyst layers. *J Power Sources* 2012;206:197–203. doi:10.1016/j.jpowsour.2012.01.135.
- [65] Srinivasarao M, Bhattacharyya D, Rengaswamy R, Narasimhan S. Performance analysis of a PEM fuel cell cathode with multiple catalyst layers. *Renew Energy* 2010;35:6356–65. doi:10.1016/j.ijhydene.2010.03.092.

- [66] Akyalçın L, Kaytakoğlu S. Optimization of structural combinations on the performance of a PEMFC's MEA. *J Power Sources* 2008;180:767–72. doi:10.1016/j.jpowsour.2008.02.036.
- [67] Liu W, Wan L, Liu J, Zhao M, Zou Z. Performance improvement of the open-cathode proton exchange membrane fuel cell by optimizing membrane electrode assemblies. *Int J Hydrogen Energy* 2015;40:7159–67. doi:10.1016/j.ijhydene.2015.04.025.
- [68] Khazae I, Ghazikhani M. Performance improvement of proton exchange membrane fuel cell by using annular shaped geometry. *J Power Sources* 2011;196:2661–8. doi:10.1016/j.jpowsour.2010.11.052.
- [69] Alaefour I, Karimi G, Jiao K, Shakhshir S Al, Li X. Experimental study on the effect of reactant flow arrangements on the current distribution in proton exchange membrane fuel cells. *Electrochim Acta* 2011;56:2591–8. doi:10.1016/j.electacta.2010.11.002.
- [70] Alaefour I, Karimi G, Jiao K, Li X. Measurement of current distribution in a proton exchange membrane fuel cell with various flow arrangements - A parametric study. *Appl Energy* 2012;93:80–9. doi:10.1016/j.apenergy.2011.05.033.
- [71] S. Cano-andrade, A. Hernandez-guerrero, M.R. Von Spakovsky, Current density and polarization curves for radial flow field patterns applied to PEMFCs (Proton Exchange Membrane Fuel Cells), *Energy*. 35 (2010) 920–927. doi:10.1016/j.energy.2009.07.045.
- [72] J. Jang, C. Cheng, W. Liao, Y. Huang, Y. Tsai, Experimental and numerical study of proton exchange membrane fuel cell with spiral flow channels, *Appl. Energy*. 99 (2012) 67–79. doi:10.1016/j.apenergy.2012.04.011.
- [73] N. Guo, M.C. Leu, U.O. Koylu, ScienceDirect Bio-inspired flow field designs for polymer electrolyte membrane fuel cells, *Int. J. Hydrogen Energy*. 39 (2014) 21185–21195. doi:10.1016/j.ijhydene.2014.10.069.
- [74] Y. Kerkoub, A. Benzaoui, F. Haddad, Y.K. Ziari, Channel to rib width ratio in fl uence with various fl ow fi eld designs on performance of PEM fuel cell, *Energy Convers. Manag.* 174 (2018) 260–275. doi:10.1016/j.enconman.2018.08.041.
- [75] S. Shimpalee, J.W. Van Zee, Numerical studies on rib & channel dimension of flow-field on PEMFC performance, 32 (2007) 842–856. doi:10.1016/j.ijhydene.2006.11.032.
- [76] A. Kumar, R.G. Reddy, Effect of channel dimensions and shape in the flow-field distributor on the performance of polymer electrolyte membrane fuel cells, 113 (2003) 11–18.
- [77] Ahmed DH, Sung HJ. Effects of channel geometrical configuration and shoulder width on PEMFC performance at high current density. *J Power Sources* 2006;162:327–39. doi:10.1016/j.jpowsour.2006.06.083.

- [78] Sun L, Oosthuizen PH, McAuley KB. 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. *Int J Therm Sci* 2006;45:1021–6. doi:10.1016/j.ijthermalsci.2006.01.005.
- [79] Owejan JP, Trabold TA, Jacobson DL, Arif M, Kandlikar SG. Effects of flow field and diffusion layer properties on water accumulation in a PEM fuel cell. *Int J Hydrogen Energy* 2007;32:4489–502. doi:10.1016/j.ijhydene.2007.05.044.
- [80] T. Metz, N. Paust, M. Claas, R. Zengerle, P. Koltay, Passive water removal in fuel cells by capillary droplet actuation, 143 (2008) 49–57. doi:10.1016/j.sna.2007.06.037.
- [81] N. Akhtar, A. Qureshi, J. Scholta, C. Hartnig, M. Messerschmidt, W. Lehnert, Investigation of water droplet kinetics and optimization of channel geometry for PEM fuel cell cathodes, *Int. J. Hydrogen Energy*. 34 (2009) 3104–3111. doi:10.1016/j.ijhydene.2009.01.022.
- [82] N. Bunmark, S. Limtrakul, M.W. Fowler, T. Vatanatham, J. Gostick, Assisted water management in a PEMFC with a modified flow field and its effect on performance, *Int. J. Hydrogen Energy*. 35 (2010) 6887–6896. doi:10.1016/j.ijhydene.2010.04.027.
- [83] X. Zhu, Q. Liao, P.C. Sui, N. Djilali, Numerical investigation of water droplet dynamics in a low-temperature fuel cell microchannel : Effect of channel geometry, 195 (2010) 801–812. doi:10.1016/j.jpowsour.2009.08.021.
- [84] I. Khazaei, M. Ghazikhani, M. Mohammadiun, Sharif University of Technology Experimental and thermodynamic investigation of a triangular channel geometry PEM fuel cell at different operating conditions, *Sci. Iran*. 19 (2012) 585–593. doi:10.1016/j.scient.2011.11.039.
- [85] Y. Ben Salah, Y. Tabe, T. Chikahisa, Gas channel optimisation for PEM fuel cell using the lattice Boltzmann method, 28 (2012) 125–133. doi:10.1016/j.egypro.2012.08.046.
- [86] Wang XD, Lu G, Duan YY, Lee DJ. Numerical analysis on performances of polymer electrolyte membrane fuel cells with various cathode flow channel geometries. *Int J Hydrogen Energy* 2012;37:15778–86. doi:10.1016/j.ijhydene.2012.04.028.
- [87] I. Khazaei, M. Mohammadiun, NUMERICAL INVESTIGATION OF CHANNEL GEOMETRY ON THE, 18 (2013) 85–98. doi:10.2478/ijame-2013-0006.
- [88] I. Khazaei, Improvement the equation of polarization curve of a proton exchange membrane fuel cell at different channel geometry, (2015). doi:10.1007/s00231-015-1531-5.
- [89] N. Ahmadi, S. Rezazadeh, A. Dadvand, I. Mirzaee, Study of the Effect of Gas Channels Geometry on the Performance of Polymer Electrolyte Membrane Fuel, 62 (2018) 97–105.

- [90] Y. Xu, L. Peng, P. Yi, X. Lai, Analysis of the flow distribution for thin stamped bipolar plates with tapered channel shape, *Int. J. Hydrogen Energy*. 41 (2016) 5084–5095. doi:10.1016/j.ijhydene.2016.01.073.
- [91] I. Korkischko, B.S. Carmo, F.C. Fonseca, Shape Optimization of PEMFC Flow-channel Cross-Sections, (2017) 809–815. doi:10.1002/fuce.201700168.
- [92] A.L.R. Paulino, E.F. Cunha, E. Robalinho, M. Linardi, I. Korkischko, E.I. Santiago, CFD Analysis of PEMFC Flow Channel Cross Sections, (2017) 1–10. doi:10.1002/fuce.201600141.
- [93] J.H. Kim, Numerical Investigation of Gas-Liquid Two-Phase Flow inside PEMFC Gas Channels with Rectangular and Trapezoidal Cross Sections, (2018). doi:10.3390/en11061403.
- [94] R. Hadjadj, W. Kaabar, NUMERICAL INVESTIGATION OF FLOW FIELD IN PROTON EXCHANGE MEMBRANE FUEL CELL AT, 13 (2018) 1070–1089.
- [95] Monsaf, T., Moussa, B., & Youcef, S. (2017). ScienceDirect Unsteady three-dimensional numerical study of mass transfer in PEM fuel cell with spiral flow field. *International Journal of Hydrogen Energy*, 42(2), 1237–1251. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2016.12.084>
- [96] Zahi, I., Rossi, C., & Fauchaux, V. (2011). Micro PEM fuel cell current collector design and optimization with CFD 3D modeling. *International Journal of Hydrogen Energy*, 36(22), 14562–14572. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2011.08.020>
- [97] Mohammadi-Ahmar A, Osanloo B, Solati A, Ghasemi J. Performance improvement of the circular tubular PEMFC by using different architectures and number of layers. *Energy Convers Manag* 2016;128:238–49. doi:10.1016/j.enconman.2016.09.074.
- [98] Zeng, X., Ge, Y., Shen, J., Zeng, L., Liu, Z., & Liu, W. (2017). *International Journal of Heat and Mass Transfer* The optimization of channels for a proton exchange membrane fuel cell applying genetic algorithm, 105, 81–89.
- [99] Huang, C. H., Chen, L. Y., & Kim, S. (2009). An inverse geometry design problem in optimizing the shape of the gas channel for a proton exchange membrane fuel cell. *Journal of Power Sources*, 187(1), 136–147. <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2008.10.093>
- [100] Wang, X., Huang, Y., Cheng, C., Jang, J., Lee, D., Yan, W., & Su, A. (2010). An inverse geometry design problem for optimization of single serpentine flow field of PEM fuel cell. [100] *International Journal of Hydrogen Energy*, 35(9), 4247–4257. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2010.02.059>
- [101] Wu, H., & Ku, H. (2011). The optimal parameters estimation for rectangular cylinders installed transversely in the flow channel of PEMFC from a three-dimensional PEMFC model

and the Taguchi method. *Applied Energy*, 88(12), 4879–4890. <https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2011.06.034>

[102] Barati, S., Khoshandam, B., & Ghazi, M. M. (2018). ScienceDirect An investigation of channel blockage effects on hydrogen mass transfer in a proton exchange membrane fuel cell with various geometries and optimization by response surface methodology. *International Journal of Hydrogen Energy*, 43(48), 21928–21939. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2018.10.032>

[103] Xing, X. Q., Lum, K. W., Poh, H. J., & Wu, Y. L. (2009). Geometry optimization for proton-exchange membrane fuel cells with sequential quadratic programming method, 186, 10–21. <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2008.09.096>

[104] Cheng, S., Miao, J., & Wu, S. (2012). Investigating the effects of operational factors on PEMFC performance based on CFD simulations using a three-level full-factorial design. *Renewable Energy*, 39(1), 250–260. <https://doi.org/10.1016/j.renene.2011.08.009>

[105] Wilberforce, T., El-Hassan, Z., Khatib, F. N., Al Makky, A., Mooney, J., Barouaji, A., ... Olabi, A. G. (2017). Development of Bi-polar plate design of PEM fuel cell using CFD techniques. *International Journal of Hydrogen Energy*, 42(40), 25663–25685. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2017.08.093>

[106] Fontana, É., Mancusi, E., Da Silva, A., Mariani, V. C., Ulson De Souza, A. A., & Ulson De Souza, S. M. A. G. (2011). Study of the effects of flow channel with non-uniform cross-sectional area on PEMFC species and heat transfer. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 54(21–22), 4462–4472. <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2011.06.037>

[107] Saco, S. A., Karuppa, R. T., & Karthikeyan, P. (2016). A study on scaled up proton exchange membrane fuel cell with various flow channels for optimizing power output by effective water management using numerical technique. *Energy*, 113, 558–573. <https://doi.org/10.1016/j.energy.2016.07.079>

[108] Li, W., Zhang, Q., Wang, C., Yan, X., Shen, S., Xia, G., ... Zhang, J. (2017). Experimental and numerical analysis of a three-dimensional flow field for PEMFCs. *Applied Energy*, 195, 278–288. <https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2017.03.008>

[109] Chowdhury, M. Z., Genc, O., & Toros, S. (2018). Numerical optimization of channel to land width ratio for PEM fuel cell. *International Journal of Hydrogen Energy*, 43(23), 10798–10809. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2017.12.149>

[110] Wen D hui, Yin L zhi, Piao Z yu, Lu C da, Li G, Leng Q hui. Performance investigation of proton exchange membrane fuel cell with intersectant flow field. *Int J Heat Mass Transf* 2018;121:775–87. doi:10.1016/j.ijheatmasstransfer.2018.01.053.

- [111] Ziauddin, M., & Timurkutluk, B. (2018). Transport phenomena of convergent and divergent serpentine flow fields for PEMFC. *Energy*, 161, 104–117. <https://doi.org/10.1016/j.energy.2018.07.143>
- [112] Fan, L., Niu, Z., Zhang, G., & Jiao, K. (2018). Optimization design of the cathode flow channel for proton exchange membrane fuel cells. *Energy Conversion and Management*, 171(May), 1813–1821. <https://doi.org/10.1016/j.enconman.2018.06.111>
- [113] Yan, X., Guan, C., Zhang, Y., Jiang, K., Wei, G., & Cheng, X. (2019). Flow field design with 3D geometry for proton exchange membrane fuel cells. *Applied Thermal Engineering*, 147(September 2018), 1107–1114. <https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2018.09.110>
- [114] Atyabi, S. A., & Afshari, E. (2019). Three-dimensional multiphase model of proton exchange membrane fuel cell with honeycomb flow field at the cathode side. *Journal of Cleaner Production*, 214, 738–748. <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2018.12.293>
- [115] Ramin, F., Sadeghifar, H., & Torkavannejad, A. (2019). Flow field plates with trap-shape channels to enhance power density of polymer electrolyte membrane fuel cells. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 129, 1151–1160. <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2018.10.050>
- [116] 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. A review. *Int J Hydrogen Energy* 2012;37:15256–87. doi:10.1016/j.ijhydene.2012.07.076.
- [117] Li X, Sabir I. Review of bipolar plates in PEM fuel cells: Flow-field designs. *Int J Hydrogen Energy* 2005;30:359–71. doi:10.1016/j.ijhydene.2004.09.019.
- [118] Tiss F, Chouikh R, Guizani A. A numerical investigation of reactant transport in a PEM fuel cell with partially blocked gas channels. *Energy Convers Manag* 2014;80:32–8. doi:10.1016/j.enconman.2013.12.063
- [119] Ghanbarian A, Kermani MJ. Enhancement of PEM fuel cell performance by flow channel indentation. *Energy Convers Manag* 2016;110:356–66. doi:10.1016/j.enconman.2015.12.036.
- [120] Juarez-Robles D, Hernandez-Guerrero A, Ramos-Alvarado B, Elizalde-Blancas F, Damian-Ascencio CE. Multiple concentric spirals for the flow field of a proton exchange membrane fuel cell. *J Power Sources* 2011;196:8019–30. doi:10.1016/j.jpowsour.2011.05.029.

- [121] Al-Baghdadi. Studying the effect of material parameters on cell performance of tubular-shaped PEM fuel cell. *Energy Convers Manag* 2008;49:2986–96. doi:10.1016/j.enconman.2008.06.018.
- [122] Pourmahmoud N, Sadeghifar H, Torkavannejad A. A novel, state-of-the-art tubular architecture for polymer electrolyte membrane fuel cells: Performance enhancement, size and cost reduction. *Int J Heat Mass Transf* 2017;108:577–84. doi:10.1016/j.ijheatmasstransfer.2016.12.058.
- [123] Khazaee I, Ghazikhani M. Performance improvement of proton exchange membrane fuel cell by using annular shaped geometry. *J Power Sources* 2011;196:2661–8. doi:10.1016/j.jpowsour.2010.11.052.
- [124] Mohammadi-Ahmar A, Osanloo B, Solati A, Ghasemi J. Performance improvement of the circular tubular PEMFC by using different architectures and number of layers. *Energy Convers Manag* 2016;128:238–49. doi:10.1016/j.enconman.2016.09.074.
- [125] Osanloo B, Mohammadi-Ahmar A, Solati A. A numerical analysis on the effect of different architectures of membrane, CL and GDL layers on the power and reactant transportation in the square tubular PEMFC. *Int J Hydrogen Energy* 2016;41:10844–53. doi:10.1016/j.ijhydene.2016.04.228.
- [126] Torkavannejad A, Sadeghifar H, Pourmahmoud N, Ramin F. Novel architectures of polymer electrolyte membrane fuel cells: Efficiency enhancement and cost reduction. *Int J Hydrogen Energy* 2015;40:12466–77. doi:10.1016/j.ijhydene.2015.07.038.
- [127] Sierra JM, Figueroa-Ramirez SJ, Diaz SE, Vargas J, Sebastian PJ. Numerical evaluation of a PEM fuel cell with conventional flow fields adapted to tubular plates. *Int J Hydrogen Energy* 2014;39:16694–705. doi:10.1016/j.ijhydene.2014.04.078.
- [128] T.D. Canonsburg, ANSYS Fluent Meshing User ' s Guide, 15317 (2013) 724–746.
- [129] Springer T E, TAZ and SG, Springer TE, Zawodzinski T a., Gottesfeld S. Polymer Electrolyte Fuel Cell Model. *J Electrochem Soc* 1991;138:2331–42. doi:10.1149/1.2085971.
- [130] Fluent 14.0 Documentation, Fluent Inc.; 2010.
- [131] A. Hood, S. Slater, M. Bouchet, S.Z. Islam, *Renewable Energy in the Service of Mankind Vol I*, I (2015) 159–171. doi:10.1007/978-3-319-17777-9.
- [132] J.A. Ticiauelli, C.R. Derouin, valuation of plating in low catalyst loading electrodes to to attain high power densities in SPE fuel cells, 251 (1988) 275–295.
- [133] Iranzo A, Muñoz M, Rosa F, Pino J. Numerical model for the performance prediction of a PEM fuel cell. Model results and experimental validation. *Int J Hydrogen Energy* 2010;35:11533–50. doi:10.1016/j.ijhydene.2010.04.129.

- [134] Laribi, S., Mammari, K., Sahli, Y., Koussa, K. "Analysis and diagnosis of PEM fuel cell failure modes (flooding & drying) across the physical parameters of electrochemical impedance model: Using neural networks method." *Sustainable Energy Technol Assess* 34, (2019): 35-42.
- [135] Chorin a. "Numerical solution of the Navier-Stokes-equations." *Math Comput* 1968;22:745–762.
- [136] Wang, L., Husar, A., Zhou, T. & Liu, H. "A parametric study of PEM fuel cell performances." *Int. J. Hydrogen Energy* 2003; 28:1263–1272.

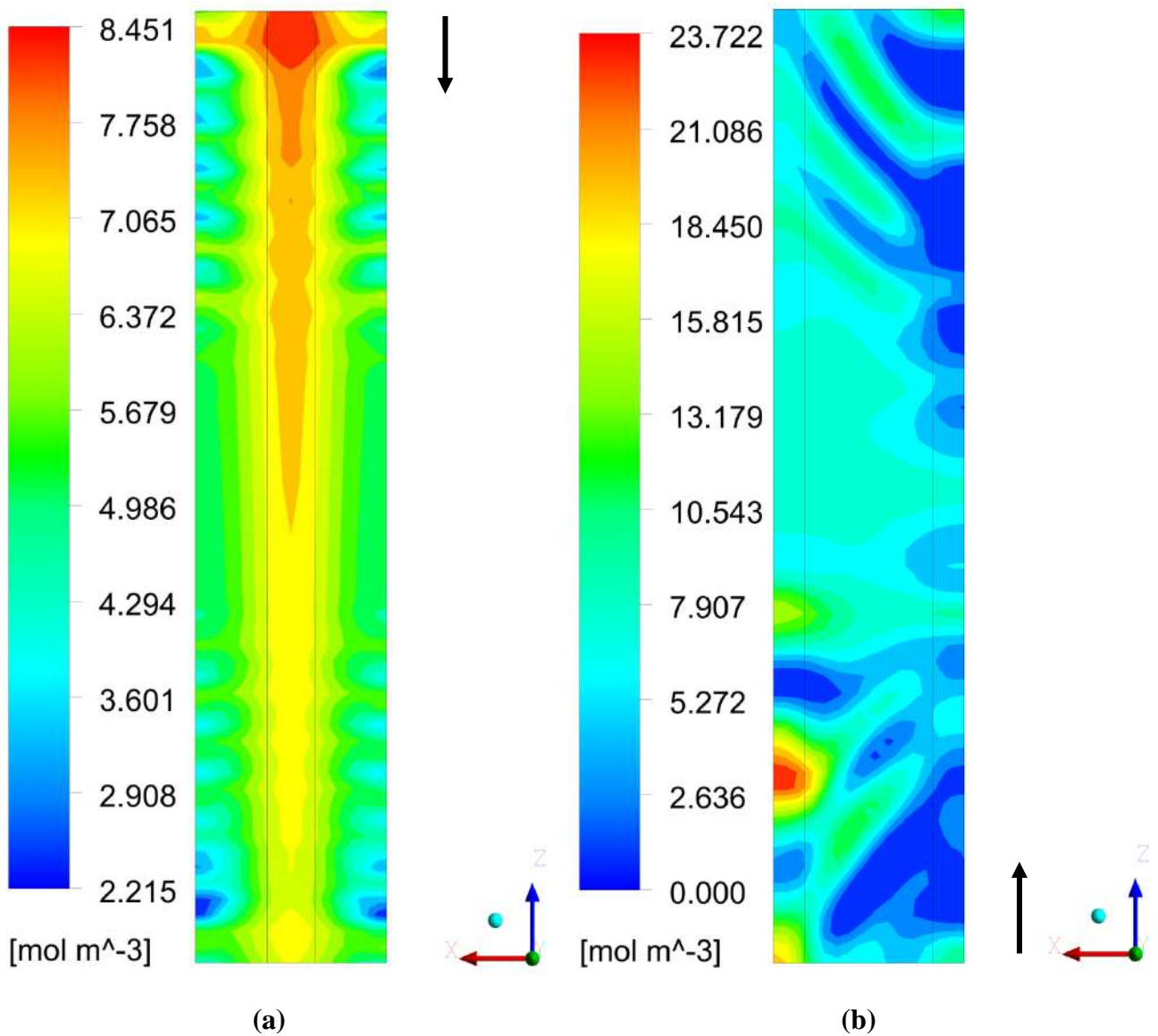


Fig.AI.1 Contours de la concentration molaire d'oxygène (a) meilleures dimensions, (b) pires dimensions, au niveau du catalyseur de la cathode et de l'interface de la membrane dans le plan ZX indiqué pour les PEMFC planaires à une tension de 0,45 V.

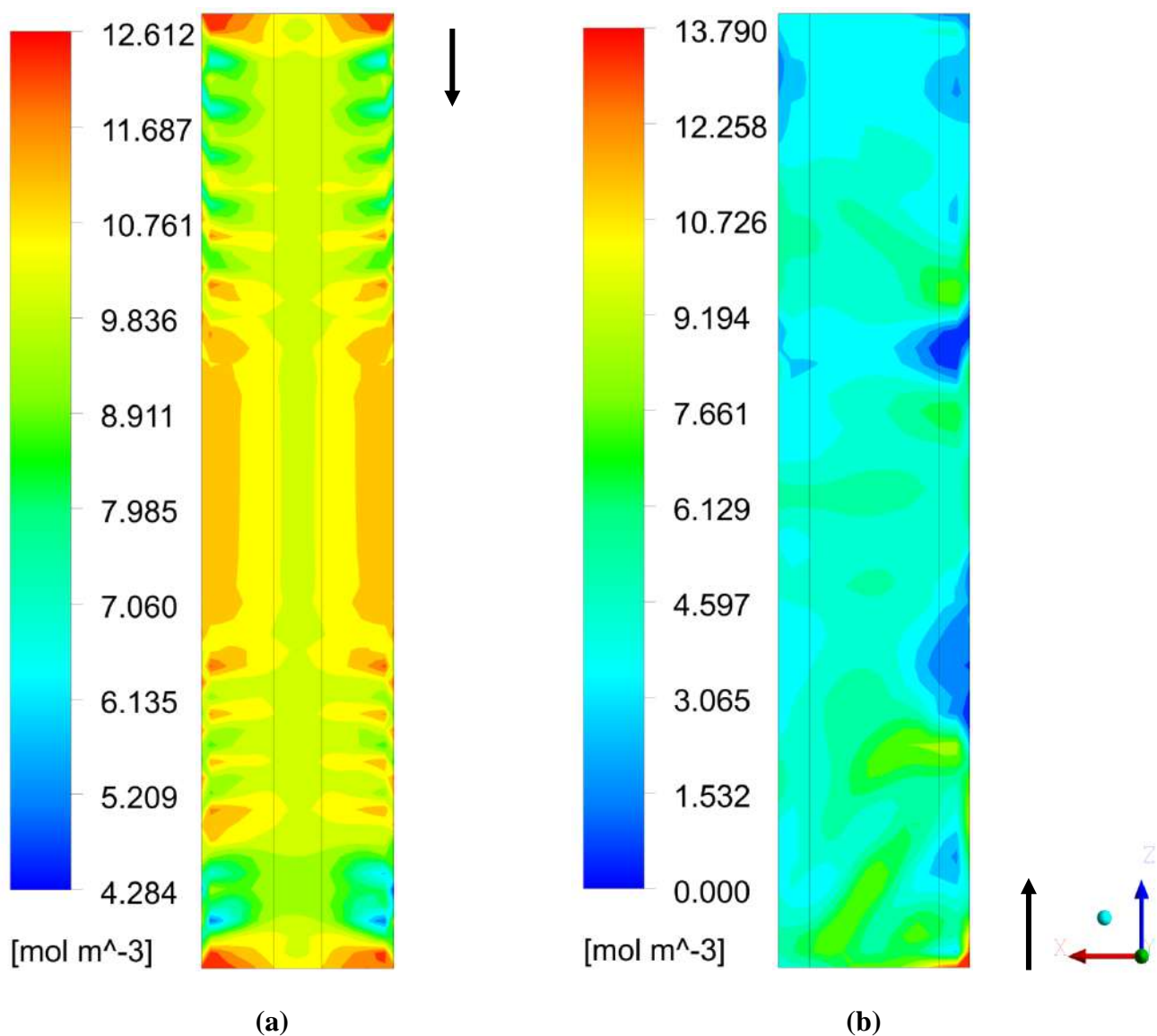


Fig.AI.2 Contours de la concentration molaire de vapeur d'eau (a) meilleures dimensions, (b) pires dimensions, au niveau du catalyseur de la cathode et de l'interface de la membrane dans le plan ZX indiqué pour les PEMFC planaires à une tension de 0,45 V.

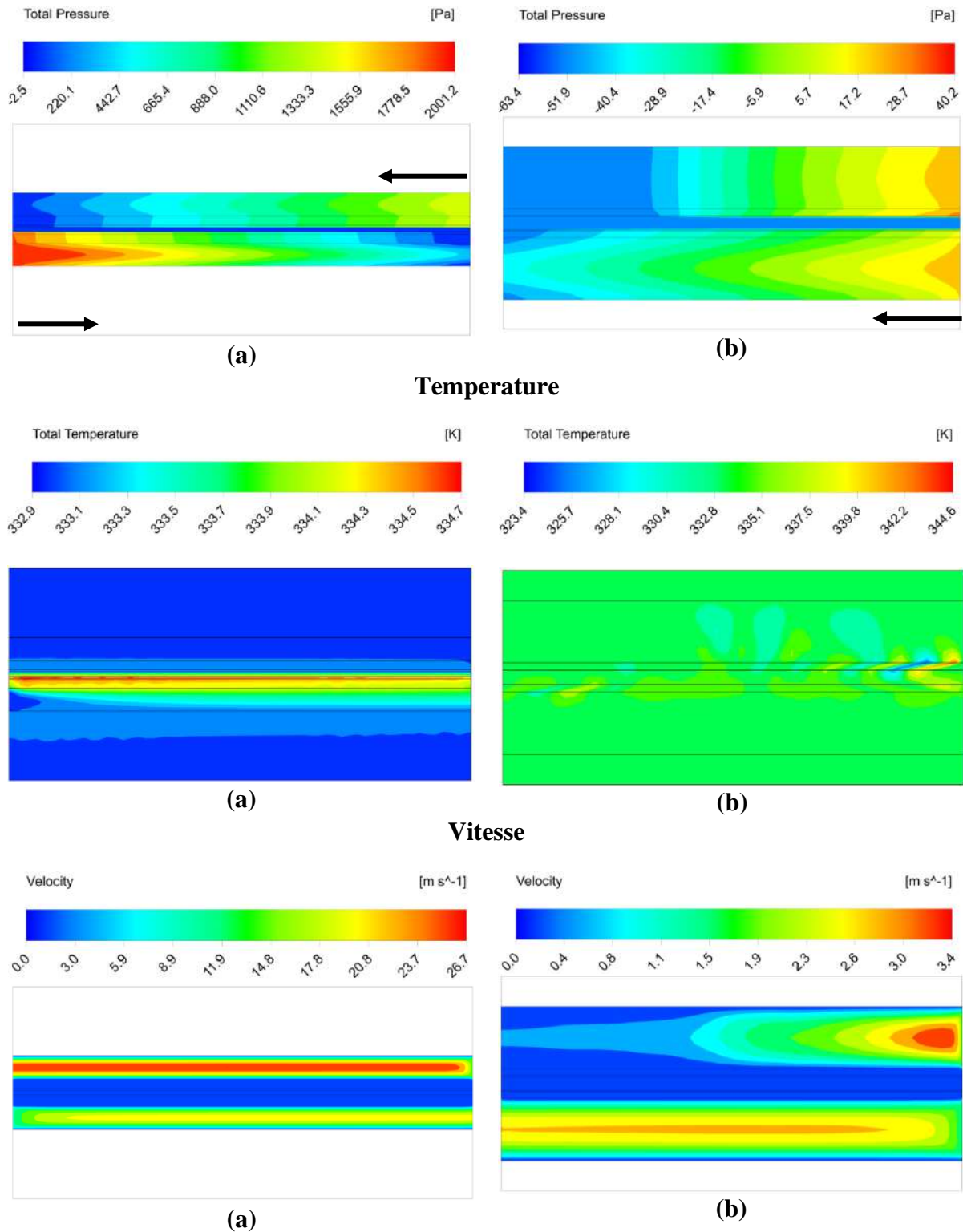


Fig.AI.3 Contours de la pression totale, de la température et de la vitesse, (a) meilleures dimensions, (b) pires dimensions, au milieu de la cellule dans le plan ZY indiqué pour les PEMFC planaires à la tension de 0,45 V.

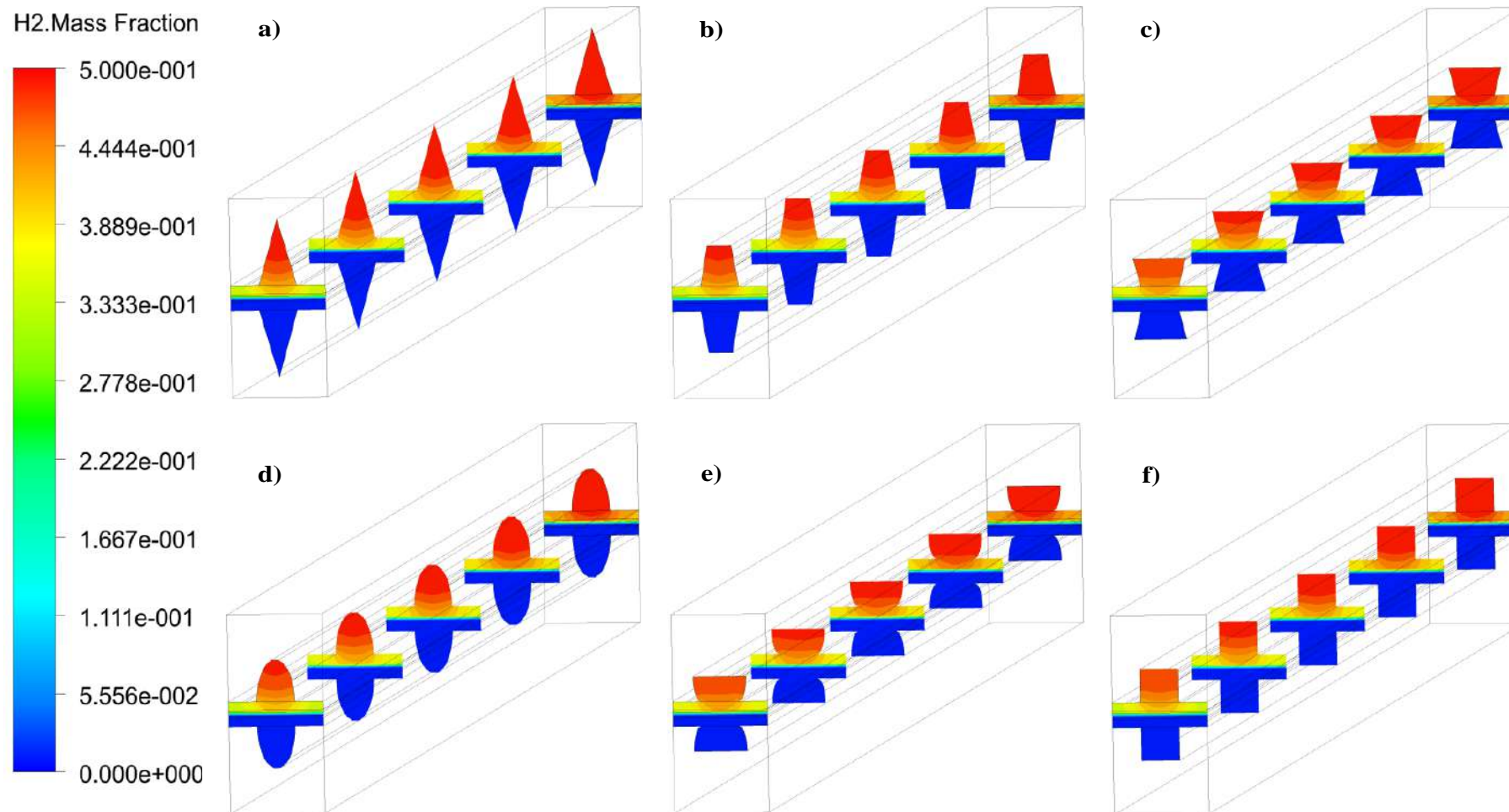


Fig.AII.1 Champs de fraction massique de H₂ des géométries de la section transversale du canal simple. a) Trg, b) Trp, c) I-Trp, d) Hlp, e) I-Hlp, f) Rct.

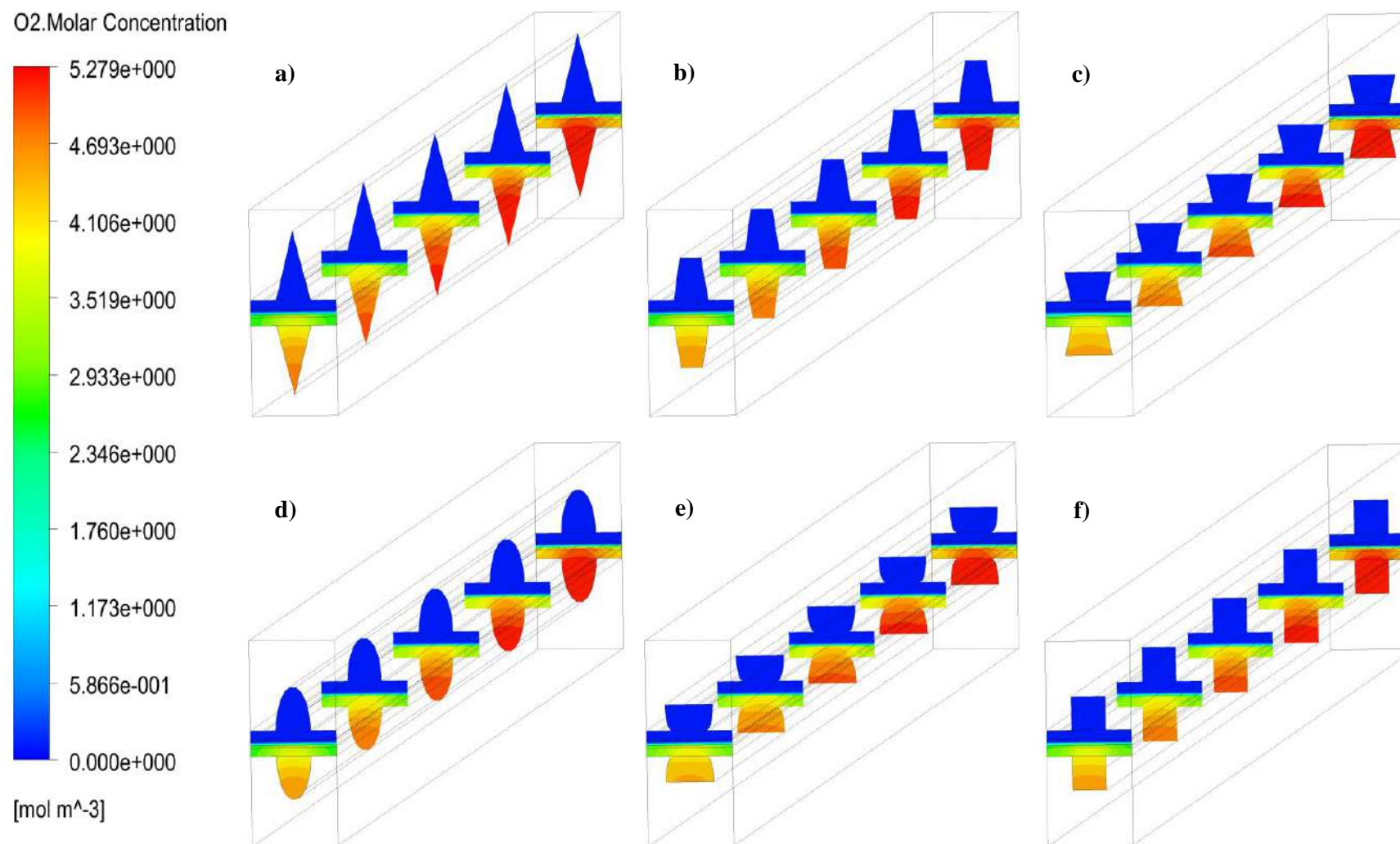


Fig.AII.2 Champs de concentration molaire O₂ des géométries de la section transversale du canal simple a) Trg, b) Trp, c) I-Trp, d) Hlp, e) I-Hlp, f) Rct.

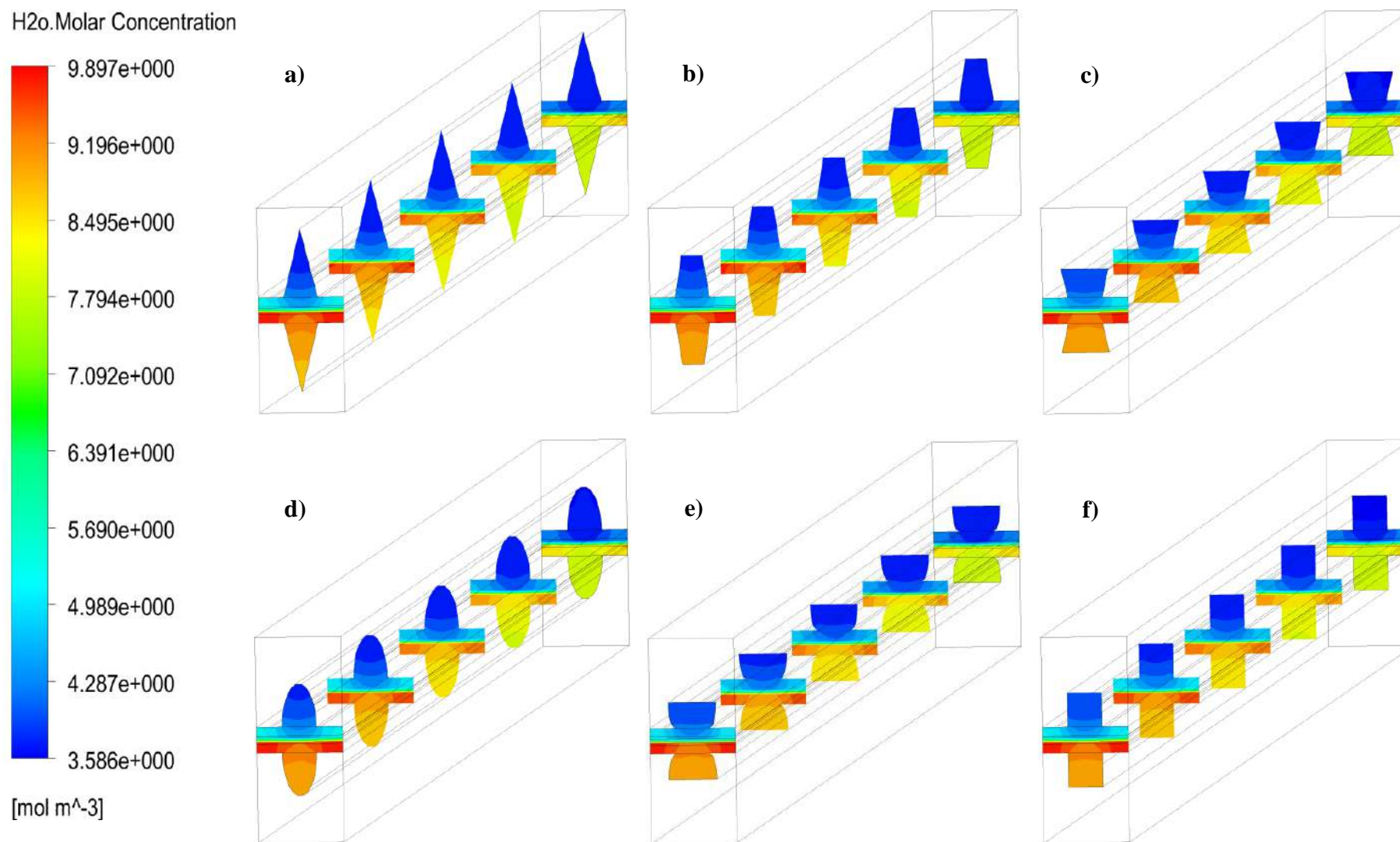


Fig.AII.3 Champs de concentration molaire H₂O des géométries de la section transversale du canal simple. a) Trg, b) Trp, c) I-Trp, d) Hlp, e) I-Hlp, f) Rct.

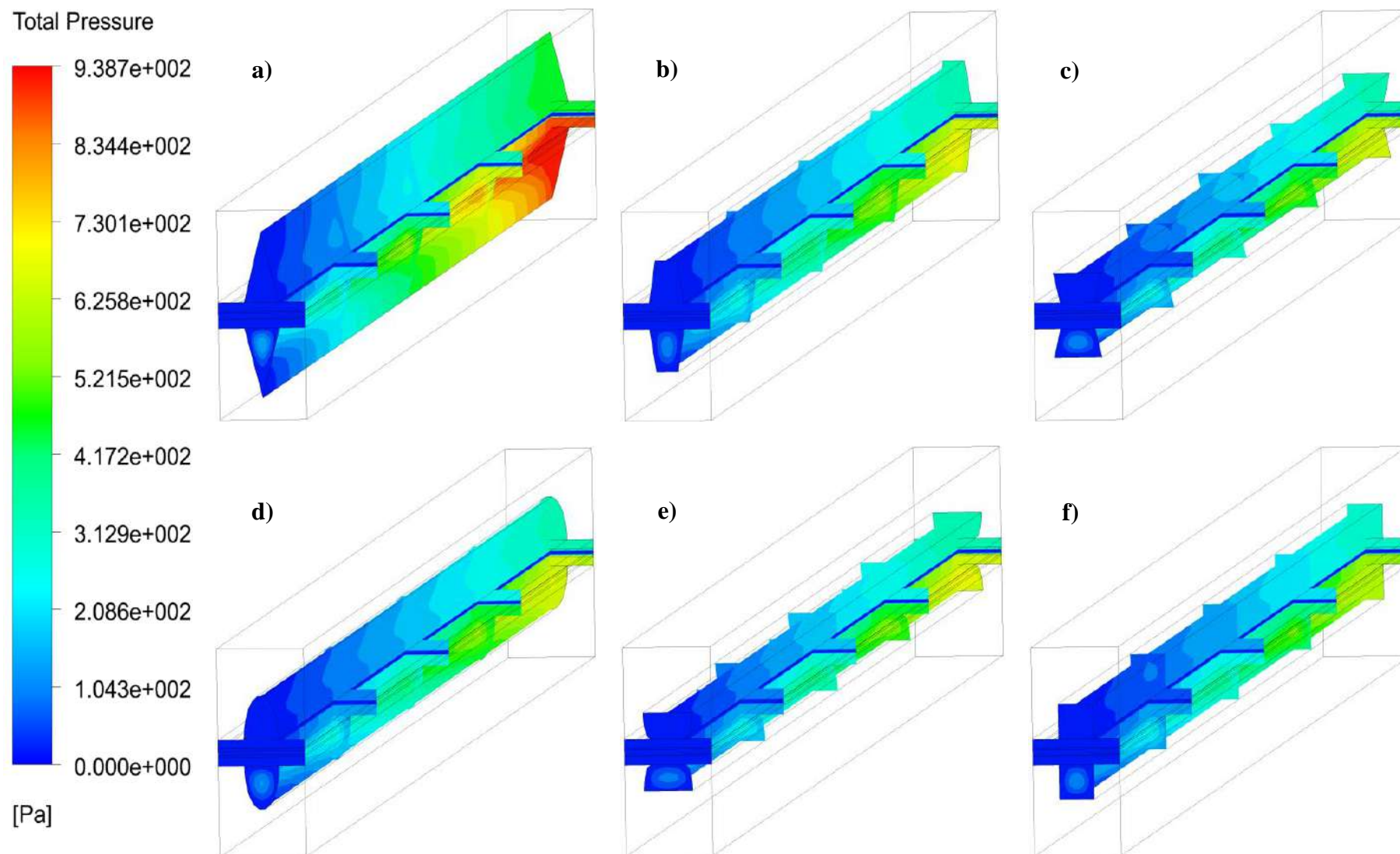


Fig.AII.4 Champs de pression totaux des géométries de la section transversale du canal simple. a) Trg, b) Trp, c) I-Trp, d) Hlp, e) I-Hlp, f) Rct.

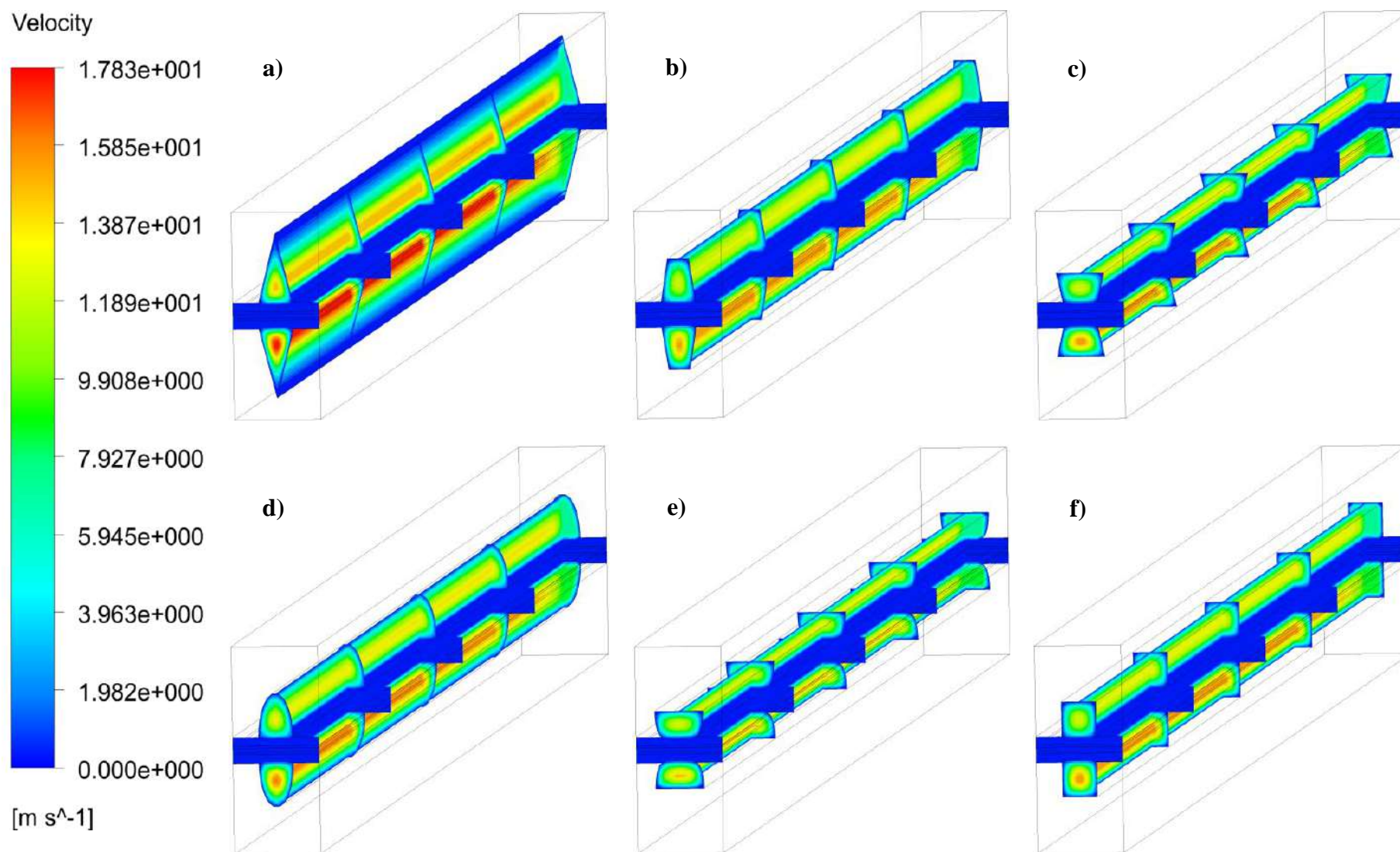


Fig.AII.5 Champs de vitesse des géométries de la section transversale du canal simple. a) Trg, b) Trp, c) I-Trp, d) Hlp, e) I-Hlp, f) Rct.

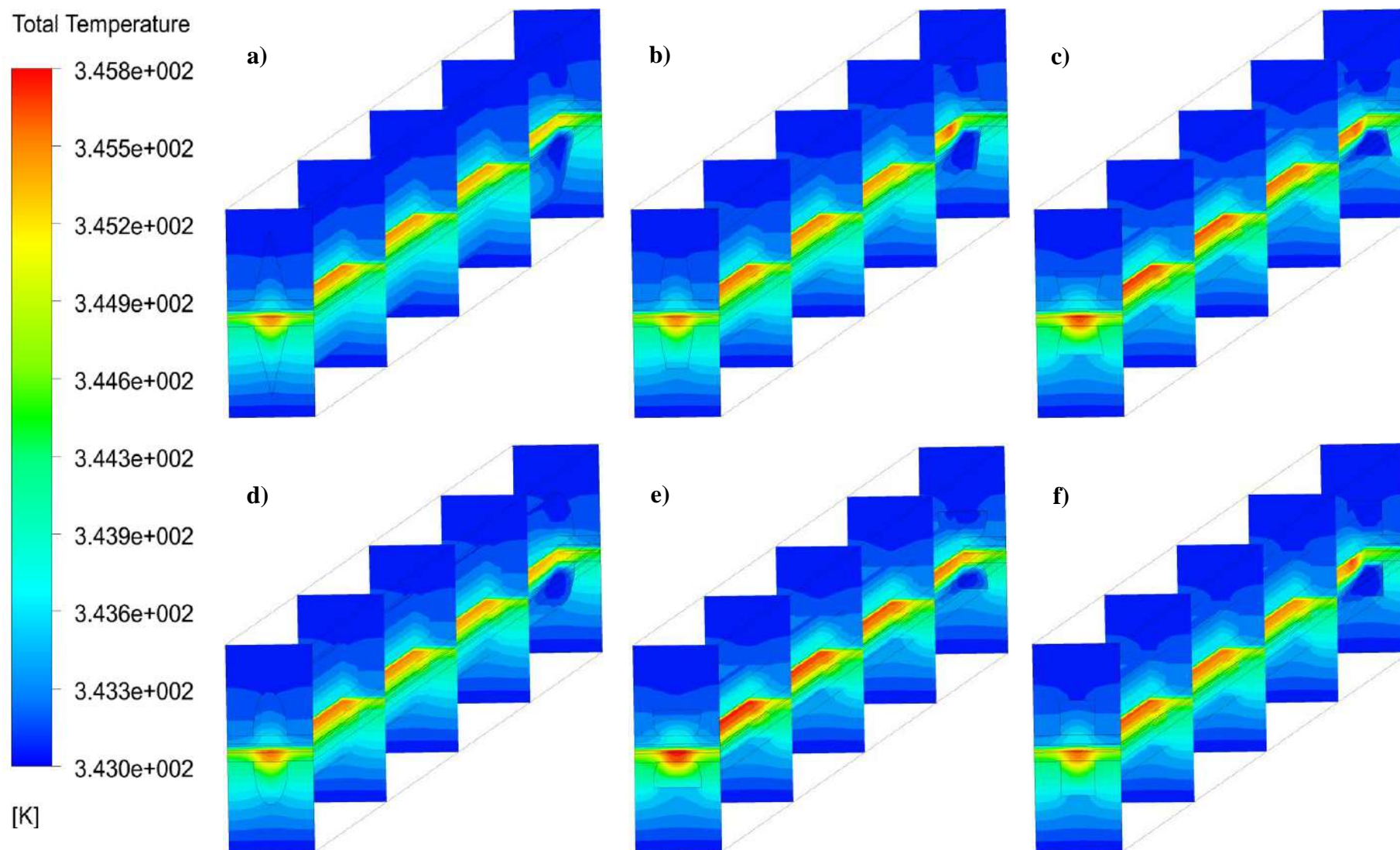


Fig.AII.6 Champ de température total des géométries de la section transversale du canal simple. a) Trg, b) Trp, c) I-Trp, d) Hlp, e) I-Hlp, f) Rct.

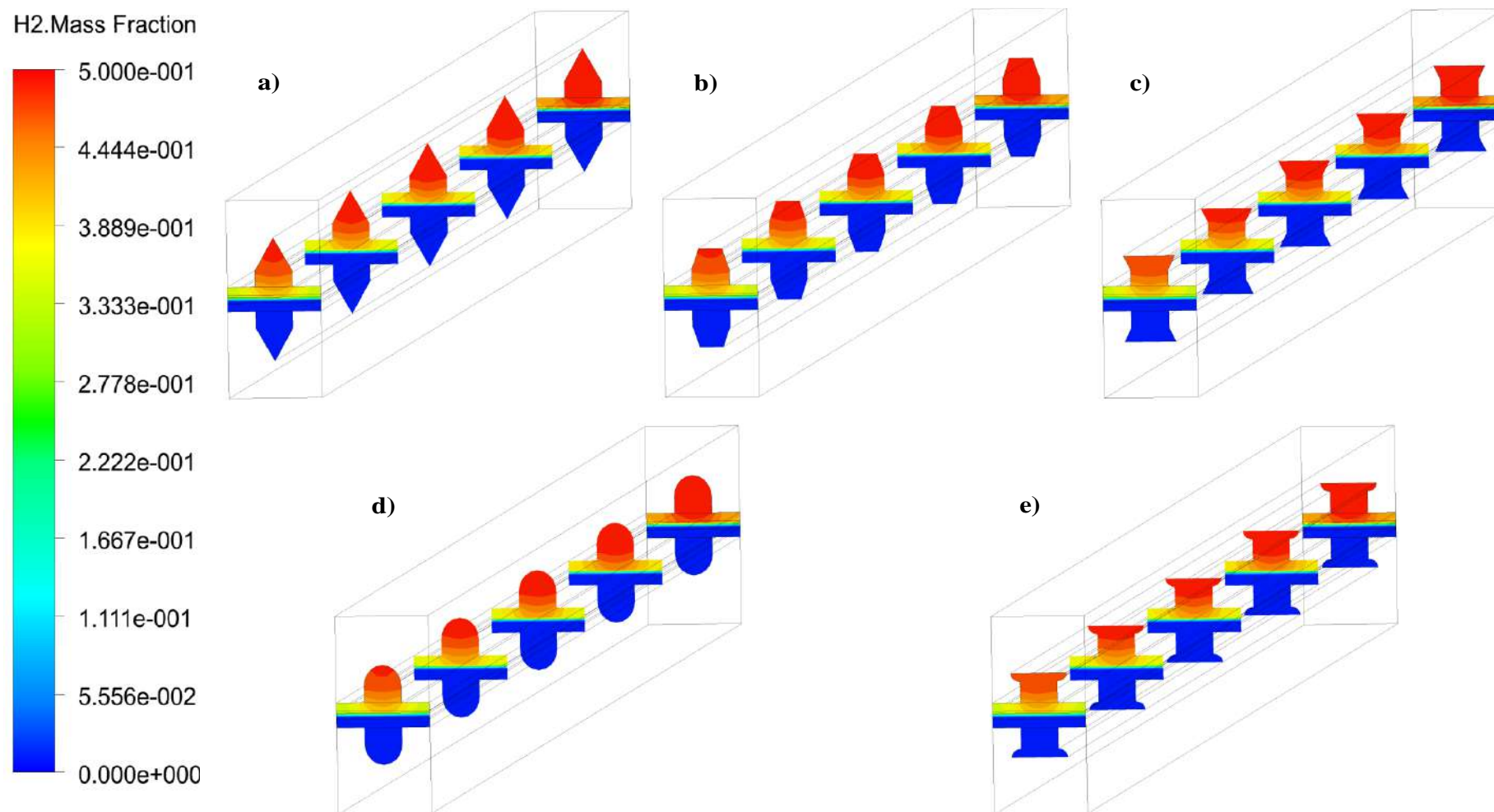


Fig.AII.7 Champs de fraction de masse H2 pour les géométries CCS de base rectangulaires. a) Rct-Trg, b) Rct-Trp, c) Rct-I-Trp, d) Rct-Hlp, e) Rct-I-Hlp.

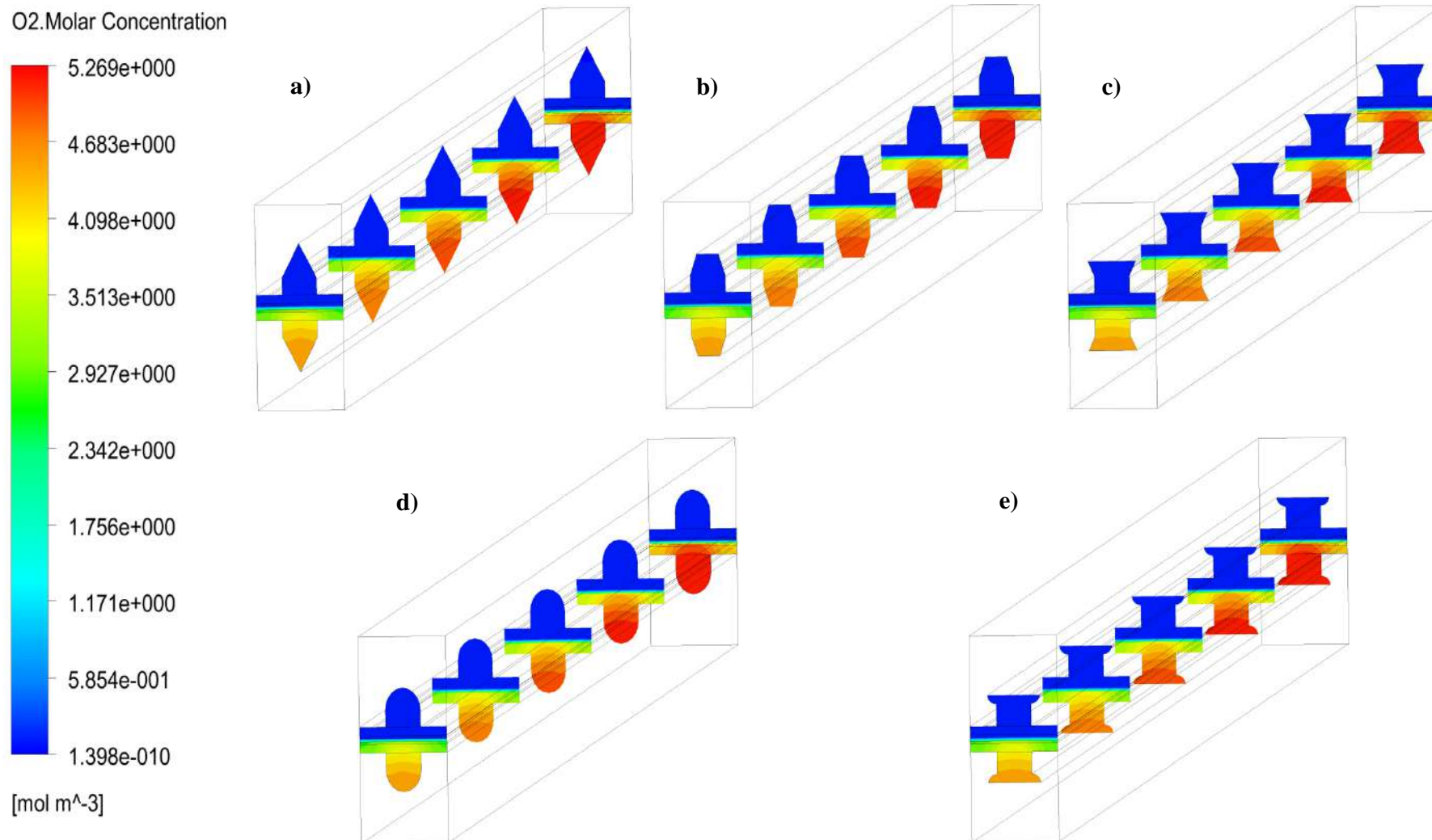


Fig.AII.8 Champs de concentration molaire O₂ pour les géométries CCS à base rectangulaire. a) Rct-Trg, b) Rct-Trp, c) Rct-I-Trp, d) Rct-Hlp, e) Rct-I-Hlp.

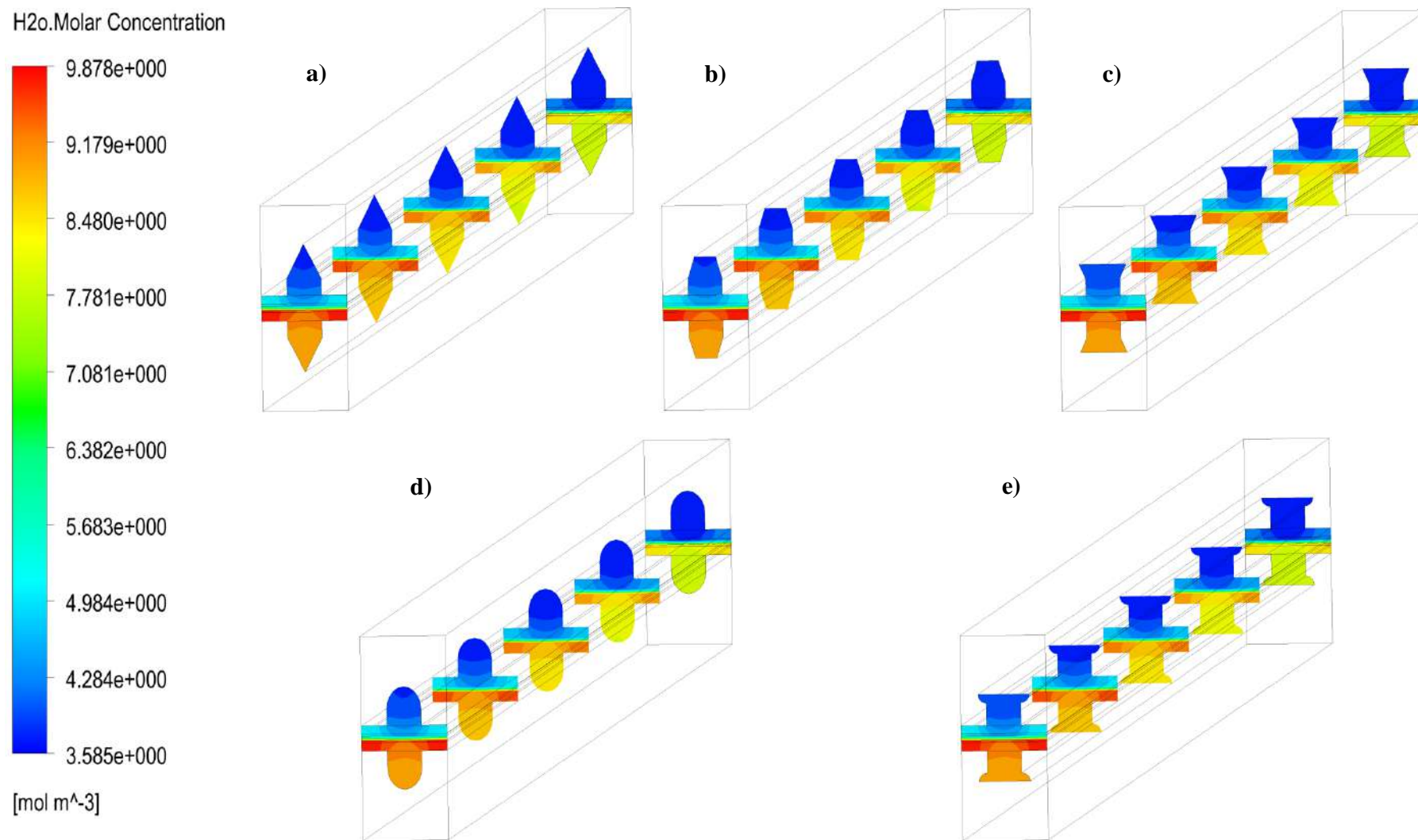


Fig.AII.9 Champs de concentration molaire H₂O pour les géométries CCS à base rectangulaire. a) Rct-Trg, b) Rct-Trp, c) Rct-I-Trp, d) Rct-Hlp, e) Rct-I-Hlp.

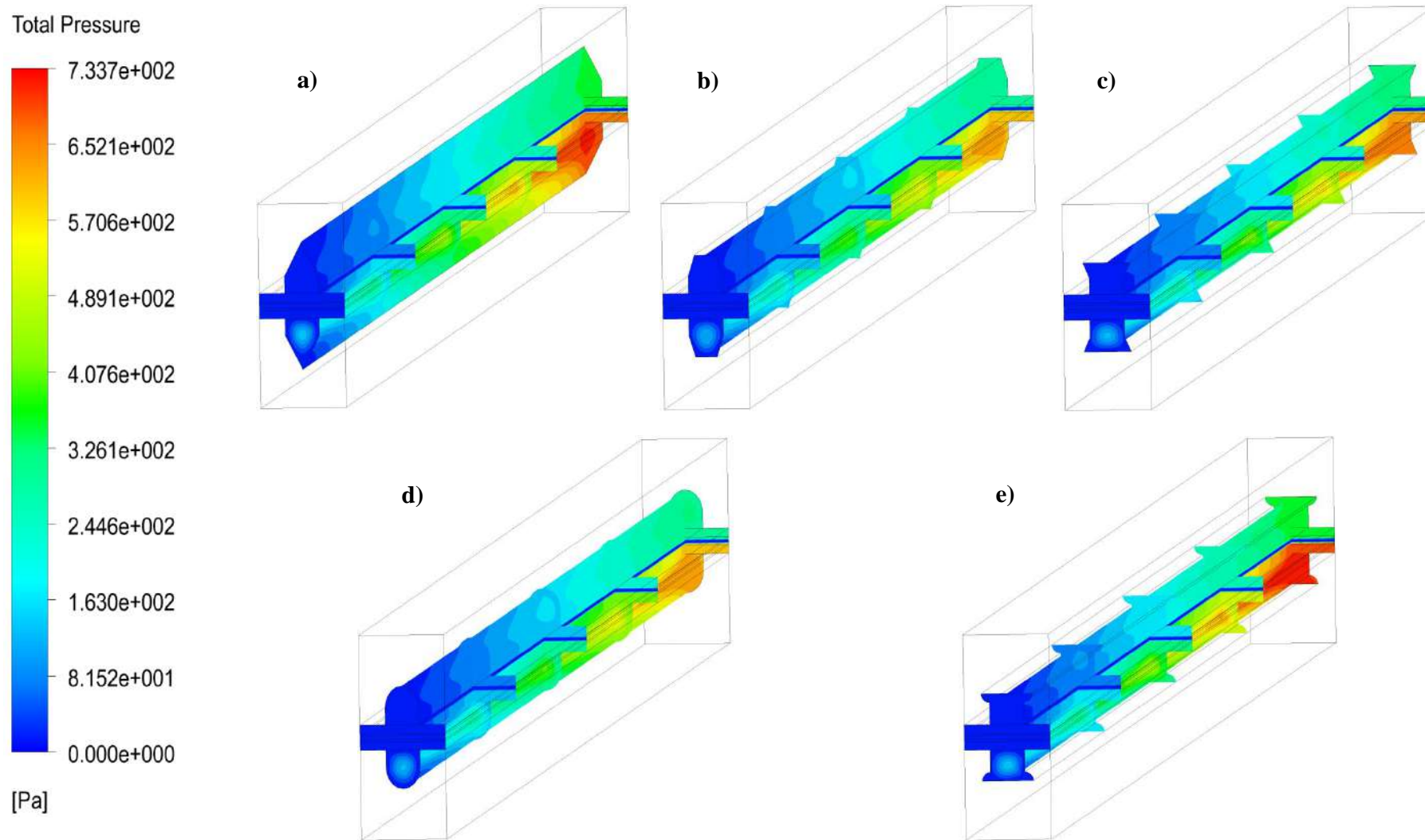


Fig.AII.10 Champs de pression totaux pour les géométries CCS à base rectangulaire. a) Rct-Trg, b) Rct-Trp, c) Rct-I-Trp, d) Rct-Hlp, e) Rct-I-Hlp.

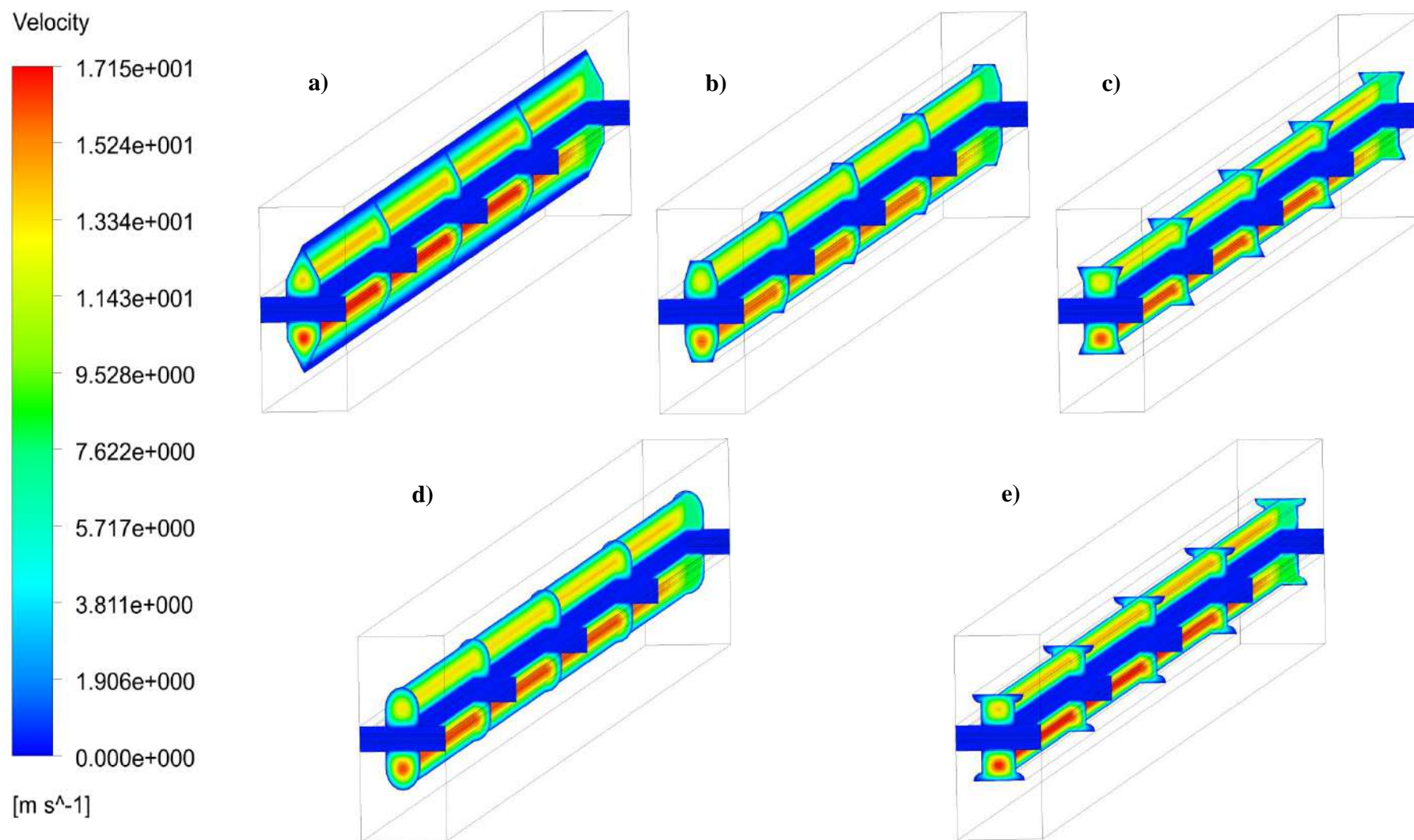


Fig.AII.11 Champs de vitesse pour les géométries CCS de base rectangulaires. a) Rct-Trg, b) Rct-Trp, c) Rct-I-Trp, d) Rct-Hlp, e) Rct-I-Hlp.

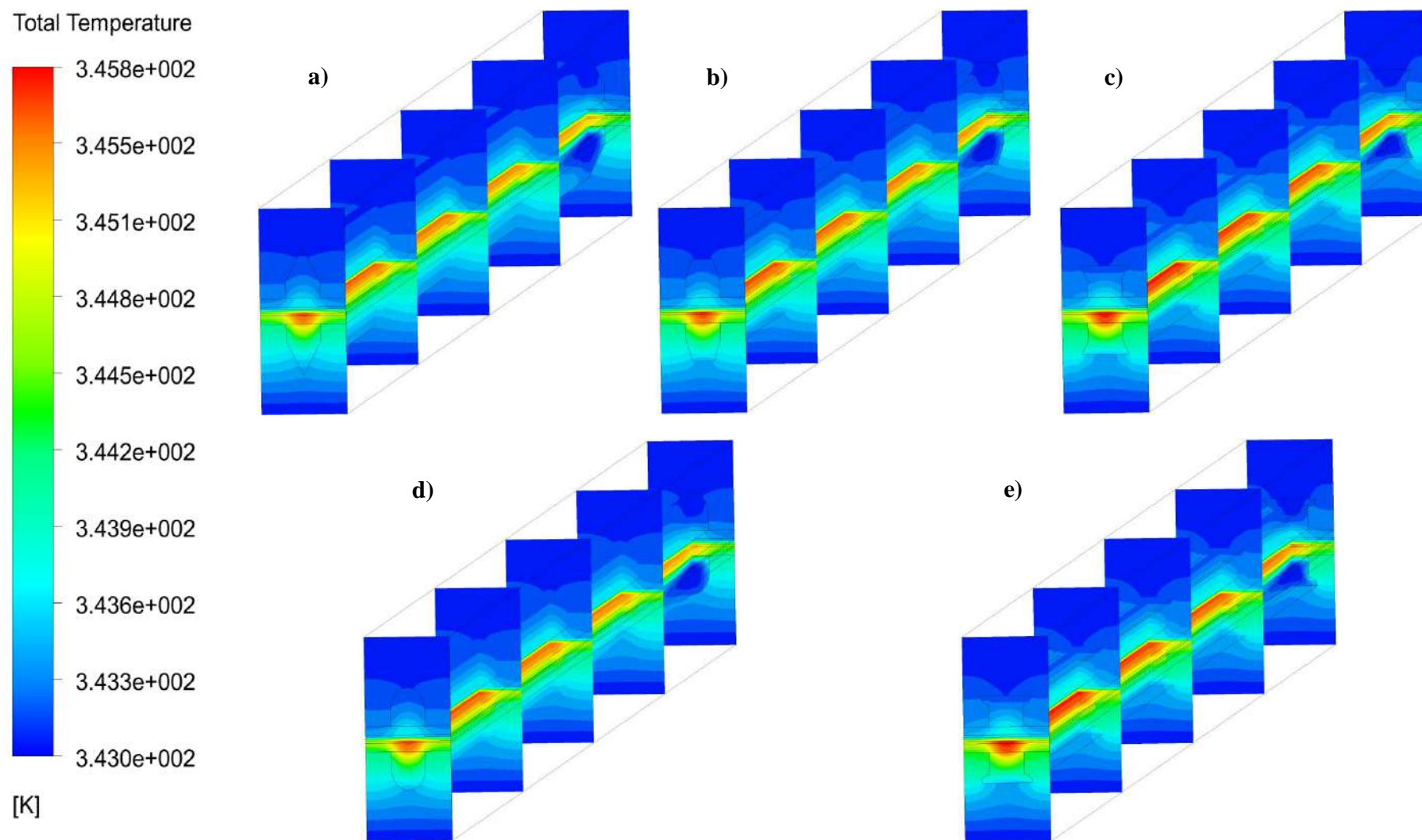


Fig.AII.12 Champs de température totale pour les géométries CCS de base rectangulaires. a) Rct-Trg, b) Rct-Trp, c) Rct-I-Trp, d) Rct-Hlp, e) Rct-I-Hlp.

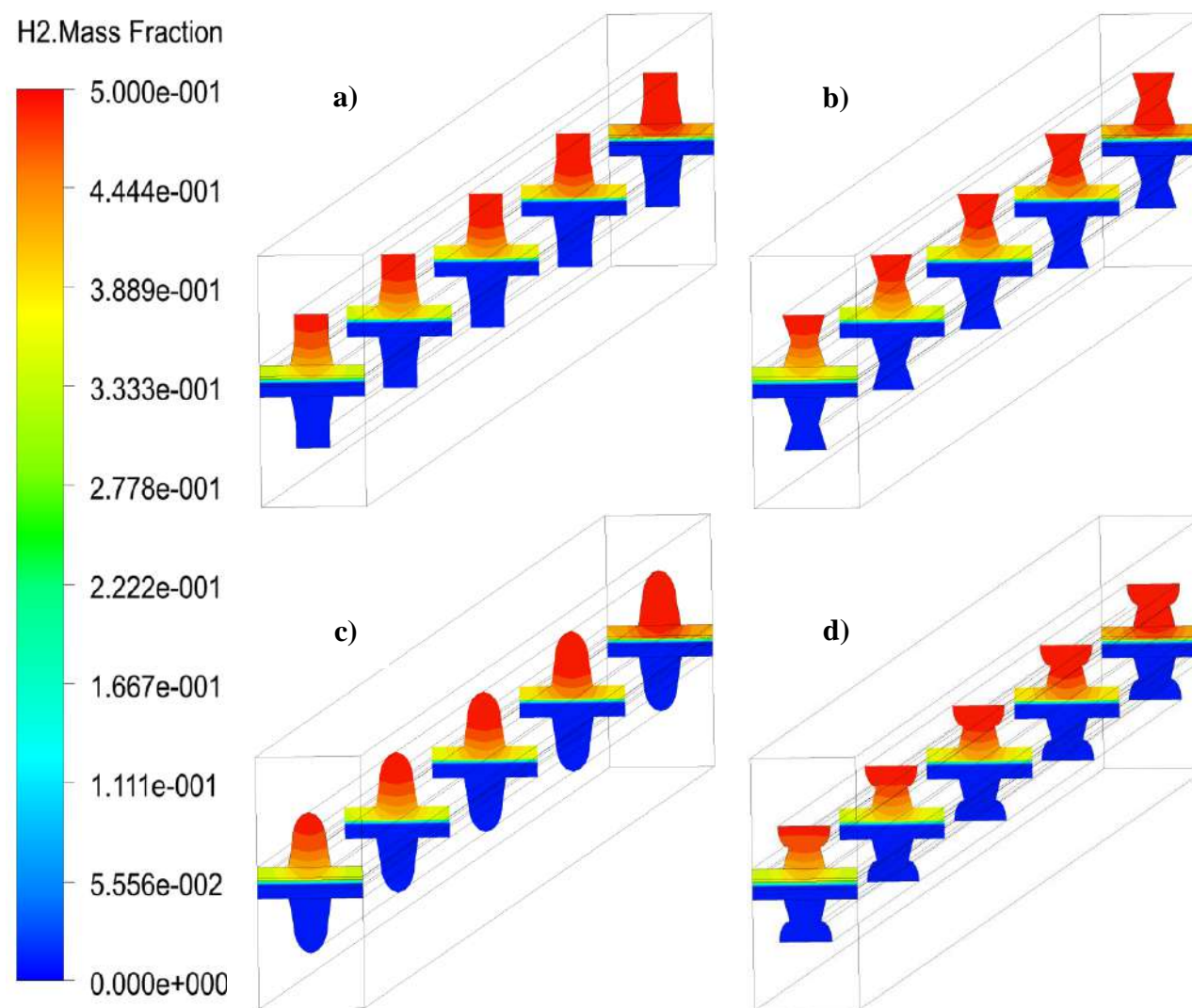


Fig.AII.13 Champs de fraction de masse H₂ pour les géométries CCS à base trapézoïdale. a) Trp-Rct, b) Trp-I-Trp, c) Trp-Hlp, d) Trp-I-Hlp.

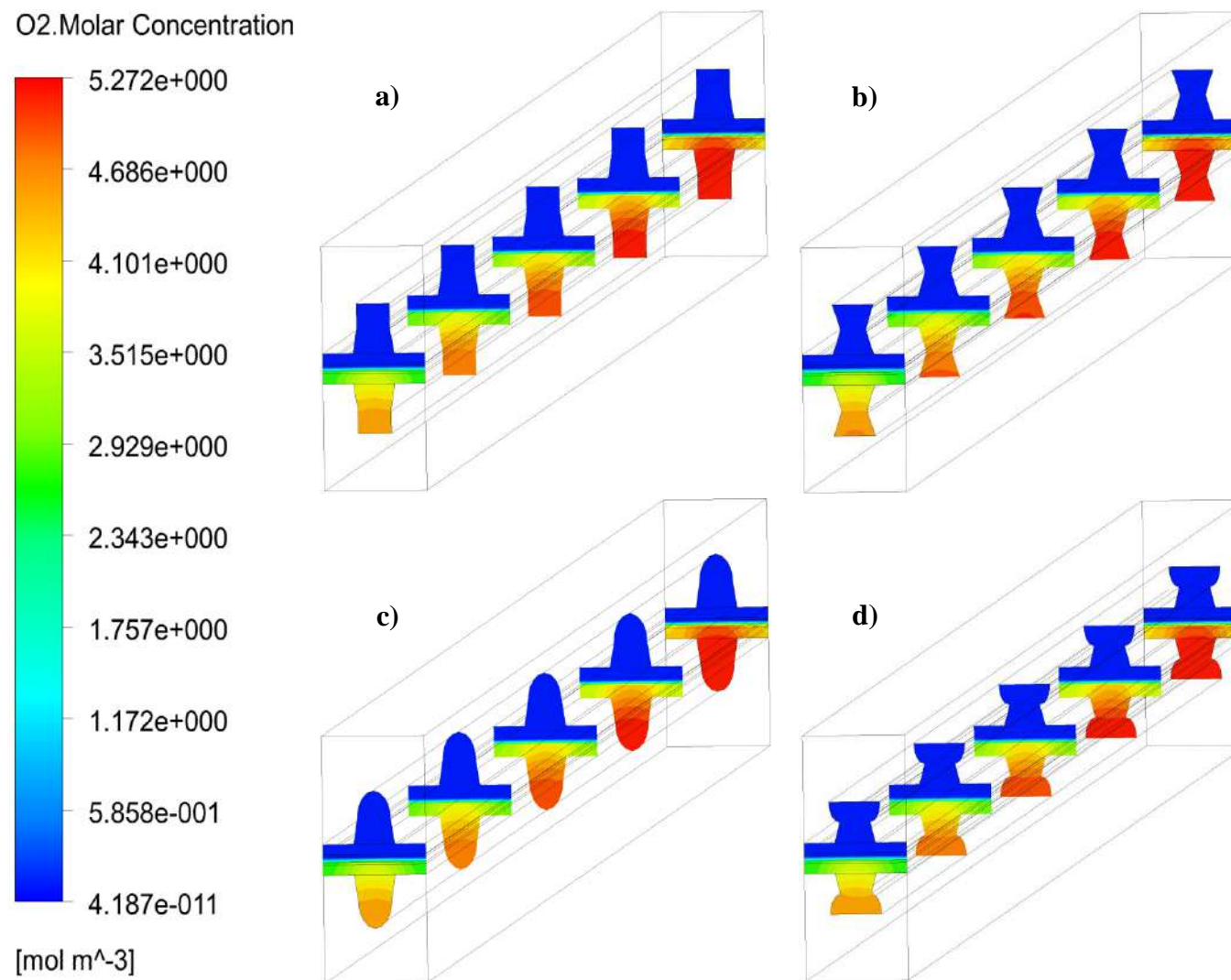


Fig.AII.14 Champs de concentration molaire O₂ pour les géométries CCS à base trapézoïdale. a) Trp-Rct, b) Trp-I-Trp, c) Trp-Hlp, d) Trp-I-Hlp.

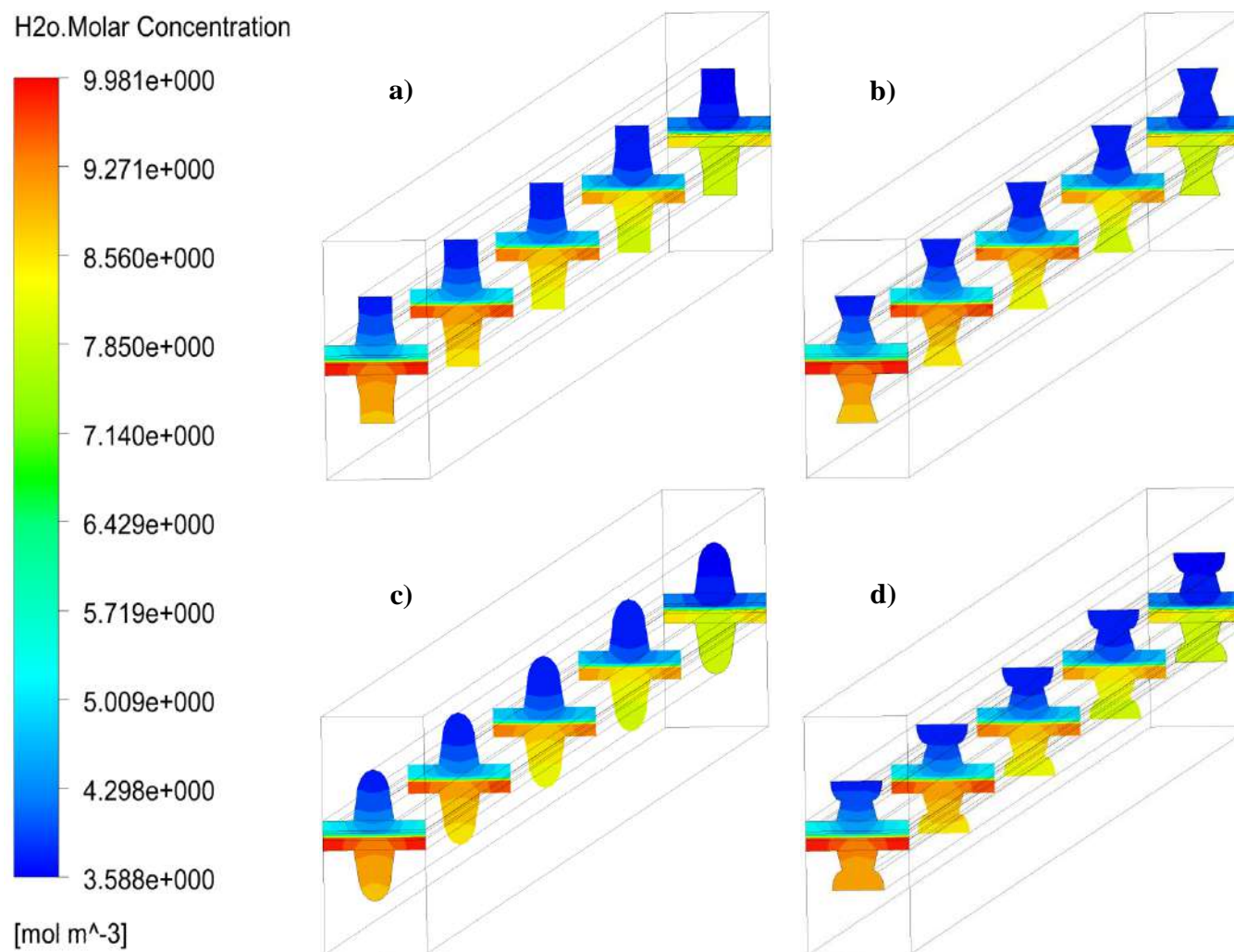


Fig.AII.15 Champs de concentration molaire H₂O pour les géométries CCS à base trapézoïdale. a) Trp-Rct, b) Trp-I-Trp, c) Trp-Hlp, d) Trp-I-Hlp.

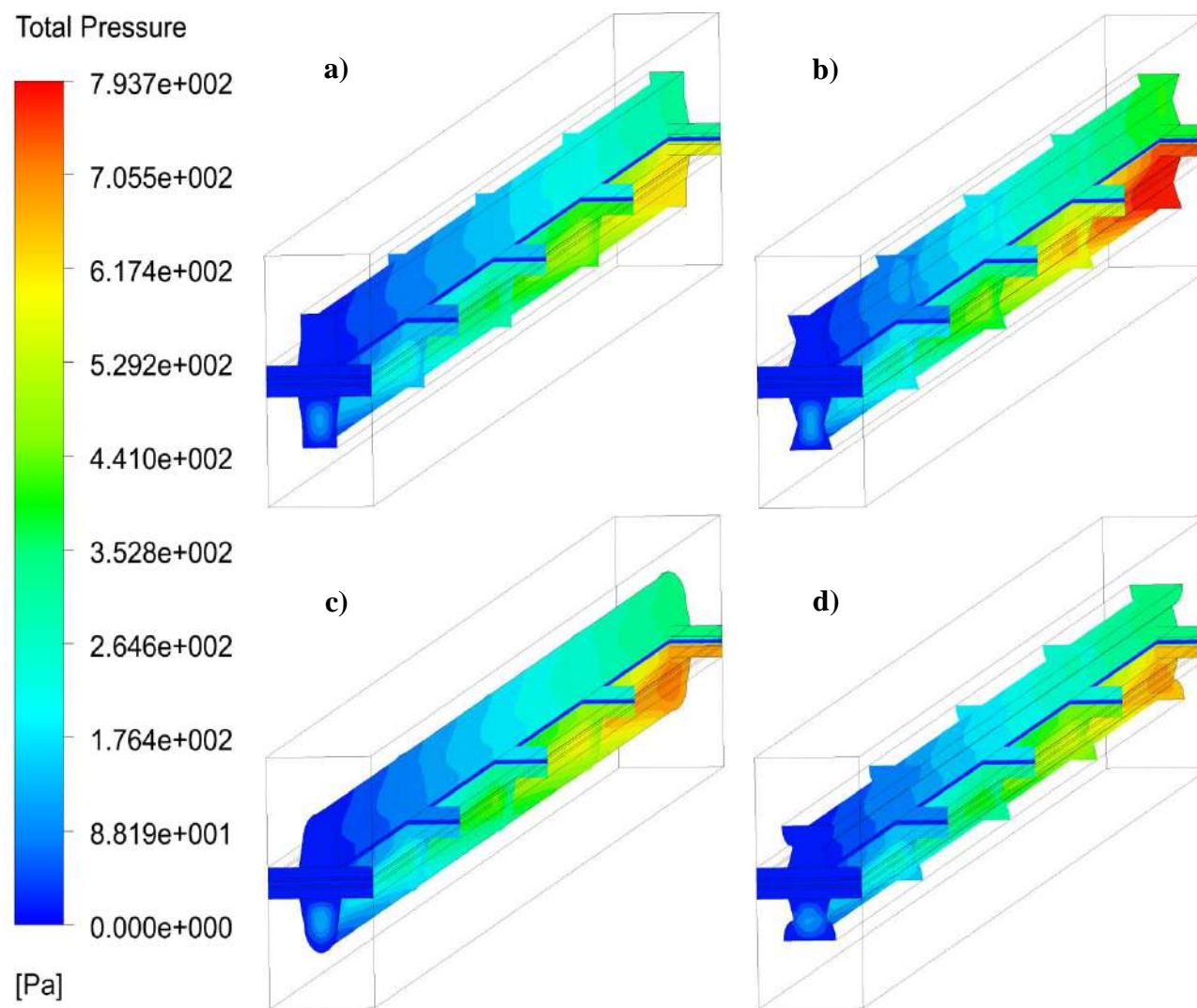


Fig.AII.16 Champs de pression totaux pour les géométries CCS à base trapézoïdale. a) Trp-Rct, b) Trp-I-Trp, c) Trp-Hlp, d) Trp-I-Hlp.

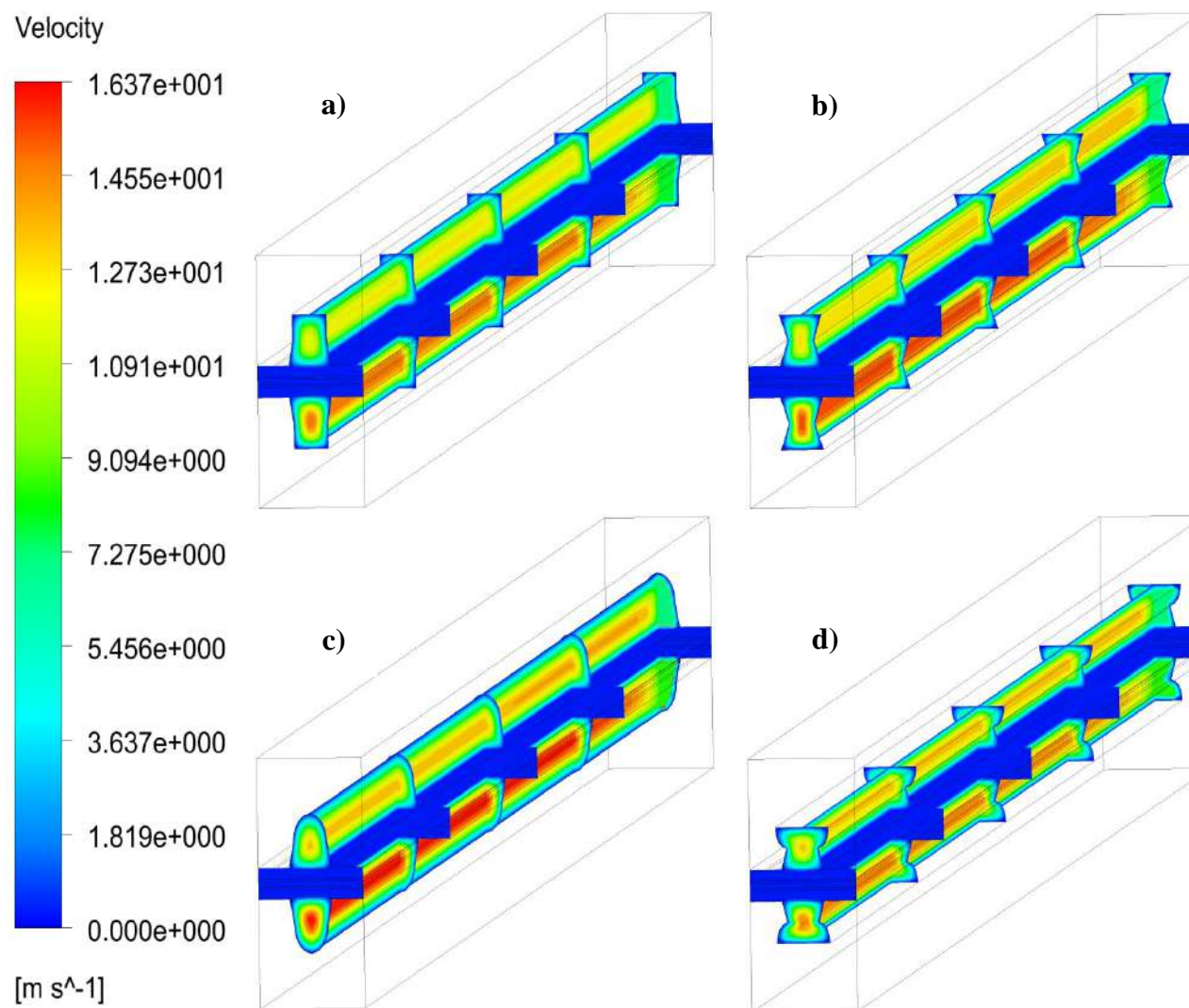


Fig.AII.17 Champs de vitesse pour les géométries CCS à base trapézoïdale. a) Trp-Rct, b) Trp-I-Trp, c) Trp-Hlp, d) Trp-I-Hlp.

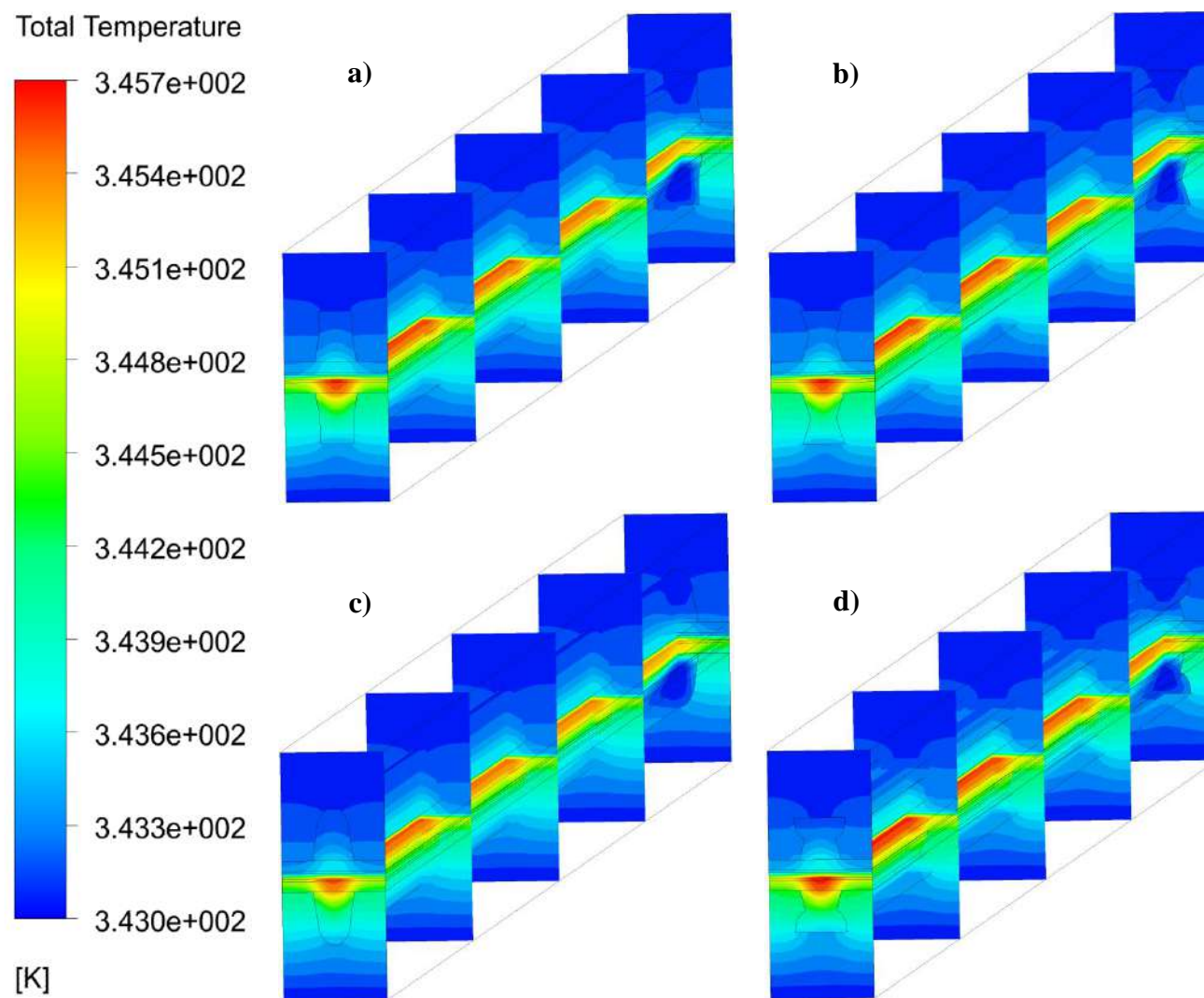


Fig.AII.18 Champs de température totale pour les géométries CCS à base trapézoïdale. a) Trp-Rct, b) Trp-I-Trp, c) Trp-Hlp, d) Trp-I-Hlp.

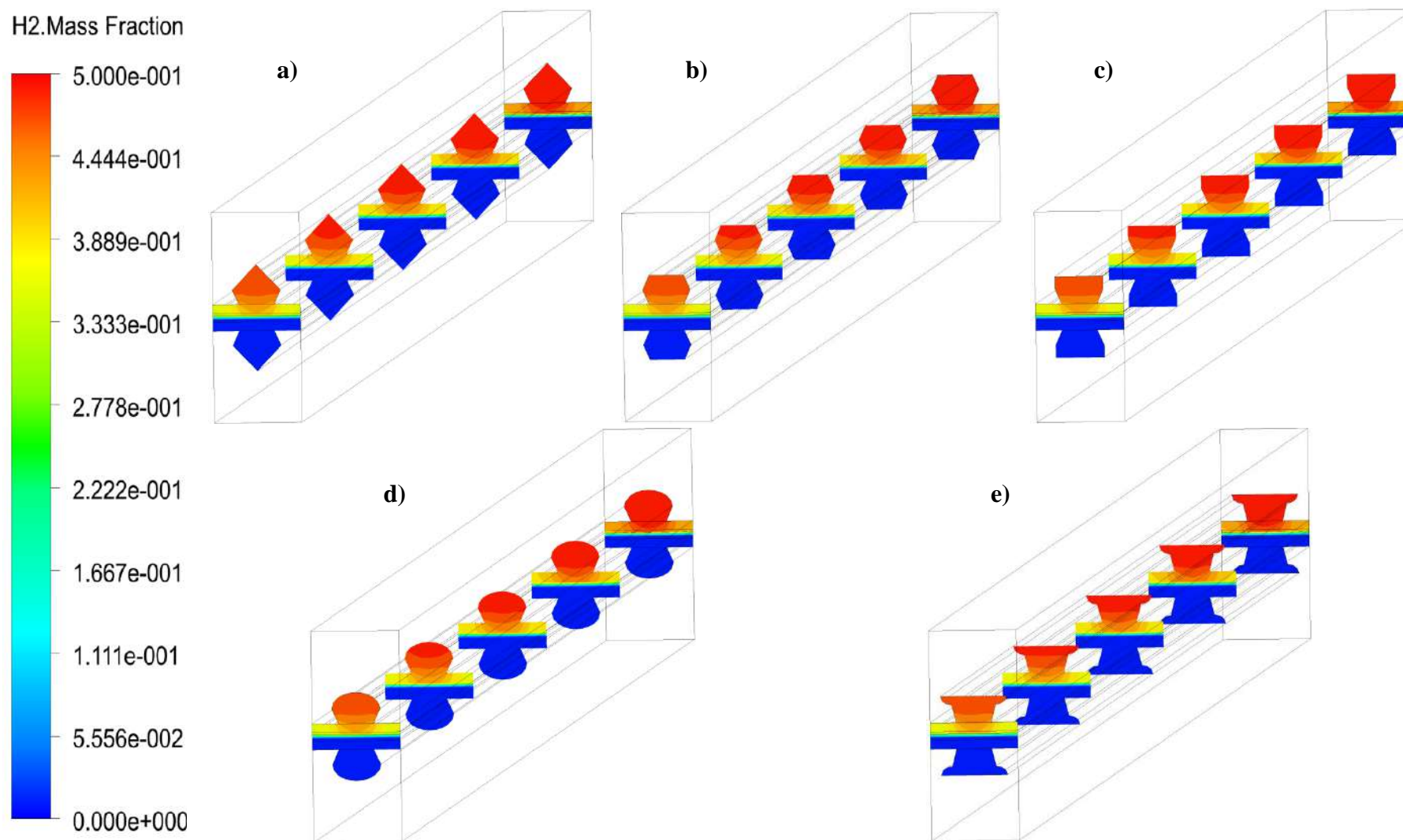


Fig.AII.19 Champs de fraction de masse H₂ pour les géométries CCS à base trapézoïdale inversée. a) I-Trp-Trg, b) I-Trp-Trp, c) I-Trp-Rct, d) I-Trp-Hlp, e) I-Trp-I-Hlp.

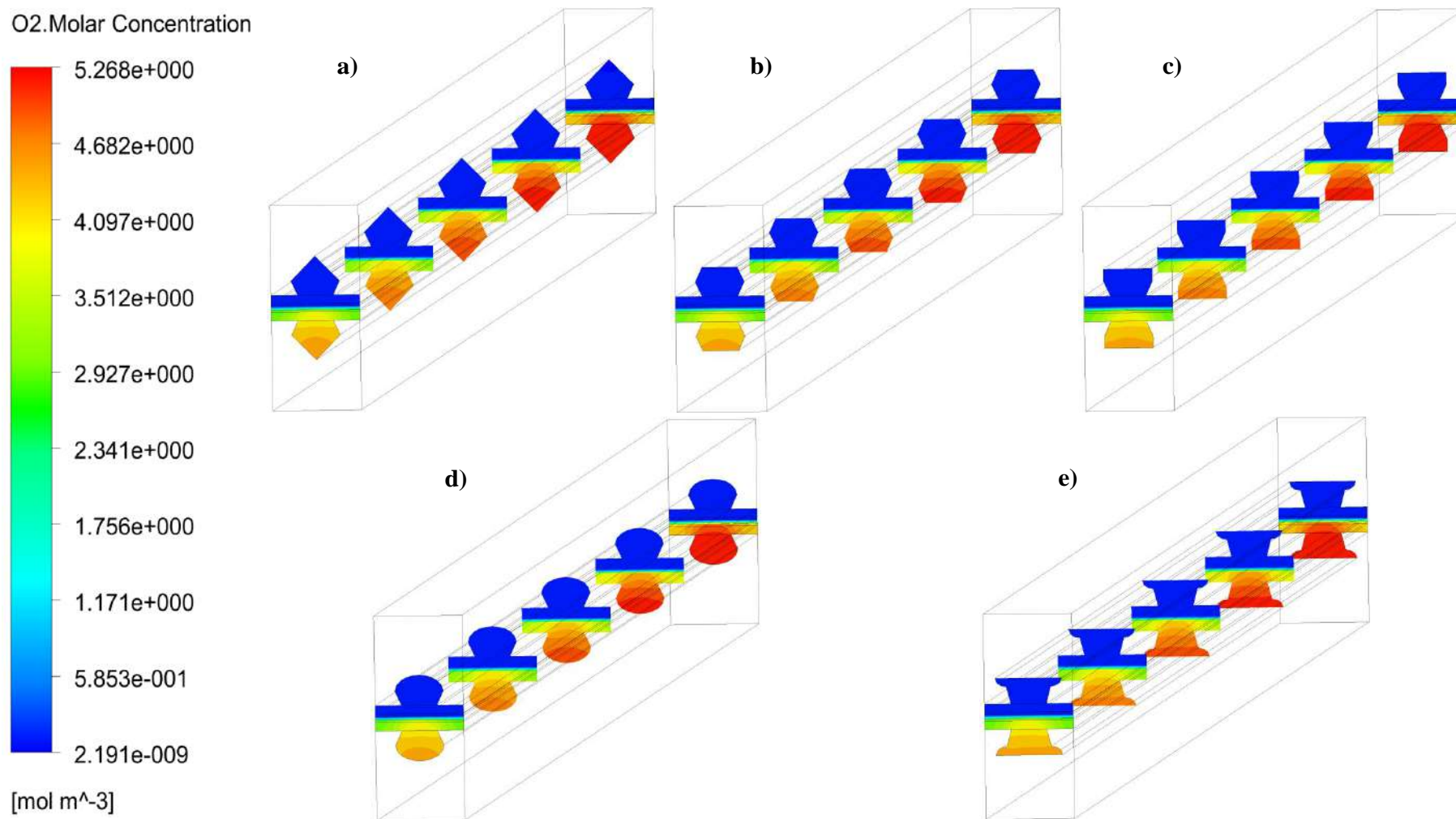


Fig.AII.20 Champs de concentration molaire O₂ pour les géométries CCS à base trapézoïdale inversée. a) I-Trp-Trg, b) I-Trp-Trp, c) I-Trp-Rct, d) I-Trp-Hlp, e) I-Trp-I-Hlp.

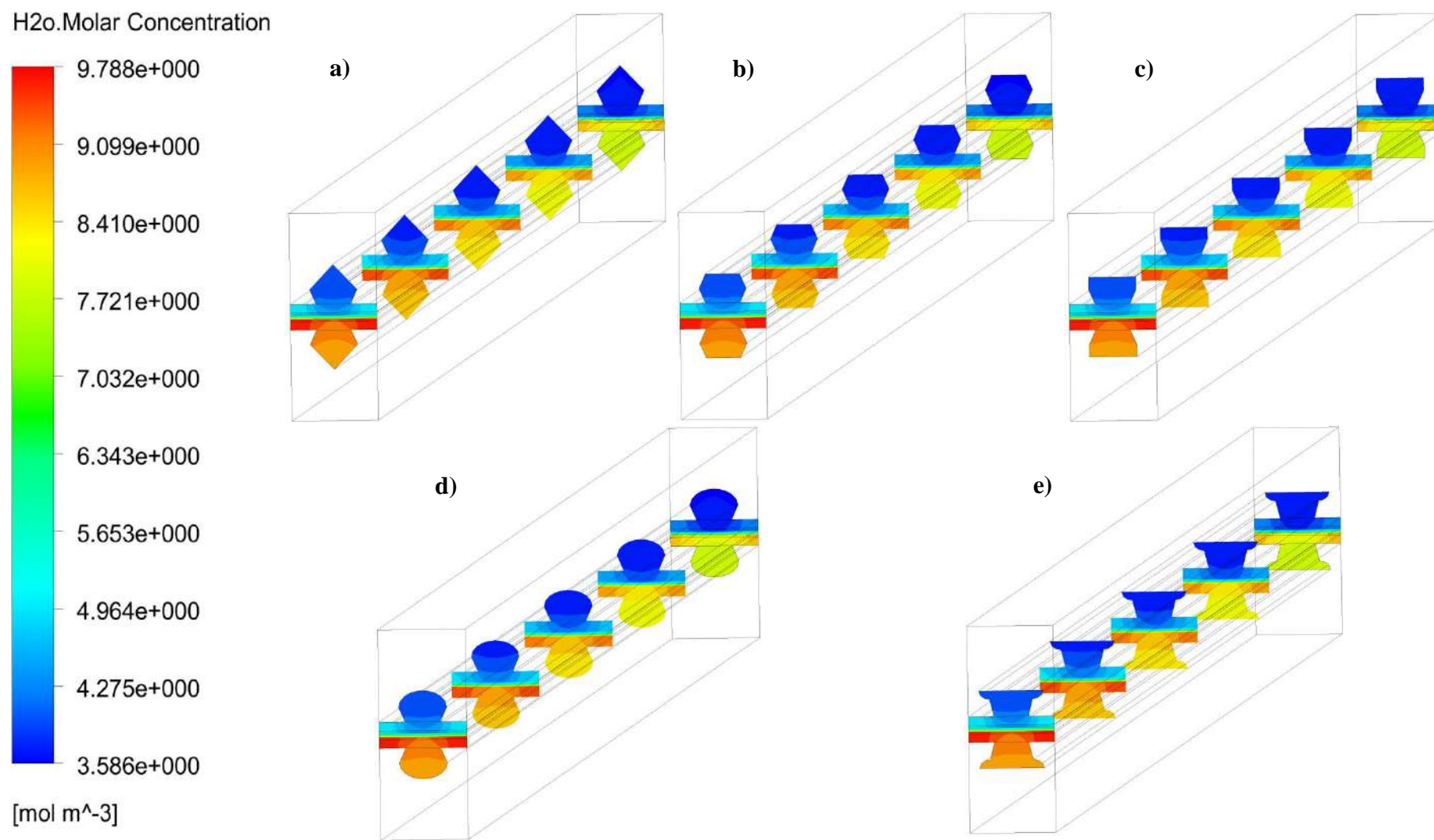


Fig.AII.21 Champs de concentration molaire H₂O pour les géométries CCS à base trapézoïdale inversée. a) I-Trp-Trg, b) I-Trp-Trp, c) I-Trp-Rct, d) I-Trp-Hlp, e) I-Trp-I-Hlp.

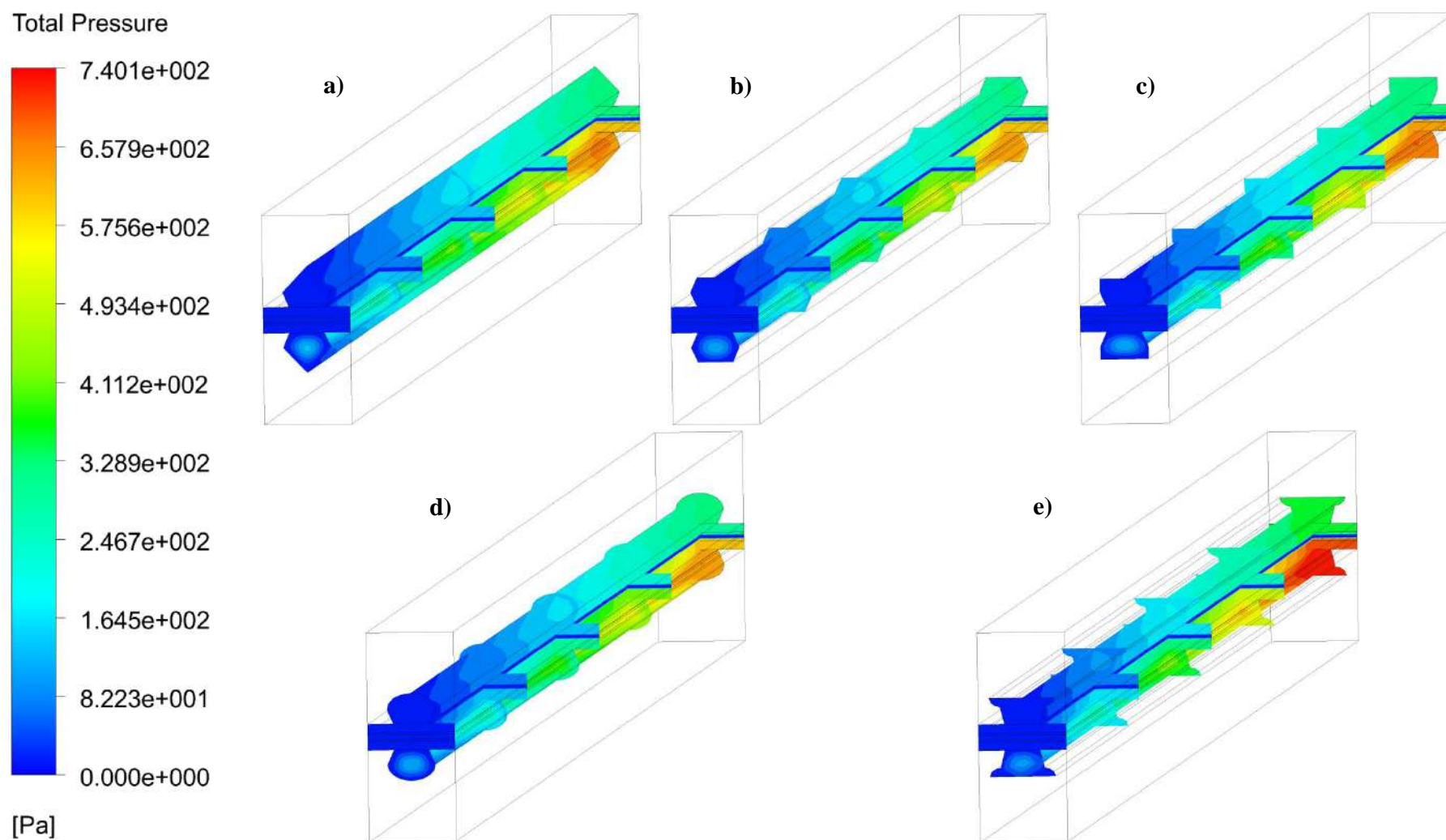


Fig.AII.22 Champs de pression totaux pour les géométries CCS à base trapézoïdale inversée. a) I-Trp-Trg, b) I-Trp-Trp, c) I-Trp-Rct, d) I-Trp-Hlp, e) I-Trp-I-Hlp.

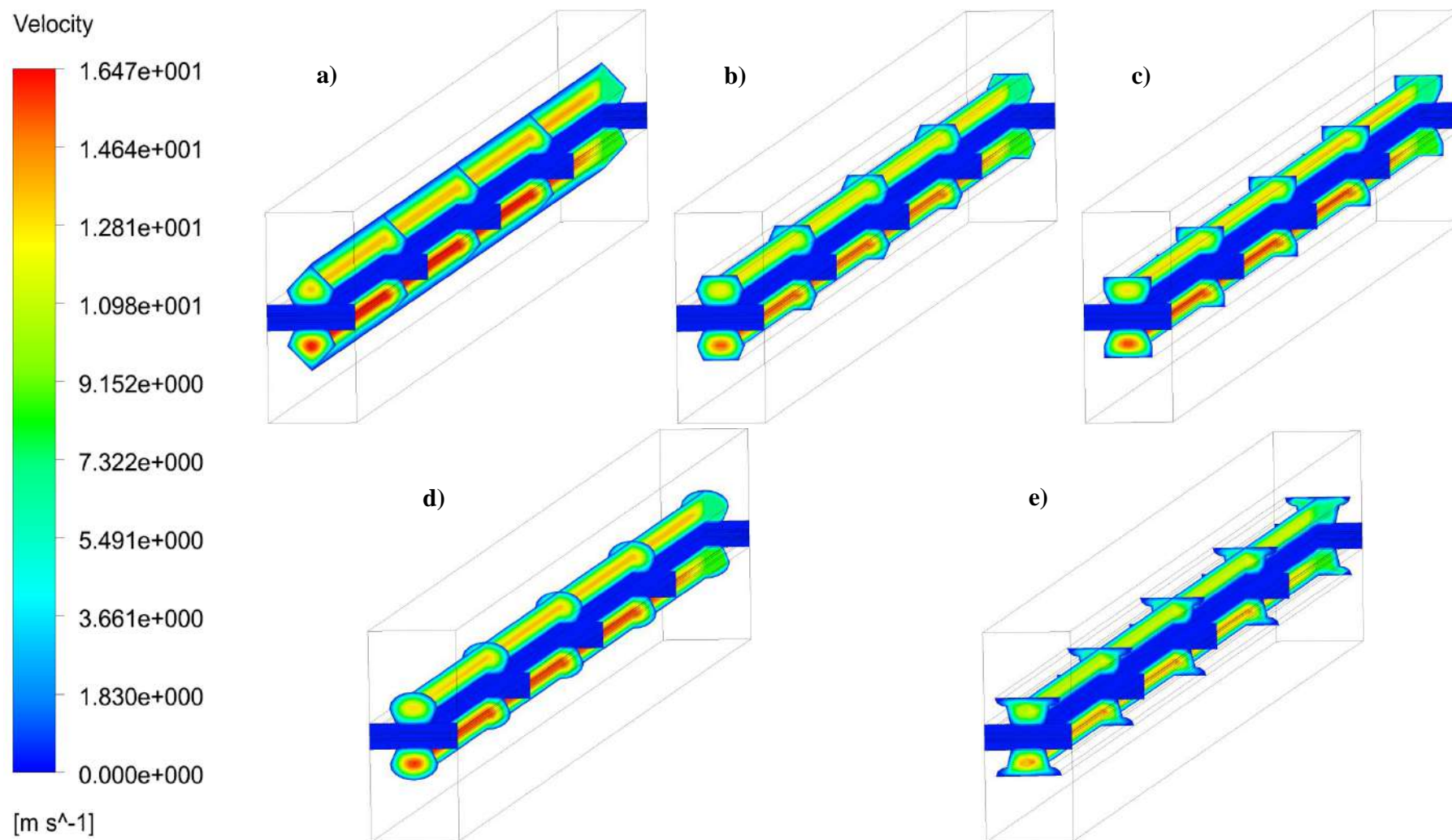


Fig.AII.23 Champs de vitesse pour les géométries CCS à base trapézoïdale inversée. a) I-Trp-Trg, b) I-Trp-Trp, c) I-Trp-Rct, d) I-Trp-Hlp, e) I-Trp-I-Hlp.

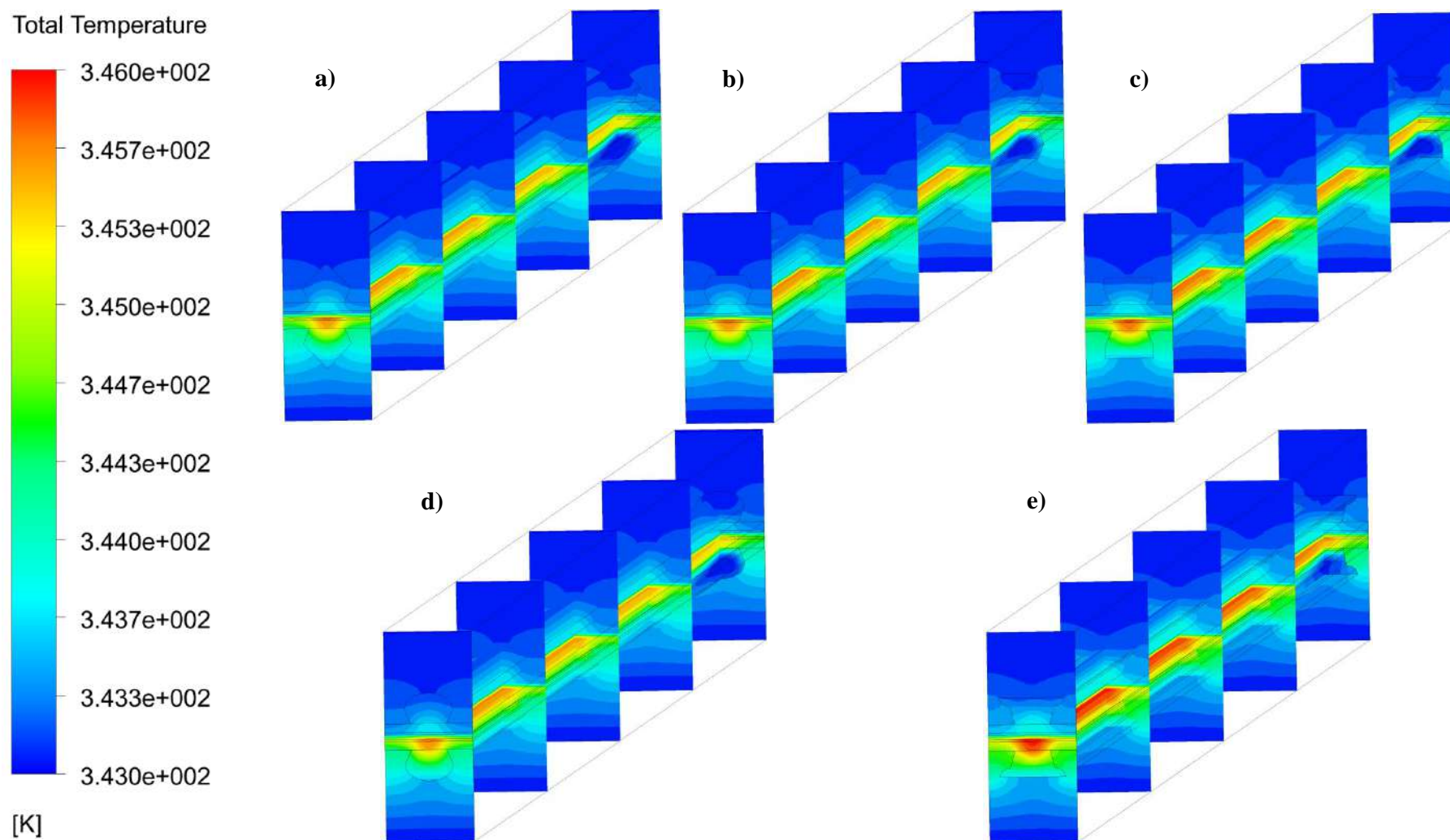


Fig.AII.24 Champs de température totale pour les géométries CCS à base trapézoïdale inversée. a) I-Trp-Trg, b) I-Trp-Trp, c) I-Trp-Rct, d) I-Trp-Hlp, e) I-Trp-I-Hlp.

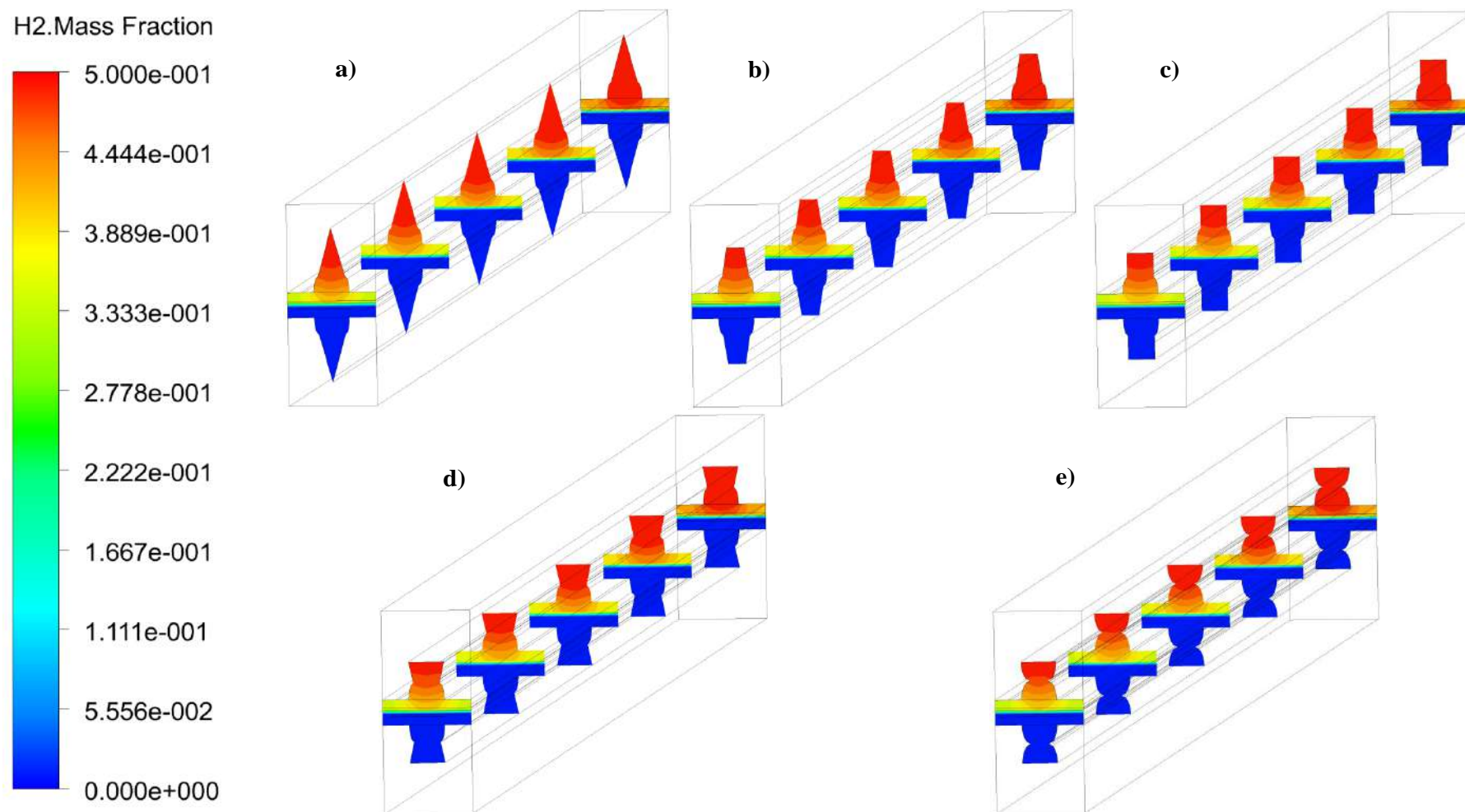


Fig.AII.25 Champs de fraction de masse H₂ pour les géométries CCS de base elliptiques. a) Hlp-Trg, b) Hlp-Trp, c) Hlp-Rct, d) Hlp-I-Trp, e) Hlp-I-Hlp.

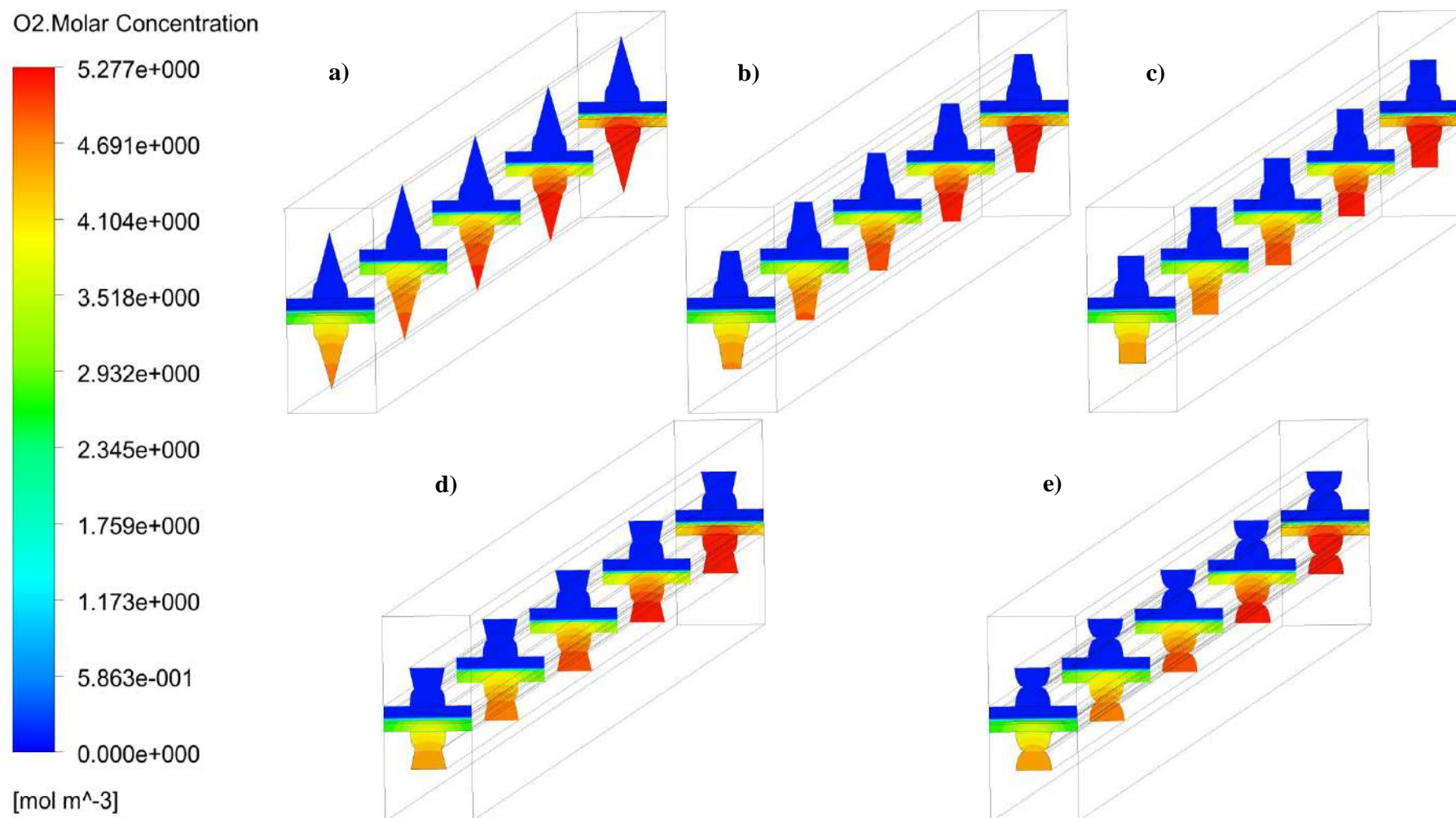


Fig.AII.26 Champs de concentration molaire O₂ pour les géométries CCS de base elliptiques. a) Hlp-Trg, b) Hlp-Trp, c) Hlp-Rct, d) Hlp-I-Trp, e) Hlp-I-Hlp.

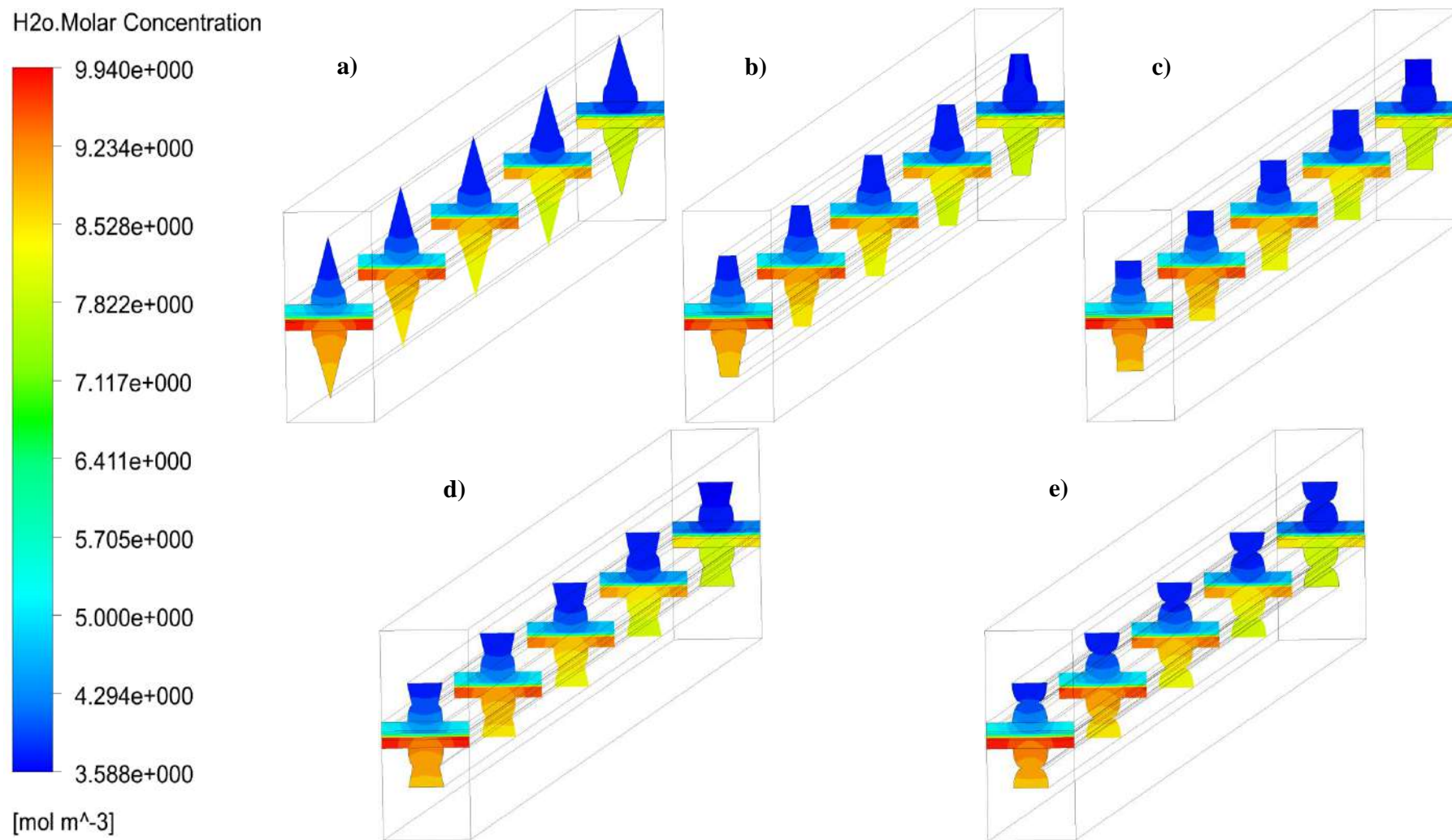


Fig.AII.27 Champs de concentration molaire H₂O pour les géométries CCS de base elliptiques. a) Hlp-Trg, b) Hlp-Trp, c) Hlp-Rct, d) Hlp-I-Trp, e) Hlp-I-Hlp.

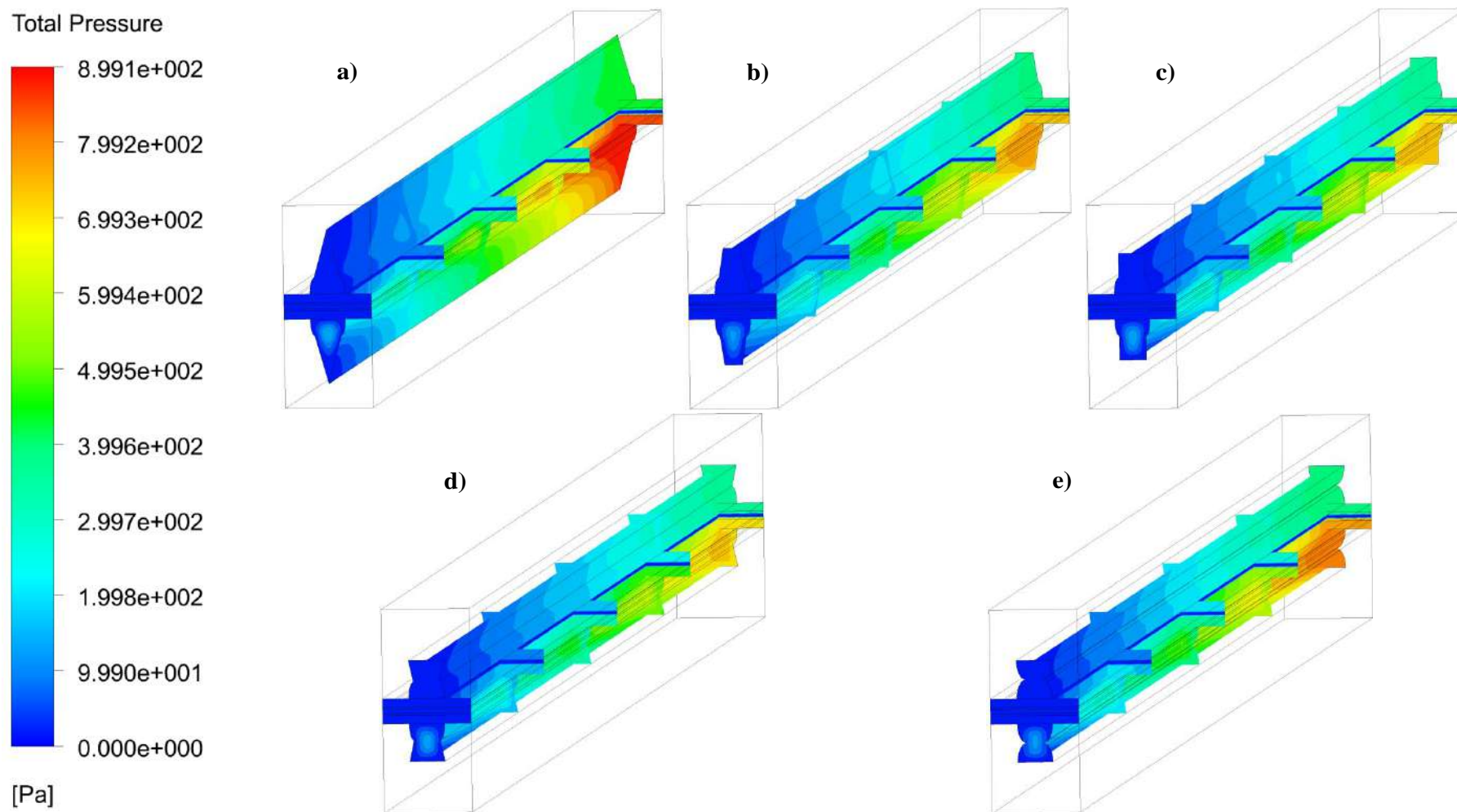


Fig.AII.28 Champs de pression totaux pour les géométries CCS de base elliptiques. a) Hlp-Trg, b) Hlp-Trp, c) Hlp-Rct, d) Hlp-I-Trp, e) Hlp-I-Hlp.

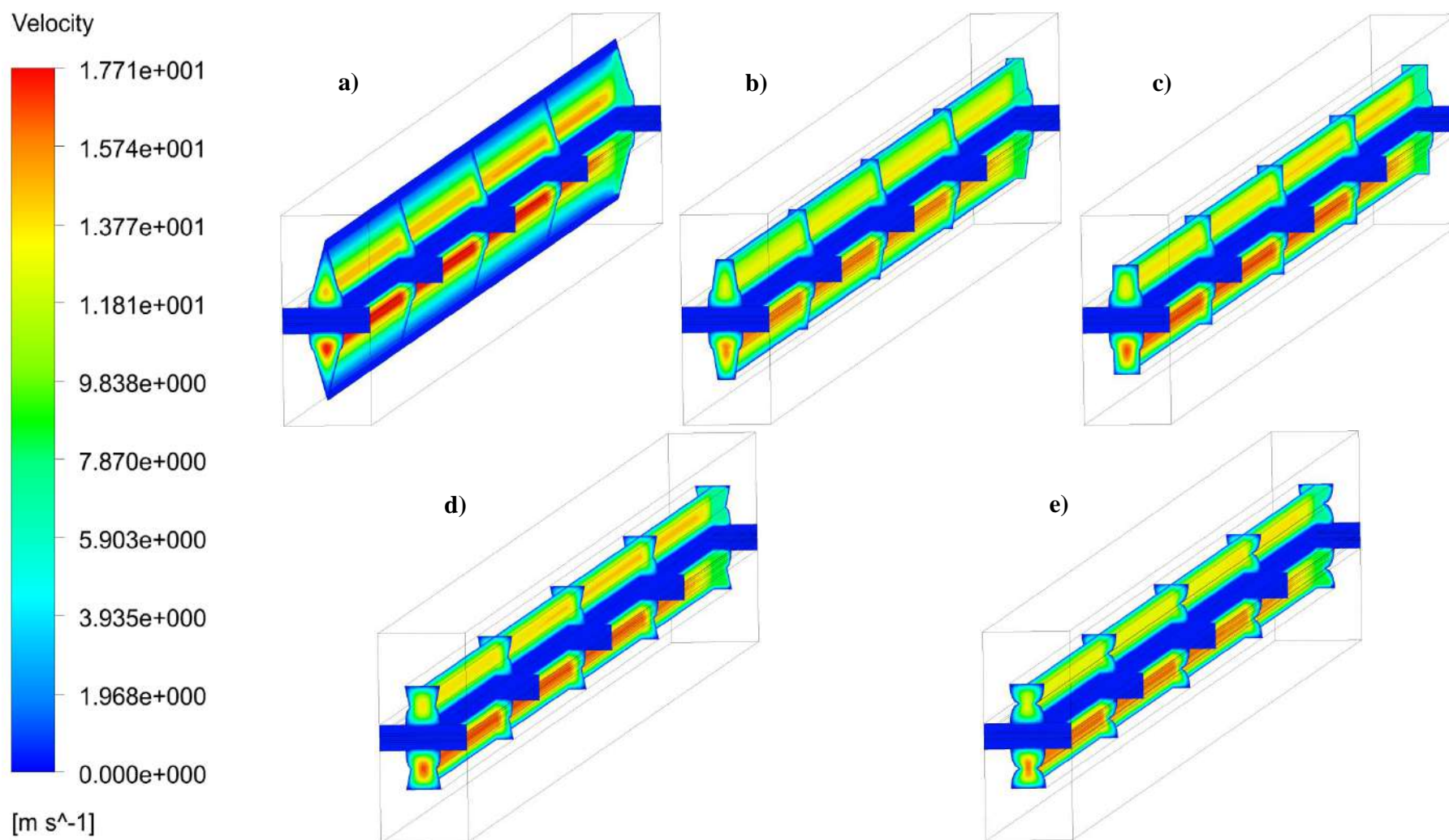


Fig.AII.29 Champs de vitesse pour les géométries CCS de base elliptiques. a) Hlp-Trg, b) Hlp-Trp, c) Hlp-Rct, d) Hlp-I-Trp, e) Hlp-I-Hlp.

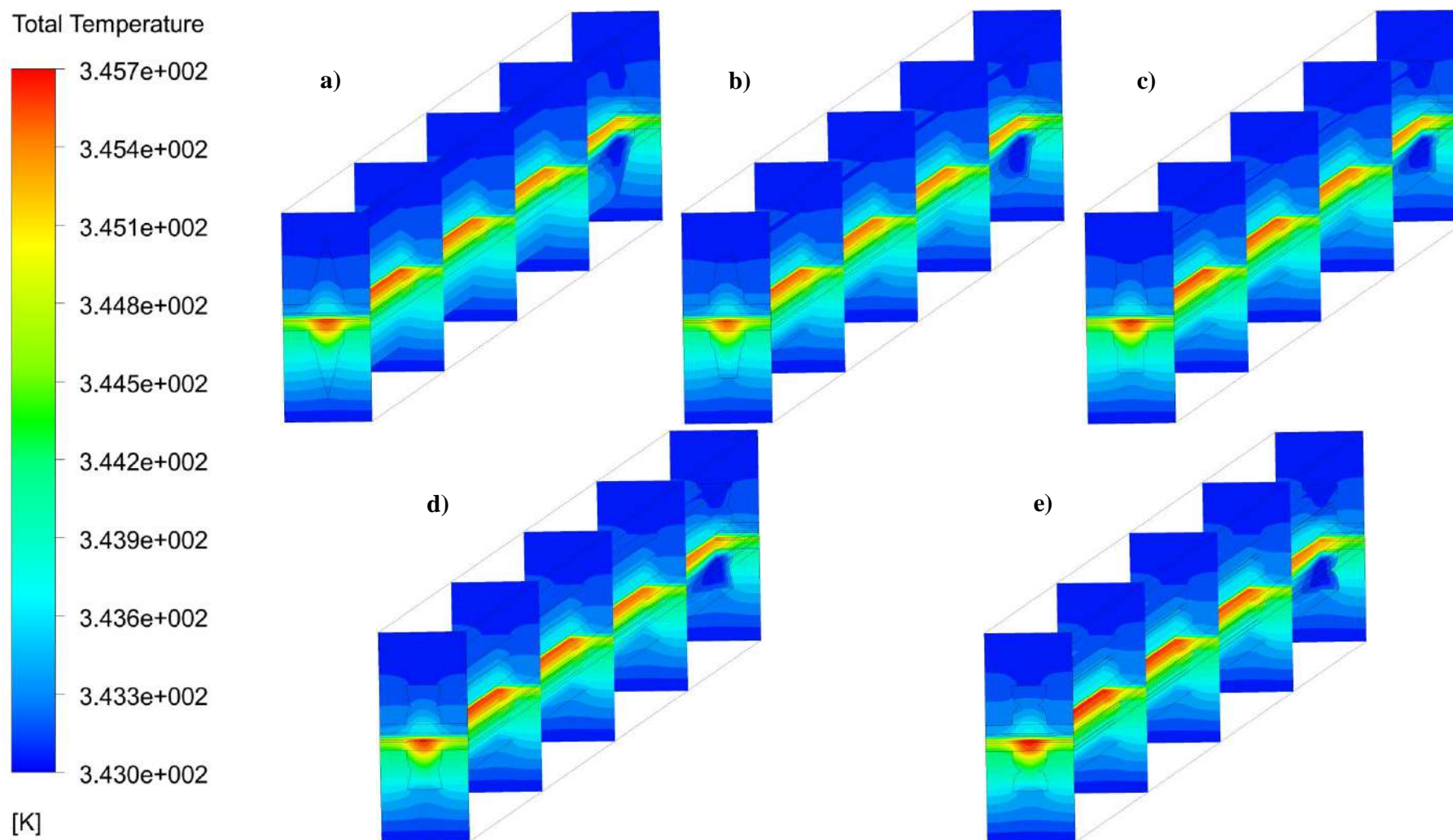


Fig.AII.30 Champs de température totale pour les géométries CCS de base elliptiques. a) Hlp-Trg, b) Hlp-Trp, c) Hlp-Rct, d) Hlp-I-Trp, e) Hlp-I-Hlp.

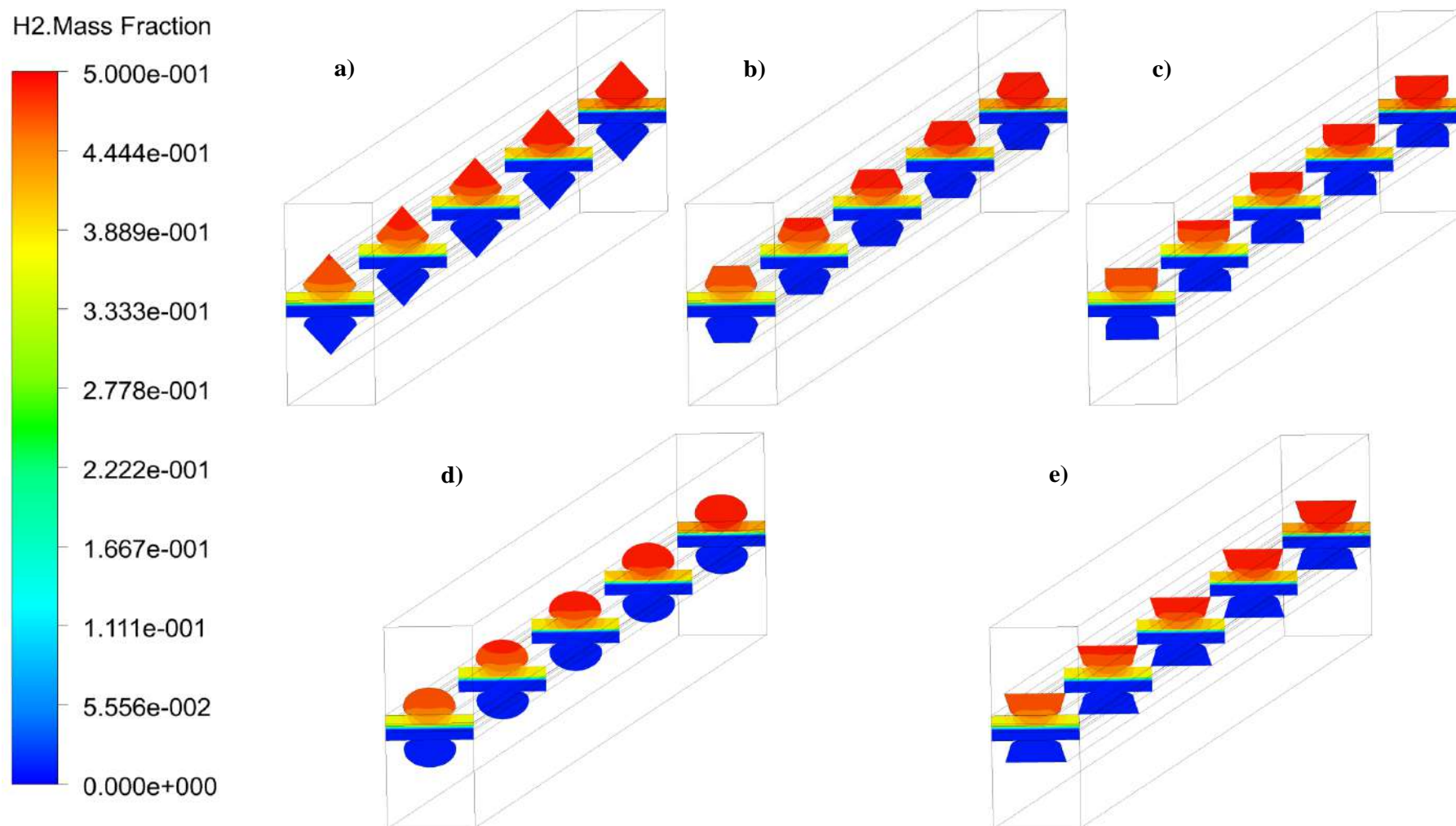


Fig.AII.31 Champs de fraction de masse H₂ pour les géométries CCS à base elliptique inversée. a) I-Hlp-Trg, b) I-Hlp-Trp, c) I-Hlp-Rct, d) I-Hlp-I-Hlp, e) I-Hlp-I-Trp.

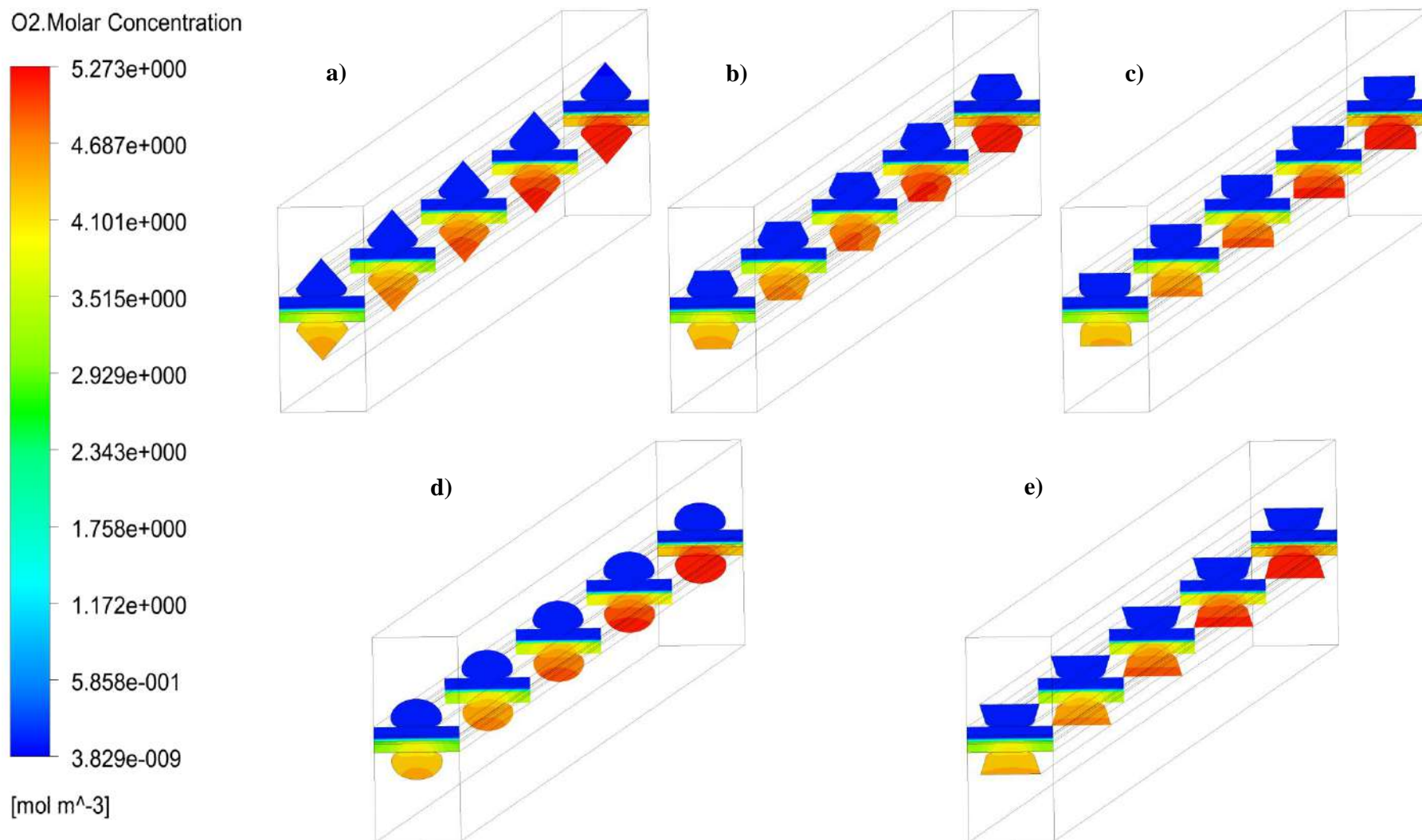


Fig.AII.32 Champs de concentration molaire O₂ pour les géométries CCS à base elliptique inversée. a) I-Hlp-Trg, b) I-Hlp-Trp, c) I-Hlp-Rct, d) Ihlp-I-Hlp, e) I-Hlp-I-Trp.

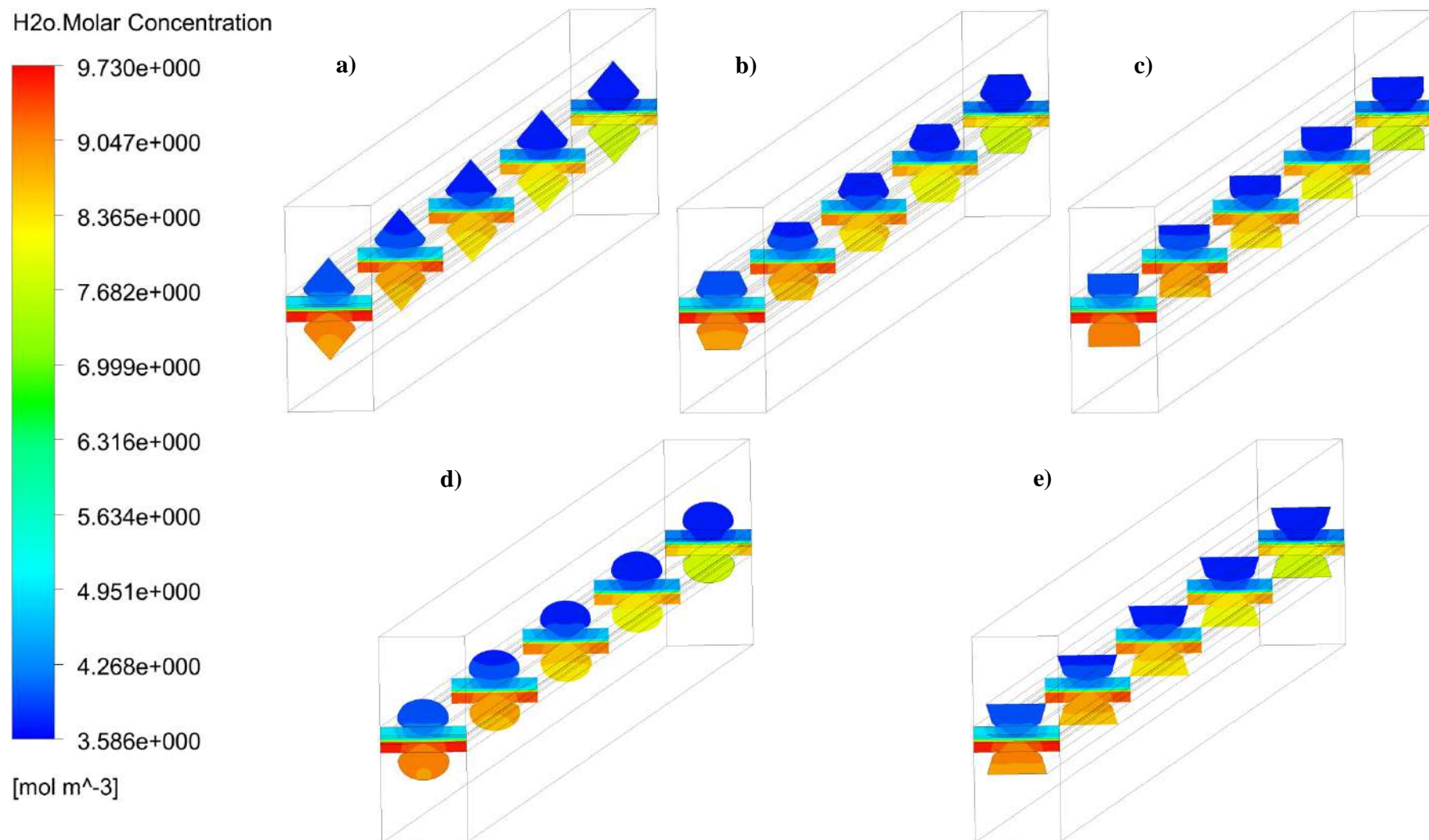


Fig.AII.33 Champs de concentration molaire H₂O pour les géométries CCS à base elliptique inversée. a) I-Hlp-Trg, b) I-Hlp-Trp, c) I-Hlp-Rct, d) IHlp-I-Hlp, e) I-Hlp-I-Trp.

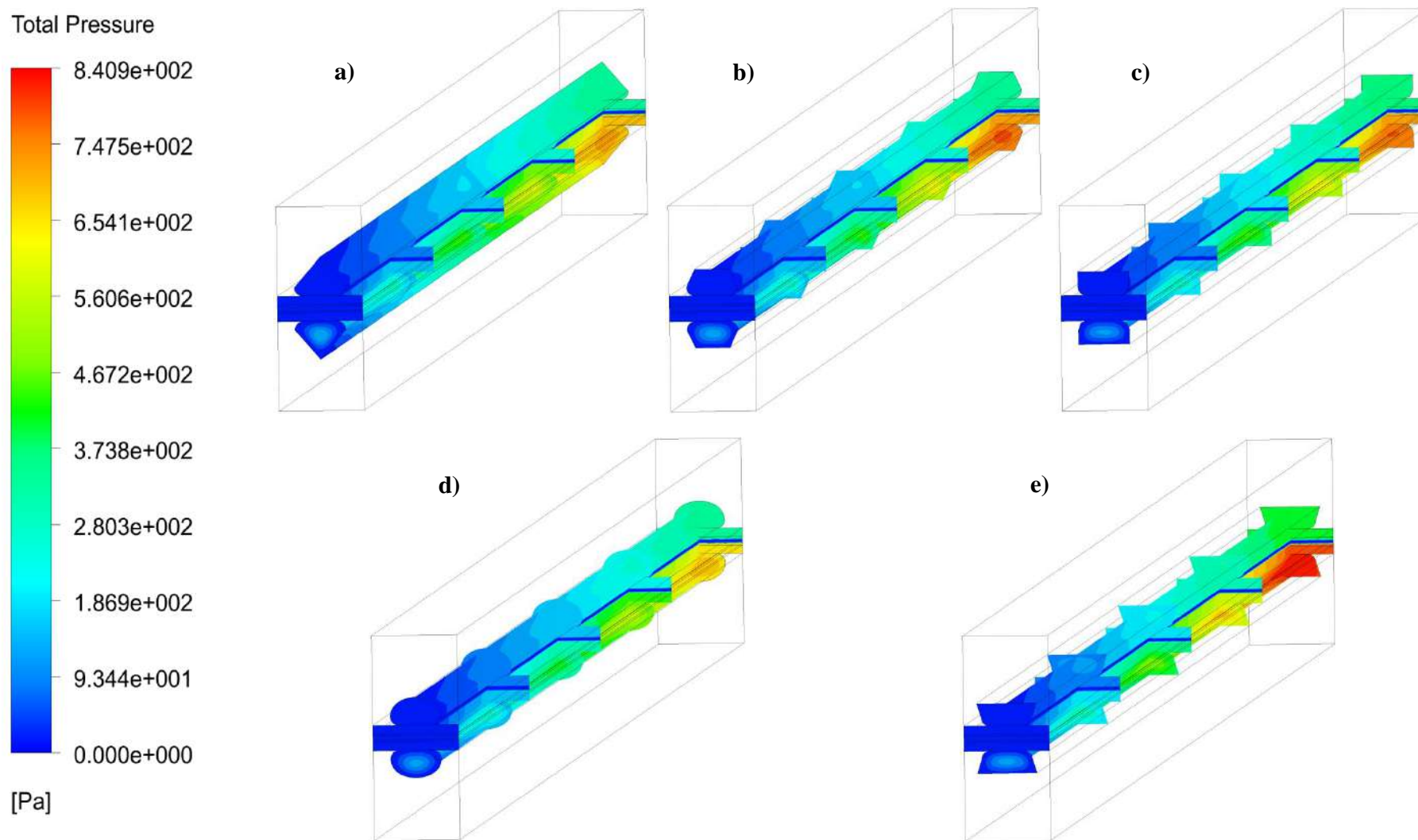


Fig.AII.34 Champs de pression totaux pour les géométries CCS à base elliptique inversée. a) I-Hlp-Trg, b) I-Hlp-Trp, c) I-Hlp-Rct, d) IHlp-I-Hlp, e) I-Hlp-I-Trp.

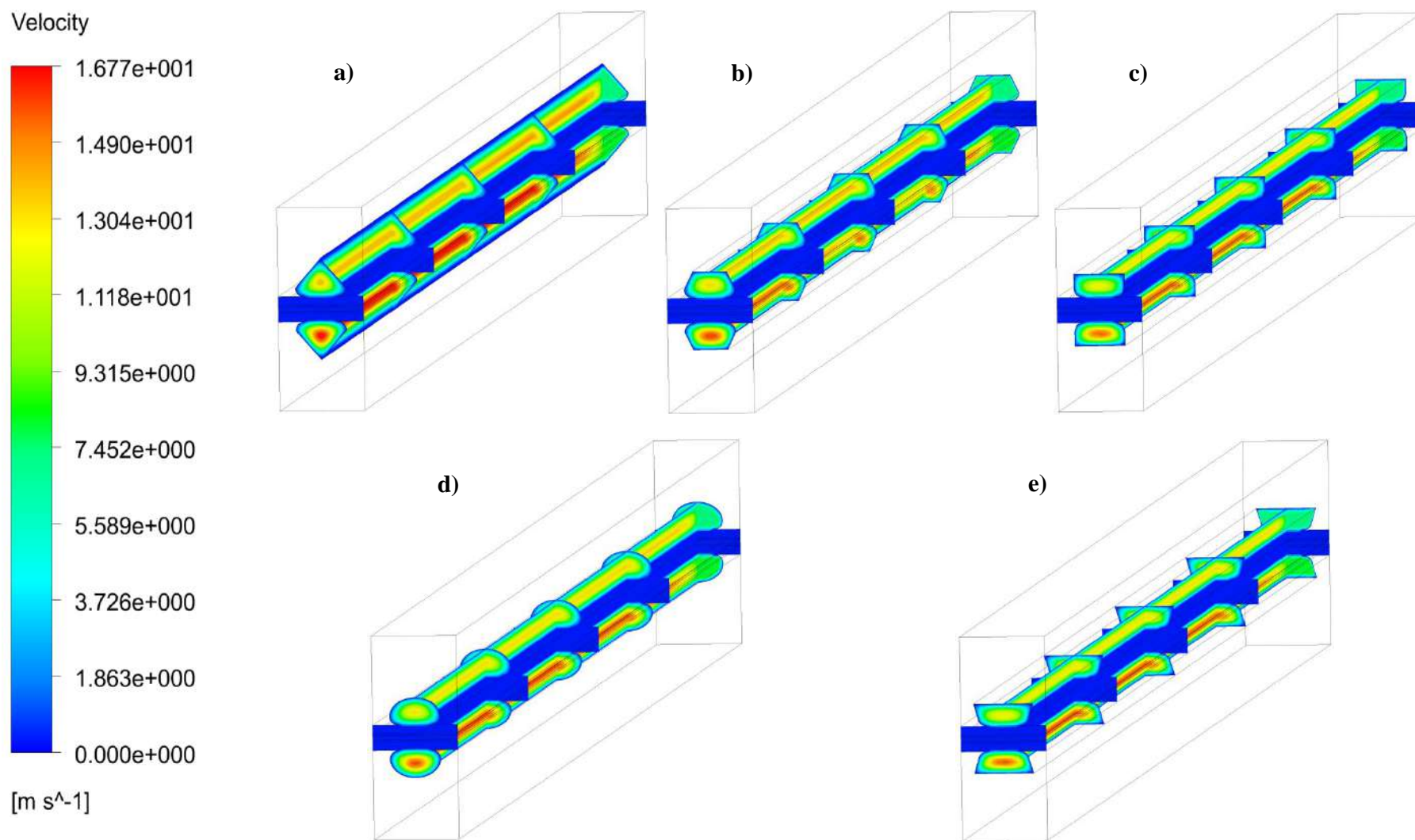


Fig.AII.35 Champs de vitesse pour les géométries CCS à base elliptique inversée. a) I-Hlp-Trg, b) I-Hlp-Trp, c) I-Hlp-Rct, d) IHlp-I-Hlp, e) I-Hlp-I-Trp.

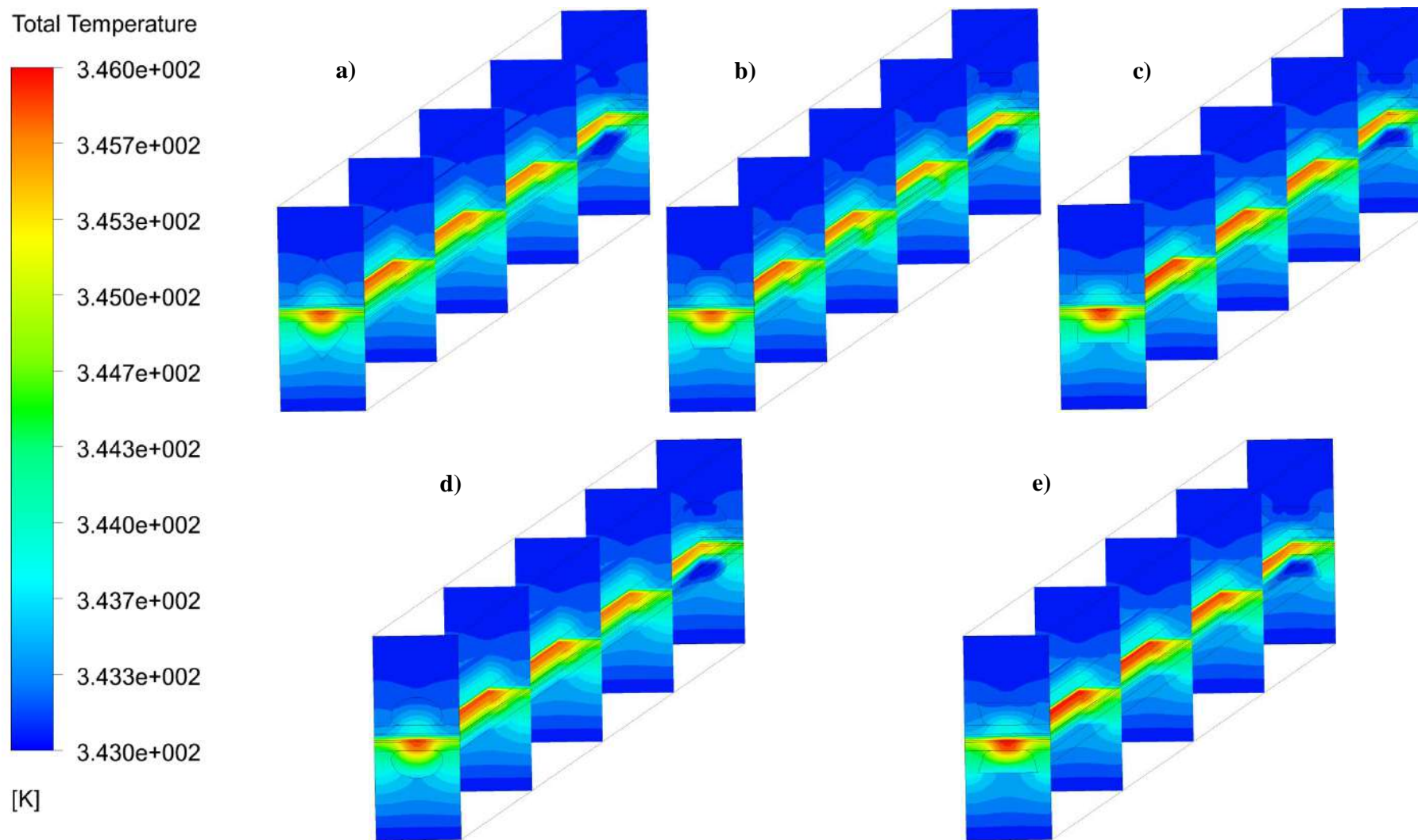


Fig.AII.36 Champs de température totale pour les géométries CCS à base elliptique inversée. a) I-Hlp-Trg, b) I-Hlp-Trp, c) I-Hlp-Rct, d) IHlp-I-Hlp, e) I-Hlp-I-Trp.

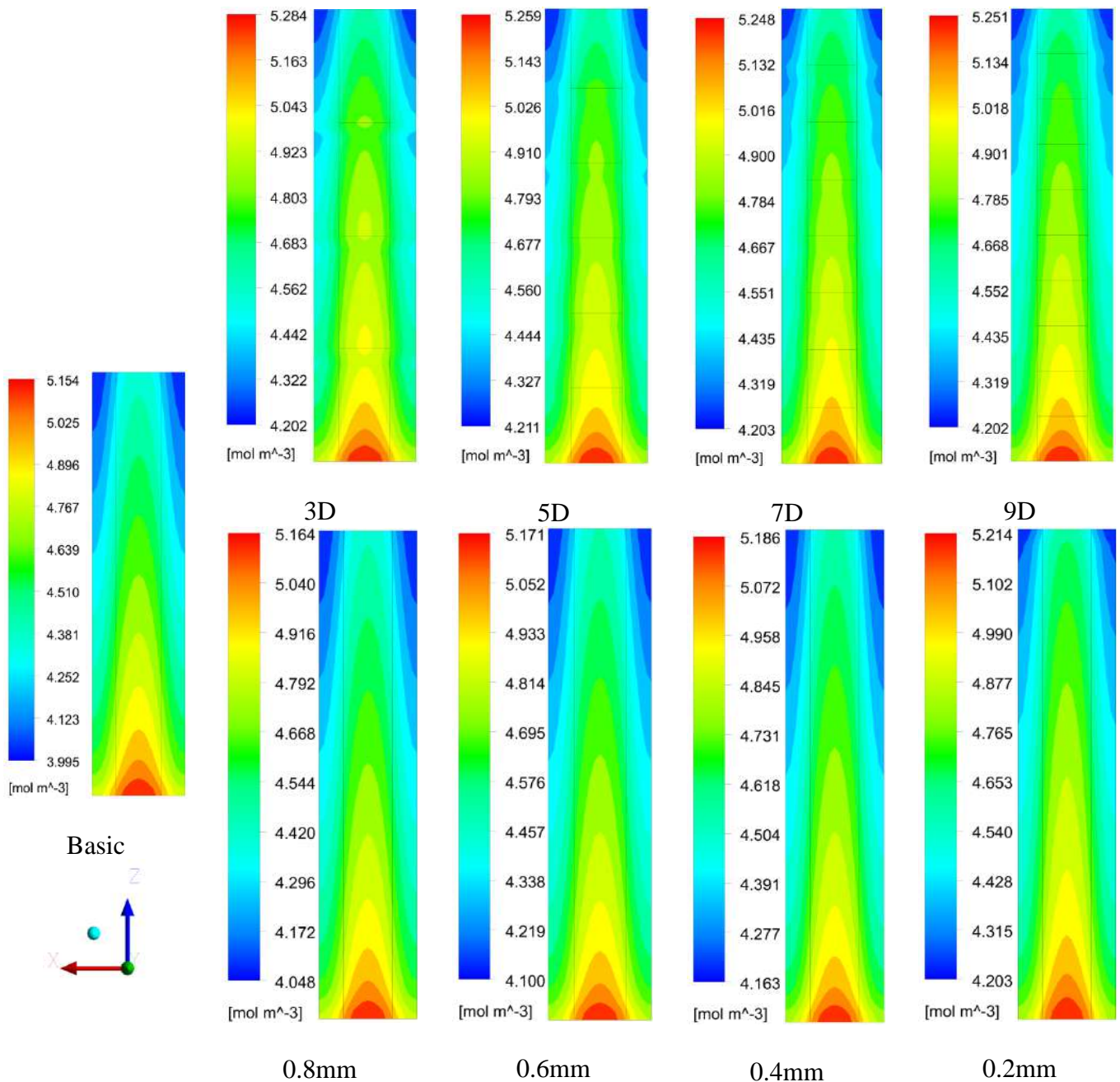


Fig.AIII.1 Contours de la concentration molaire d'oxygène. a) différentes hauteurs de sortie de canal, b) différents nombres de marches, c) model basique, au niveau du catalyseur de la cathode et de l'interface de la membrane dans le plan ZX indiqué pour les PEMFC planaires.

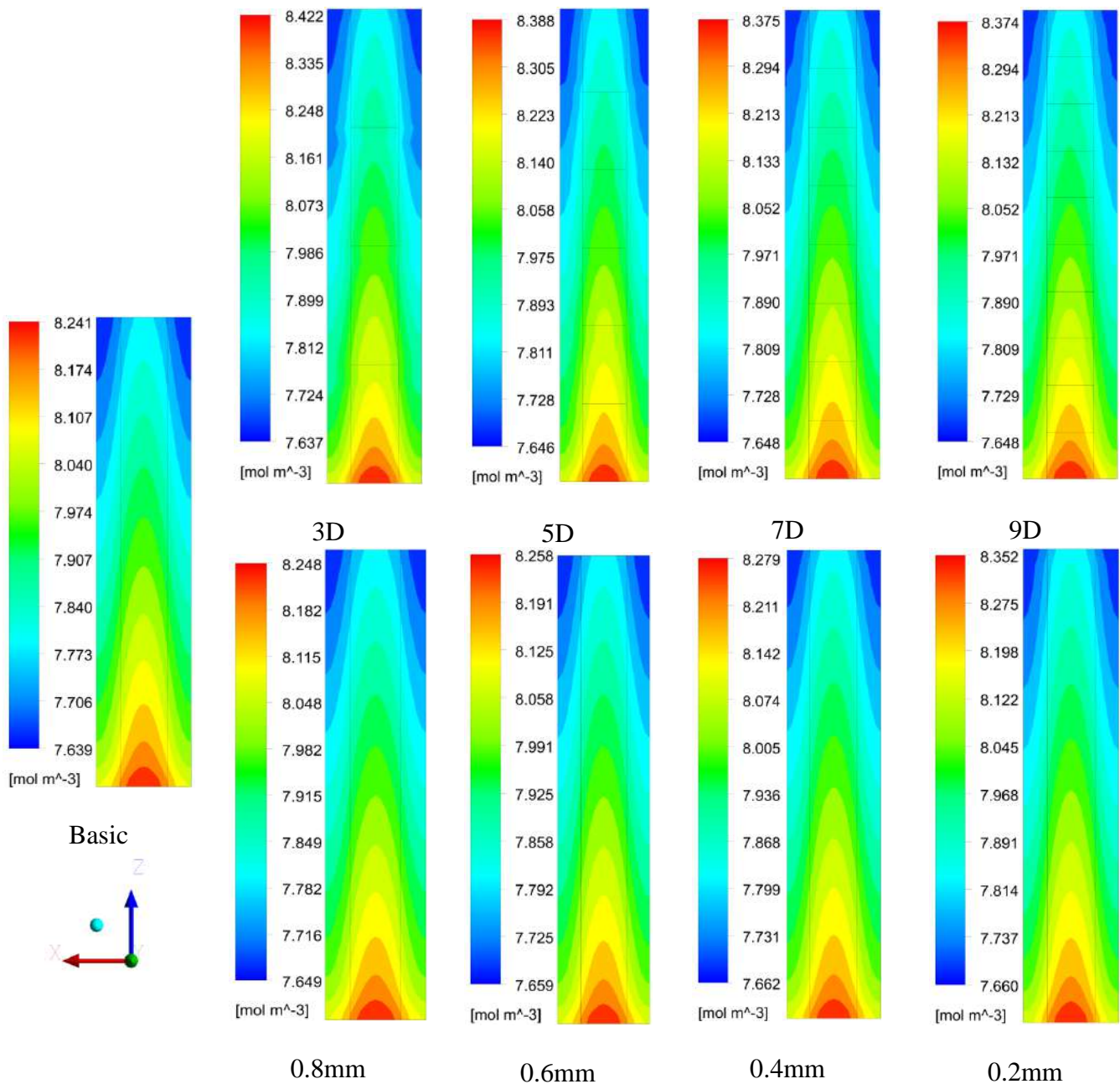
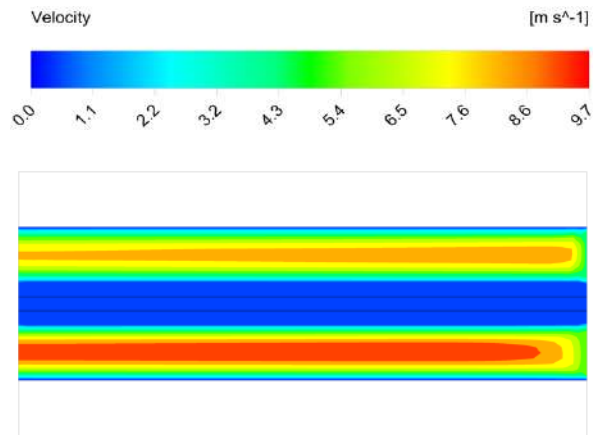
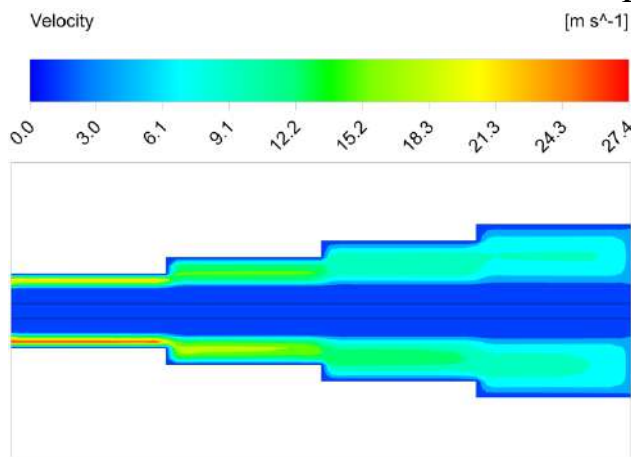


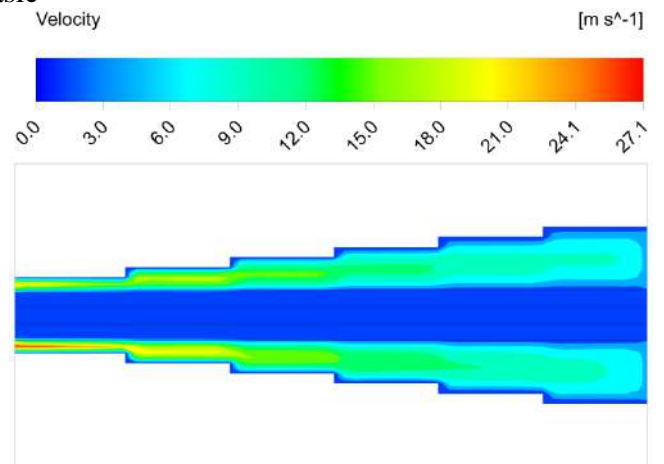
Fig.AIII.2 Contours de la concentration molaire d'eau. a) différentes hauteurs de sortie de canal, b) différents nombres de marche, c) model basique, au niveau du catalyseur de la cathode et de l'interface de la membrane dans le plan ZX indiqué pour les PEMFC planaires.



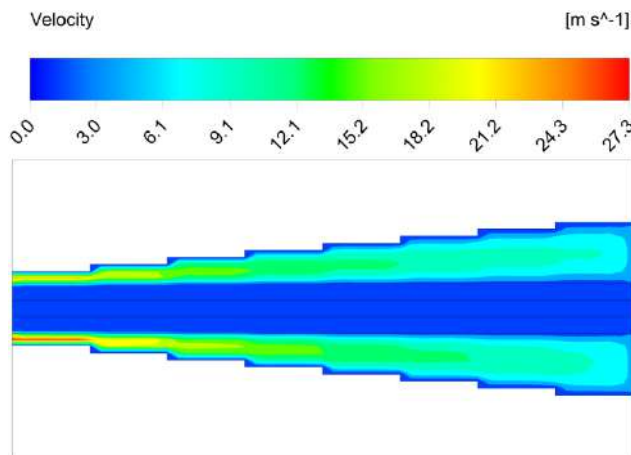
Basic



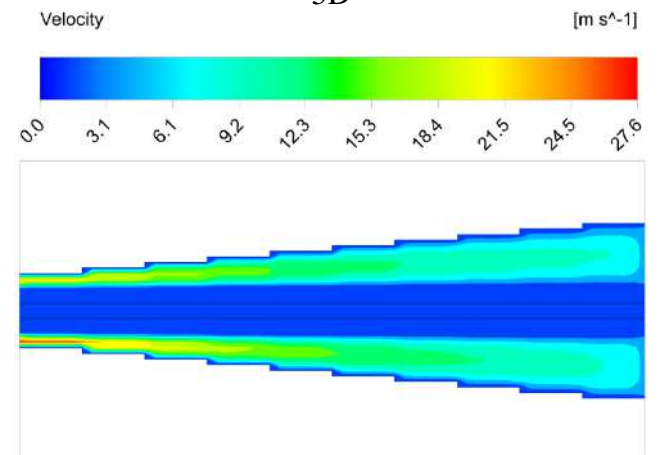
3D



5D



7D



9D

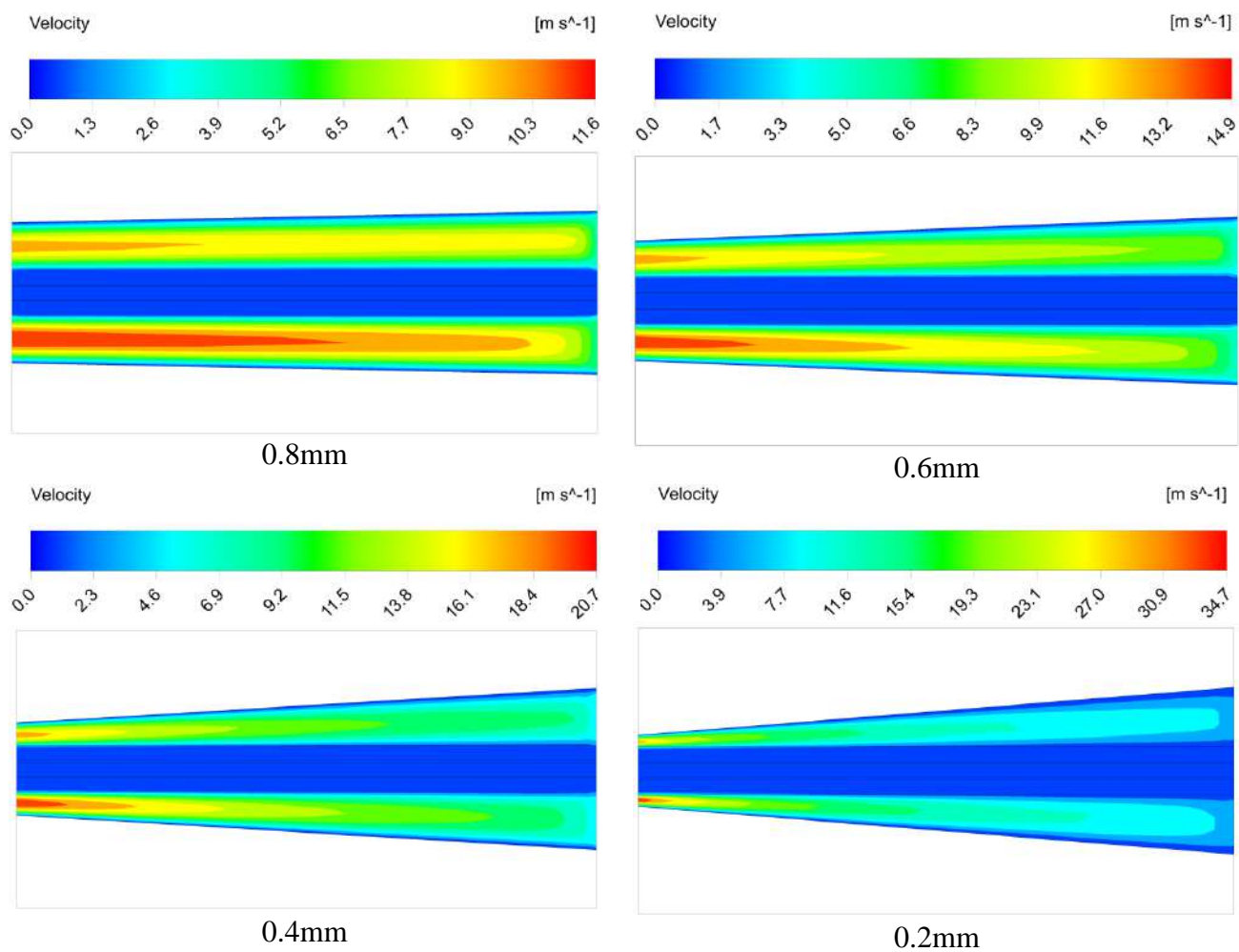
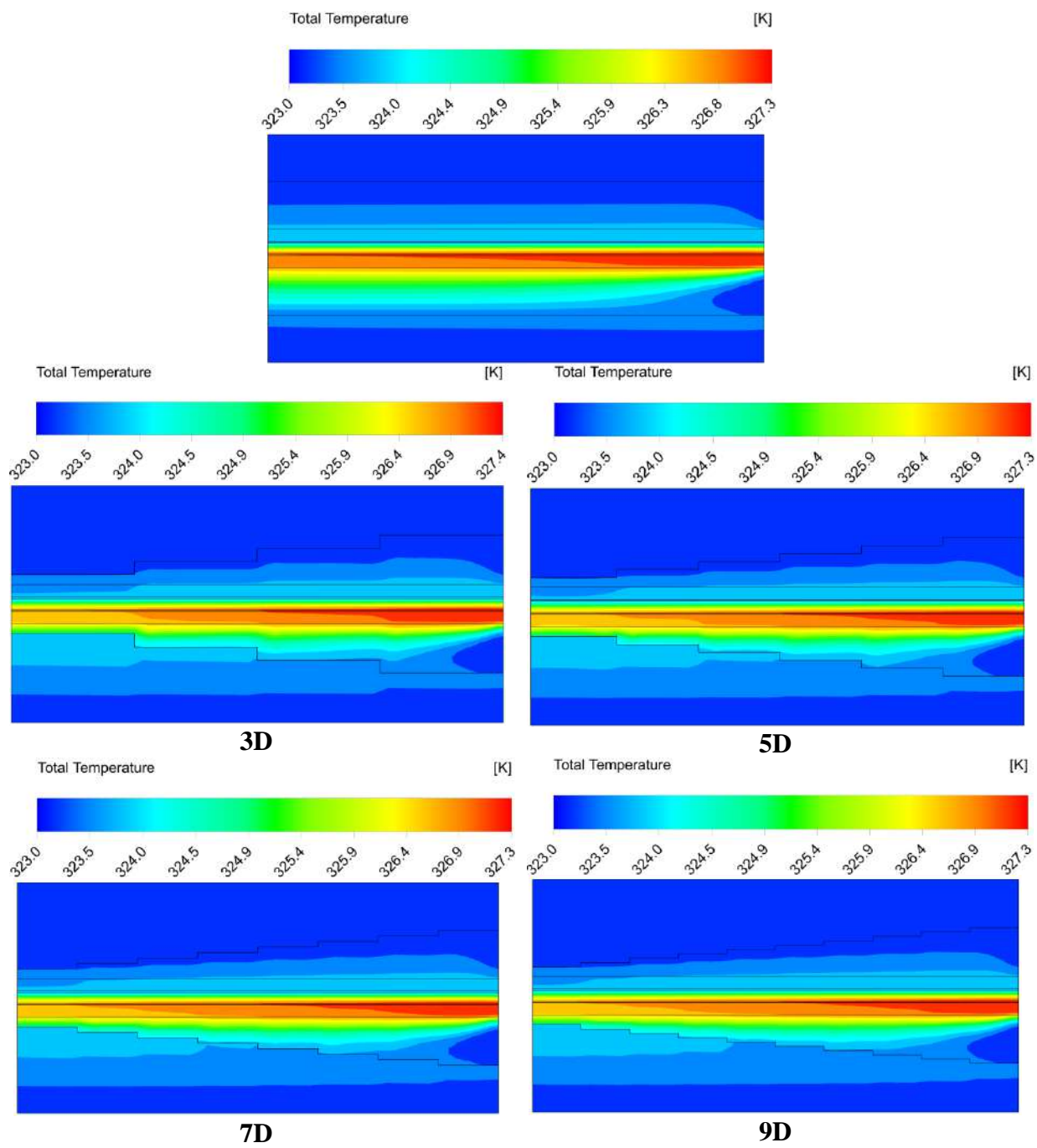


Fig.AIII.3 Contours de la vitesse. a) différentes hauteurs de sortie de canal, b) différents nombres de marche, c) model basique, au milieu de la cellule dans le plan ZY indiqué pour les PEMFC planaires.



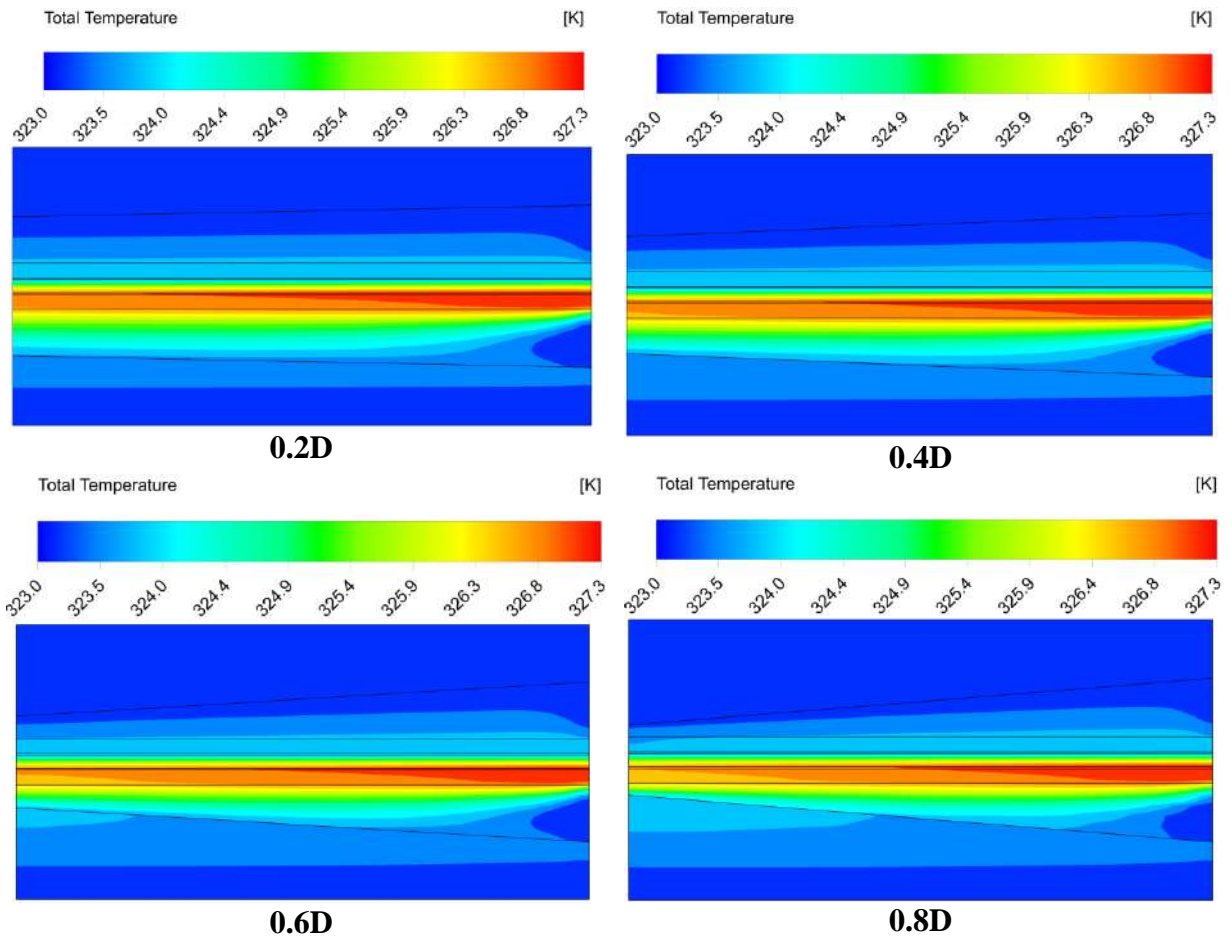


Fig.AIII.4 Contours de la température totale. a) différentes hauteurs de sortie de canal, b) différents nombres de marche, c) model basique, au milieu de la cellule dans le plan ZY indiqué pour les PEMFC planaires.

Liste des travaux scientifiques effectués durant la période de thèse

Conférences nationales et internationales

Sahli Youcef, Tamrabet Monsaf, **Mohammed Abdallah**, Ben-Moussa Hocine. Etude Thermodynamique de la Pile à Combustible à Membrane d'Echange de Protons. 2ème Journée de Structures et Développement Durable 2JSDD' 2019, 11 Avril, Tissemsilt, Algérie.

Monsaf Tamerabet, **Mohammed Abdallah**, Benmoussa Hocine. Effect of the channel cross section shape on the masse transfer in a tubular PEM fuel cell with twisted flow filed. International Symposium on sustainable Hydrogen ISSH2-2016, **Algiers, Algeria October 05-06-2016.**

Optimization Study of the Produced Electric Power by PCFCs, by Sahli Youcef, **Mohammed Abdallah**, Tamrabet Monsaf, Ben Moussa Hocine, the ISSH2-2019 symposium; the **27 and 28 November 2019** in Algiers, Algeria.

Effect of installing obstacles in flow fields on performance of a tubular PEM fuel cell., by Monsaf Tamerabet, **Abdallah Mohammedi**, Youcef Sahli, Hocine Ben Moussa, the ISSH2-2019 symposium; the **27 and 28 November 2019** in Algiers, Algeria.

Publications dans des revues scientifiques renommés

Monsaf Tamerabet, Hocine Benmoussa, Youcef Sahli, **Abdallah Mohammedi**. (2017). Unsteady three-dimensional numerical study of mass transfer in PEM fuel cell with spiral flow field. International Journal of Hydrogen Energy, 1–15. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2016.12.084>

Mohammedi, A., Sahli, Y., & Ben Moussa, H. (2019). 3D investigation of the channel cross-section configuration effect on the power delivered by PEMFCs with straight channels. Fuel, 116713. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2019.116713>

Abdallah Mohammedi, Hocine Ben moussa, Monsaf Tamerabet, Youcef SAHL. Numerical Investigation of the Effects of Channel Cross Section Shape on the Tubular PEMFC Performance, Journal of Advanced Research in Fluid Mechanics and Thermal Sciences Journal homepage (2020) 66(1) 84-103.

Optimization Study of the Produced Electric Power by Planar PEMFC-SCG, submitted to: **Journal of Renewable Energy Focus. (Under Review)**

Numerical investigation of the channel path shapes on the PEMFC performance; (pre-submit to an indexed scientific journal)



Full Length Article

3D investigation of the channel cross-section configuration effect on the power delivered by PEMFCs with straight channels

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

^a Laboratoire des Etudes de Systèmes Energetiques Industriels (LESEI), Département de Mécanique, Faculté de Technologie, Université de Batna 2, Algeria

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

ARTICLE INFO

Keywords:

PEMFC

CFD

Channel cross-section

Power density

ABSTRACT

In the present study, a three-dimensional (CFD) model is performed to investigate the effects of the channel cross-section shape on power density, pressure drop and local transport phenomena of the single straight channel PEMFC. 30 forms of channel cross-section including 5 well-known and 25 new innovative channel cross-section configurations have been investigated using ANSYS-FLUENT. The carried out experimental and numerical validations to verify the present model accuracy have shown a good agreement. The channel cross-section shapes have a significant influence on the power density at medium and higher current density. The best performance is reported by the channel cross-section configuration that has a trapezoidal bottom shape and an inverted trapezoidal top form. Whereas, the worst performance is obtained by the channel cross-section configuration that has an inverted half elliptical bottom shape and an inverted trapezoidal top form. A bad choice of the channel cross-section configuration can lead to a power density loss of 4.65%. The largest pressure drop is obtained from the triangular channel cross-section form whereas; the smallest pressure drop is reported by the rectangular channel cross-section shape.

1. Introduction

In the last decades, climate change has forced the world to be concerned about environmental pollution, and to seek new energy sources with less polluting emissions [1]. Owing to their higher efficiency and low emissions, the fuel cells seem to be the best alternatives technologies to produce clean energy [1]. Additionally, the most regarded fuel cell technology recently is the proton exchange membrane fuel cell (PEMFC). Even though existing of different types, the PEMFC has several advantages compared with other fuel cell types, from low operation temperature and high power density to quick start-up and zero emissions. These advantages made this type the best adoption in the automotive sector and stationary power generation [1,2]. The PEMFC performance depends on many factors such as components materials, operating conditions and geometrical configurations (the assembling of the MEA, membrane thickness... etc.). Meanwhile, designs of the flow field channels in the bipolar plate are among the important aspects to cost reduction and performance improvement in the PEMFC [3–5]. To deal with the commercialization issue, numerous researches were focused on the effect of flow field designs on the PEMFC performance. Innovative designs and constructions of PEMFC's flow field channels were realized to reduce the manufacturing cost and

increase the generated power density of the PEMFC. For instance; the spiral, radial, Bio-inspired flow field channels as well as the tubular design could replace the conventional design and improve the PEMFC performance [6–11]. The CCSs also have an important impact on the reactants distribution added to the PEMFC's power density. In this context, several research works were focused on the CCSs effects by investigating and optimizing different parameters involving shapes, dimensions, and channels to ribs ratio. Most of their results reported that an increase of the pressure drop along the channels was noticeable, thereby leading to effectively enhance the performance of PEMFC [11–13]. Kumar and Reddy [14] have studied the effect of CCS shapes on the hydrogen consumption at the anode and the performance of the PEMFC using triangular and hemispherical shapes. They have reported that these shapes increase the hydrogen consumption by 9% compared with the rectangular one. Ahmed and Sung [15] have investigated numerically the performance of a single straight PEMFC with trapezoidal, parallelogram and rectangular CCSs in both anodic and cathodic sides. They have found that a distribution uniformity of the reactants and local current density is obtained when the CCSs have the trapezoidal shape. Sun et al. [16] have proposed and employed a CFD model, considering the CCS in a trapezoidal shape, to study the pressure distribution and the flow cross-over through the GDL with neglecting

* Corresponding author.

E-mail address: sahli.sofc@gmail.com (Y. Sahli).

<https://doi.org/10.1016/j.fuel.2019.116713>

Received 15 November 2019; Accepted 20 November 2019

Available online 27 November 2019

0016-2361/ © 2019 Elsevier Ltd. All rights reserved.

Nomenclature

Subscripts and superscripts

AMG	algebraic Multigrid
Cell	fuel cell
CFD	computational fluid dynamic
CL	catalyst Layer
CCS	channel cross-section
GDL	gas diffusion layer
MEA	membrane electrolyte assembly
PEMFC	proton exchange membrane fuel cell

oxygen consumption. Results show that the trapezoidal cross-section shape has a significant effect on the pressure variation and the flow cross-over through the GDL of the PEMFC. Owejan et al. [17] have analyzed the flow filled channels effect on the liquid water distributions in operating 50 cm² fuel cells using the neutron radiography method, they have disclosed that the triangular channels retained less water than the rectangular channels for the same cross-sectional area. Metz et al. [18] have investigated numerically and experimentally the effect of using the triangular form of the cathodic micro-channel on the transport of liquid water droplets. They have found that this new flow field design enhances and stabilizes the cell initial performance compared with the standard design (square CCSs). Akhtar et al. [19] have investigated the effects of five different flow channel geometries including the triangular shape on the water removal and pressure drop in the PEMFC. They have concluded that the triangularly shaped cross-sections increase significantly the pressure drop. Bunmark et al. [20] have employed innovative slanted channels on both anodic and cathodic sides of the cell with an angle of 20° in order to improve water

management in the PEMFC. The experimental results have demonstrated that the CCS design alone could improve the PEMFC performance. Zhu et al. [21] have used a three dimensional CFD model to investigate the liquid water sensitivity, the pressure drop and the PEMFC performance with different micro-CCSs. Trapezoid, inverted trapezoid and triangle channel configurations are compared to the rectangle channel configuration. They have concluded that the cross-section shapes have a significant impact on the water droplets detachment and on the overall pressure drop. Khazaee et al. [22] have investigated experimentally the effect of different operating parameters and gas characteristics on the exergy efficiency and performance of triangular channel geometry in PEMFC. Ben Salah et al. [23] have analyzed the optimum gas channel design for water management, including the rectangular, trapezoidal, and triangular CCSs with the same cross-sectional area, height and width in both anodic and cathodic channels for all studied designs. Their results indicated that the rectangular CCS configuration has better water removal than the two other configurations. Wang et al. [24] have evaluated the local transport characteristics and performance of the PEMFC for several cathodic CCS configurations. The results showed that the triangular, semicircular and trapezoidal channel designs increase the oxygen utilization efficiency and improve the cell performance relative to rectangular channel design. The influence of the trapezoidal cross-section in the PEMFC serpentine channels was also investigated by [25]. Their results clearly indicate that the cross-section shape of the bipolar plate should be considered in the design of the PEMFC Khazaee et al. [26,27] have designed and constructed several PEMFC CCSs configurations (rectangular, elliptical and triangular) to study experimentally its effects on cell performance. They found that the rectangular channel form enhances the cell performance better than the triangular and elliptical channel forms. The gas channels geometry effect on cell performance has also been investigated by Ahmadi et al. [28]. They have changed the square CCS form to an inverse trapezoid, by increasing the width of

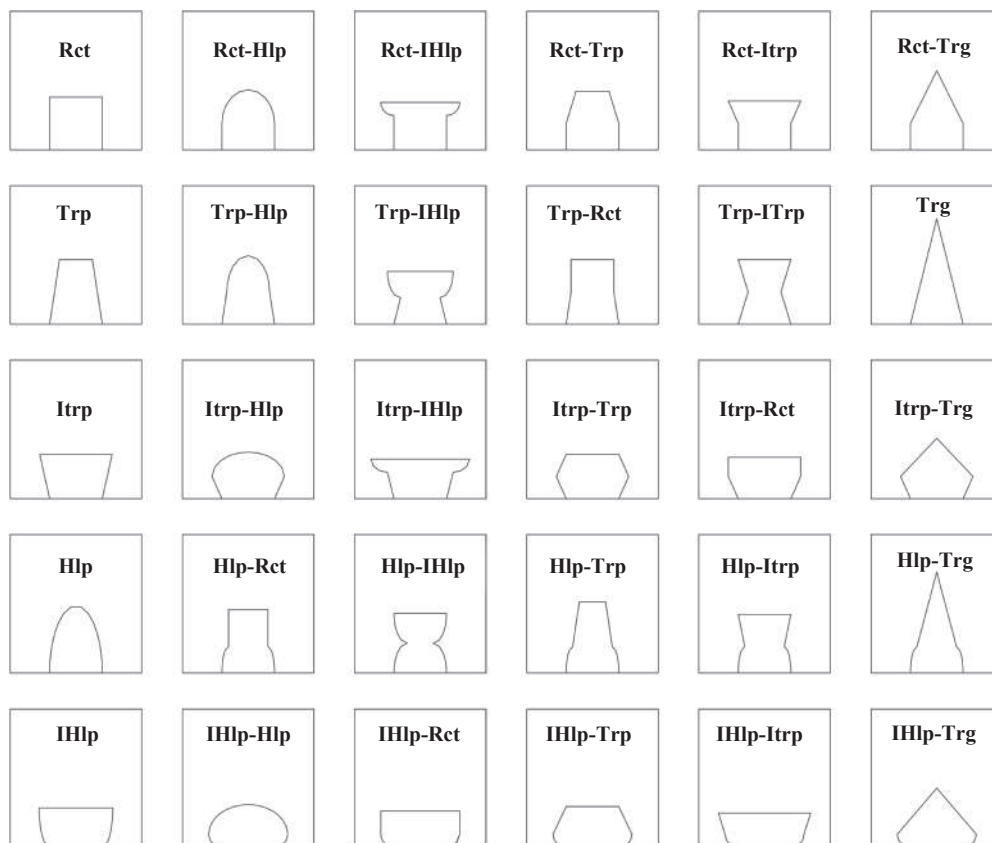


Fig. 1. Studied channel cross-section configurations.

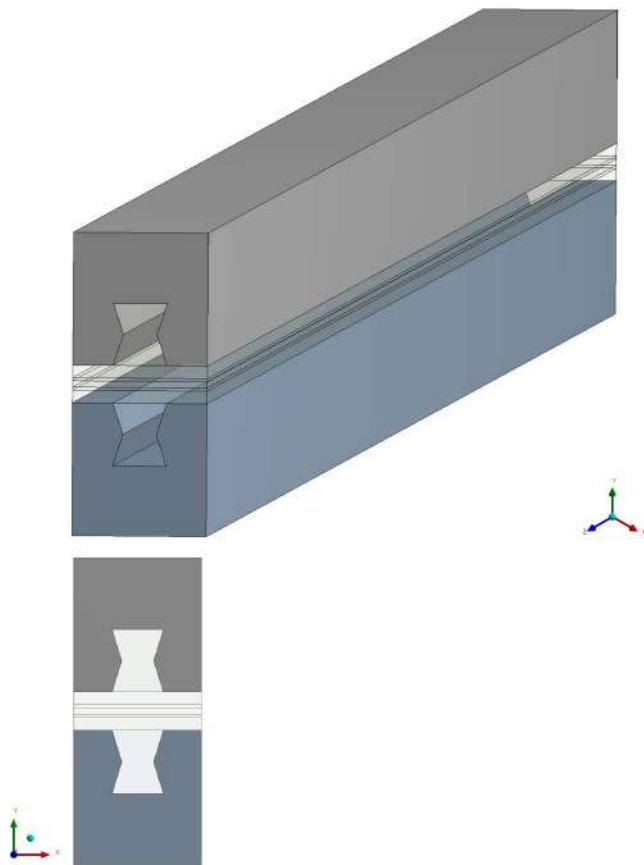


Fig. 2. Schematic representation of the PEMFC computational domain.

the channel top from 1 mm to 1.6 mm and keep the bottom width fixed at 1 mm. The results showed that the CCS with 1.2 mm width at the top of the channel is required for best PEMFC performance. Xu et al. [29] have used a theoretical flow network model to investigate the effects of stamped bipolar plate with trapezoidal like channel on the resistance characteristic and flow distribution in PEMFC. Korkischko et al. [30] have used a computational fluid dynamics methods to optimize the flow channel shape and improve the electrical performance of the PEMFC by using an inverted trapezoidal like shape of the CCS. They have reported that the optimized CCS improved current generation characteristics than the classic rectangular flow-channel. Paulino et al. [31] have numerically analyzed the influence of the flow CCS (rectangular, trapezoidal and hybrid stepped geometries) in the PEMFC water distribution. Their results indicate that trapezoidal and stepped CCSs present less water accumulation compared with the rectangular channel. Kim et al. [32] have numerically investigated the effect of three types of the CCSs (rectangular, trapezoidal with open angles of 60° and trapezoidal with open angles of 72°) on the liquid water behavior and pressure drop in the PEMFC. The results showed that the CCS with the trapezoidal with

Table 1
Methodology of the CCS's shape proposition.

Bottom	Top					
	Rectangular (Rct)	Triangular (Trg)	Trapeze (Trp)	Inverted trapeze (Itrp)	Half of ellipse (Hlp)	Inverted half of ellipse (IHlp)
Rectangular (Rct)	Rct	Rct-Trg	Rct-Trp	Rct-Itrp	Rct-Hlp	Rct-IHlp
Triangular (Trg)	Trg-Rct	Trg	Trp	Trp- Itrp	Trp- Hlp	Trp- IHlp
Trapeze (Trp)	Trp-Rct	Trg	Trp	Trp- Itrp	Trp- Hlp	Trp- IHlp
Inverted trapeze (Itrp)	Itrp-Rct	Itrp-Trg	Itrp- Trp	Itrp	Itrp- Hlp	Itrp- IHlp
Half of ellipse (Hlp)	Hlp-Rct	Hlp -Trg	Hlp-Trp	Hlp - Itrp	Hlp	Hlp- IHlp
Inverted half of ellipse (IHlp)	IHlp-Rct	IHlp-Trg	IHlp-Trp	IHlp-Itrp	IHlp-Hlp	IHlp

Table 2
Geometric parameters details.

Parameters	Unit	Values
Cell length	mm	100
Channel width	mm	0.8
Land area width	mm	0.8
Cross-section area	mm ²	0.64
Current collector thickness	mm	2
Gas diffusion layer thickness	mm	0.25
Catalyst layer thickness	mm	0.028
Membrane thickness	mm	0.23

Table 3
Material properties and boundary conditions used in the simulations.

Parameter	Units	Value
Open circuit voltage	V	1.09
Reference exchange current density (anode)	A/m ²	7.17
Reference exchange current density (cathode)	A/m ²	7.17 × 10 ⁻⁵
Concentration exponent		1
Charge transfer coefficient		1
Reference concentration	Kmol/m ³	0.0008814
Anode inlet gas mass flow	kg/s	6.0 × 10 ⁻⁷
Cathode inlet gas mass flow	kg/s	5.0 × 10 ⁻⁶
Operating pressure	Pa	101,325
H ₂ diffusivity	m ² /s	1.1 × 10 ⁻⁵
O ₂ diffusivity	m ² /s	3.2 × 10 ⁻⁵
H ₂ O diffusivity	m ² /s	7.35 × 10 ⁻⁵
Operating temperature	K°	343
Relative humidity	%	100
Bipolar plate density	kg/m ³	2719
Bipolar plate specific heat capacity	J/(kg·K)	871
Bipolar plate thermal conductivity	W/(m·K)	20
Bipolar plate electric conductivity	1/(Ω·m)	20,000
Bipolar plate–Gas diffusion layer contact resistance	Ω·m ²	1 × 10 ⁻⁶
Catalyst layer porosity		0.4
Catalyst layer viscous resistance viscous resistance	1/m ²	1.76 × 10 ¹¹
Catalyst layer surface to volume ratio	1/m	1.127 × 10 ⁷
Gas diffusion layer density	kg/m ³	321.5
Gas diffusion layer porosity		0.6
Gas diffusion layer electric conductivity	1/(Ω·m)	280
Gas diffusion layer viscous resistance	1/m ²	1.76 × 10 ¹¹
Membrane density	kg/m ³	1980
Membrane thermal conductivity	W/(m·K)	0.16
Membrane equivalent weight	kg/kmol	1100

open angles of 72° gives the best water removal characteristics. Hadjadj et al. [33] have implemented a three-dimensional model into CFD code to compare between three different cross-section shapes of both cell sides (rectangular, triangular and elliptical straight channels) with the same cross-channel area and to study the effects of these configurations on the performance and the transport phenomena in the PEMFC. The simulation results show that the triangular configuration in both anode and cathode channels improve the PEMFC performance compared to the rectangular and elliptical configurations.

Even though this subject has been receiving notable attention in the

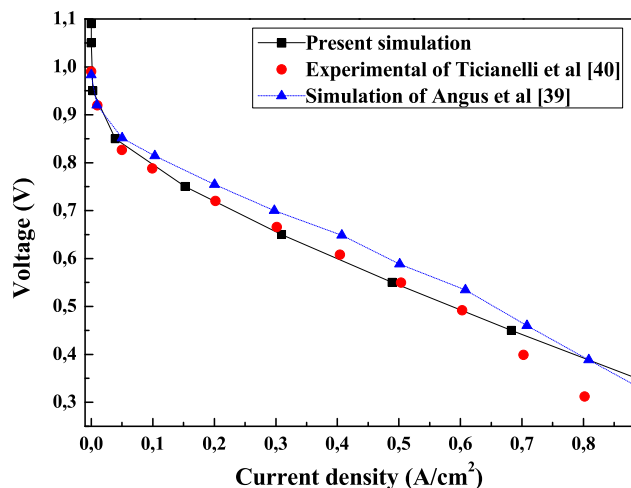


Fig. 3. Comparison of polarization curve between present model, experimental of Ticianelli et al. [40] and numerical simulation of hood [39].

literature, the improvement of PEMFC performance based on the effect of the CCS shapes in the bipolar plate is not yet clear and undetailed. In addition, most of the research works are focused only on limited shapes (rectangular, triangular, trapezoidal and elliptical) without saving all necessary comparison factors such as the cross-sectional areas, gas flows, ratio between gas flows and land area because these parameters affect the performance of the PEMFC. This issue cannot be addressed by changing the CCS shape of one side of the cell or varying the channel width from configuration to other since this leads to inequality in the reactants flow rate, the ratio between gas flows, the land area and the CCS area. However, the aim of this work is the optimization of the PEMFC CCS design with 25 novel innovative shapes in term of comparative analysis to 5 well-known geometry shapes (rectangular, triangular, trapezoidal, inverted trapezoidal and elliptical). Moreover, in this paper, the area of both anodic and cathodic CCS, land area (anodic and cathodic channel widths), reactants flow rate and ratio between gas flows are kept constant for the 30 cells in order to find the best cross-section shape with a moderate pressure drop. In addition, the feasibility and realization of the proposed forms are taken into consideration in the selection of the designs that are provided in this study. A three dimensional CFD model of PEMFC with a single straight channel geometry is used for all considered CCSs, resulting in 30 cells simulated under the same operating conditions (pressure, temperature, water vapor concentration, oxygen concentration and hydrogen mass fraction). For each studied cross-section shape, the performance, pressure drop, and transport characteristics are investigated in detail, and they are compared to extract the optimal cross-section design. This study presents new innovative and optimal CCSs that could be used by the PEMFC manufacturing companies to improve their performances.

2. Geometries, model and validation

2.1. Channel cross-section geometries

In this study, 30 types of CCS designs have been considered, including new 25 innovative and 5 well-known configurations, ANSYS-Design Modular Tool is used to create all these CCS forms (Fig. 1.). For all studied configurations, the PEMFC used is considered as a single straight channel geometry, which is composed of both anodic and cathodic bipolar plates which function as current collectors including both gas flow channels, both anodic and cathodic gas diffusion layers (GDL), both anodic and cathodic catalyst layers (CL) and the electrolyte membrane (Fig. 2).

PEMFC's channels cross-section of area 0.64 mm² are kept constant for all considered form to realize an equitable comparison among the 30

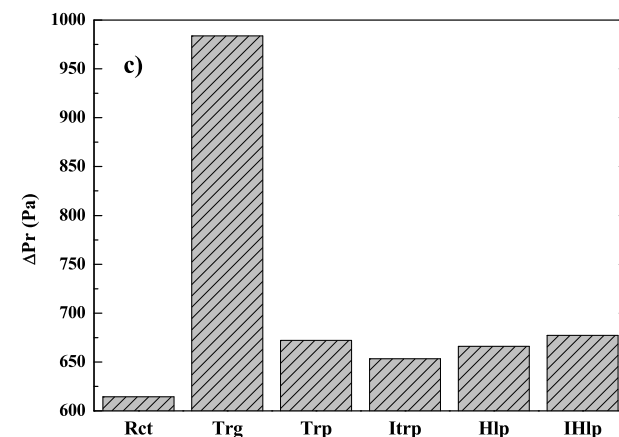
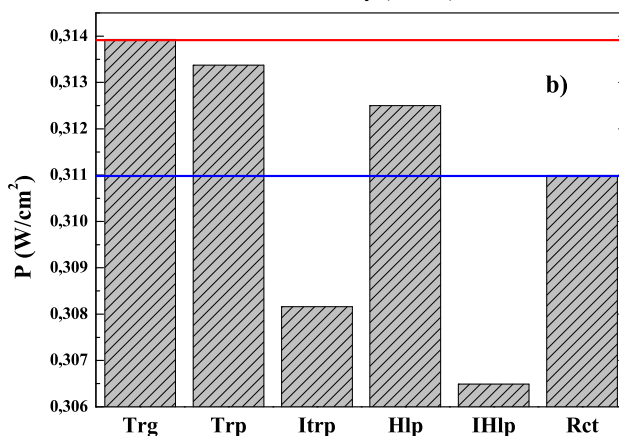
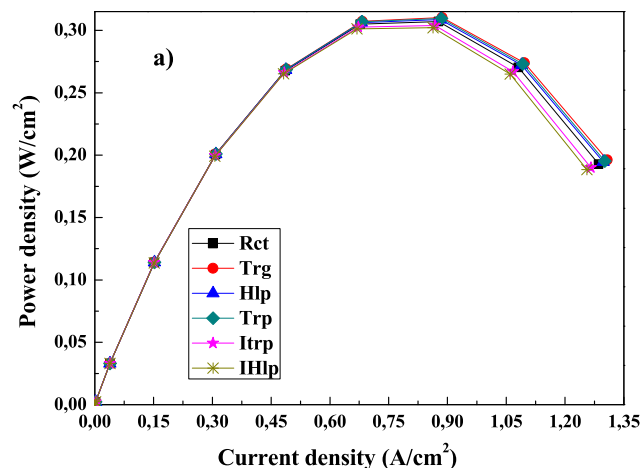


Fig. 4. Comparison between the CCS configurations with simple geometries. a) I-P curves, b) maximum power density, c) pressure drop.

studied configurations. In addition, the contact area between the channels and the electrodes (channel width for a rectangular shape) are maintained constant for all studied forms to ensure an equitable or equal land area.

Concerning the choice of CCS designs, the creation of all shapes is based on a logical and specific method. In the first step, the 5 well-known geometry shapes which are rectangular, triangular, trapezoidal, inverted trapezoidal and elliptical added to the new inverted elliptical configuration are used as base configurations. In the second step, in order to combine these configurations together one by one, the channels cross-sections are divided into two parts (top and bottom) as listed and named in Table 1. The third step concerns the combination and sort of the resulted geometry forms. The combination between the triangular and trapezoidal configuration is excluded in both parts (top and

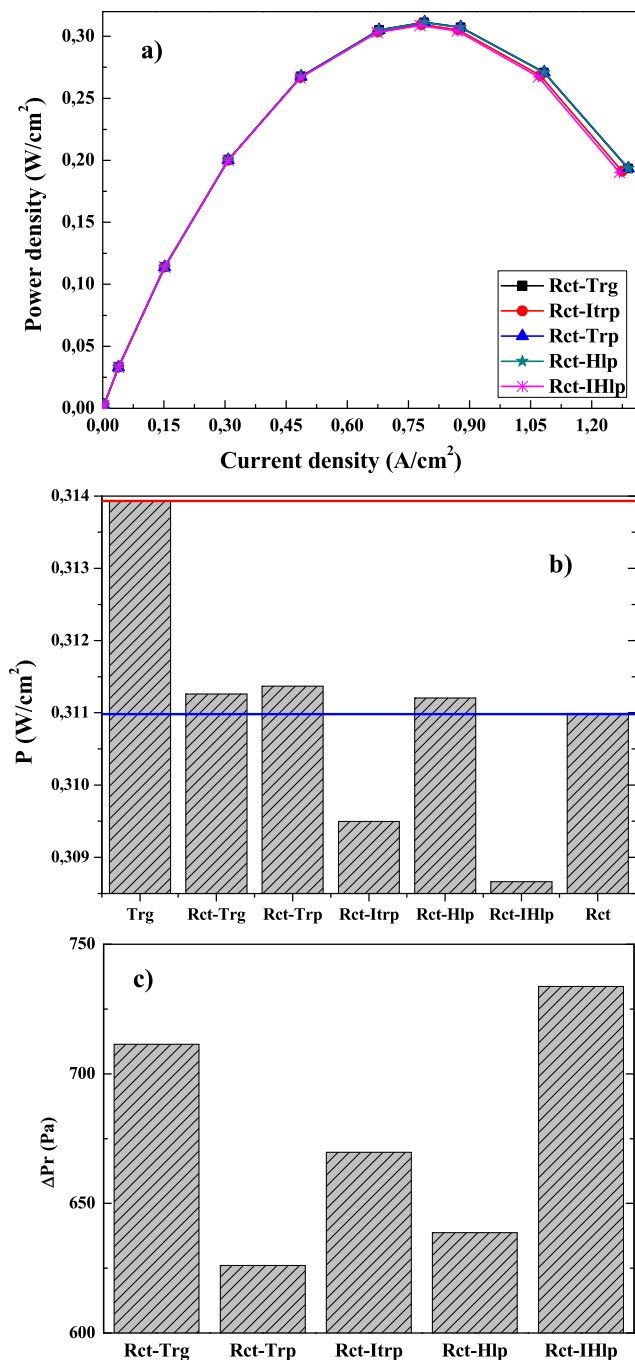


Fig. 5. Comparison between the CCS configurations with a rectangular base. a) I-P curves, b) maximum power density, c) pressure drop.

bottom) in which that they have the same shape when the combination has been done (triangular and trapezoidal shapes). The CCS designs obtained by the trapezoidal base are eliminated from the table because they are identical to the CCS designs obtained by the triangular base.

Moreover, the same operating conditions such as temperature, pressure, reactant flow rates, ratio between gas flows, fuel and oxidizer are considered in the thirty configurations used for a significant comparison purpose. The current collectors, GDLs, CL, anode, cathode and membrane thicknesses are also conserved for all considered designs in this study to ensure an equitable comparison. The geometry details are listed in Table 2.

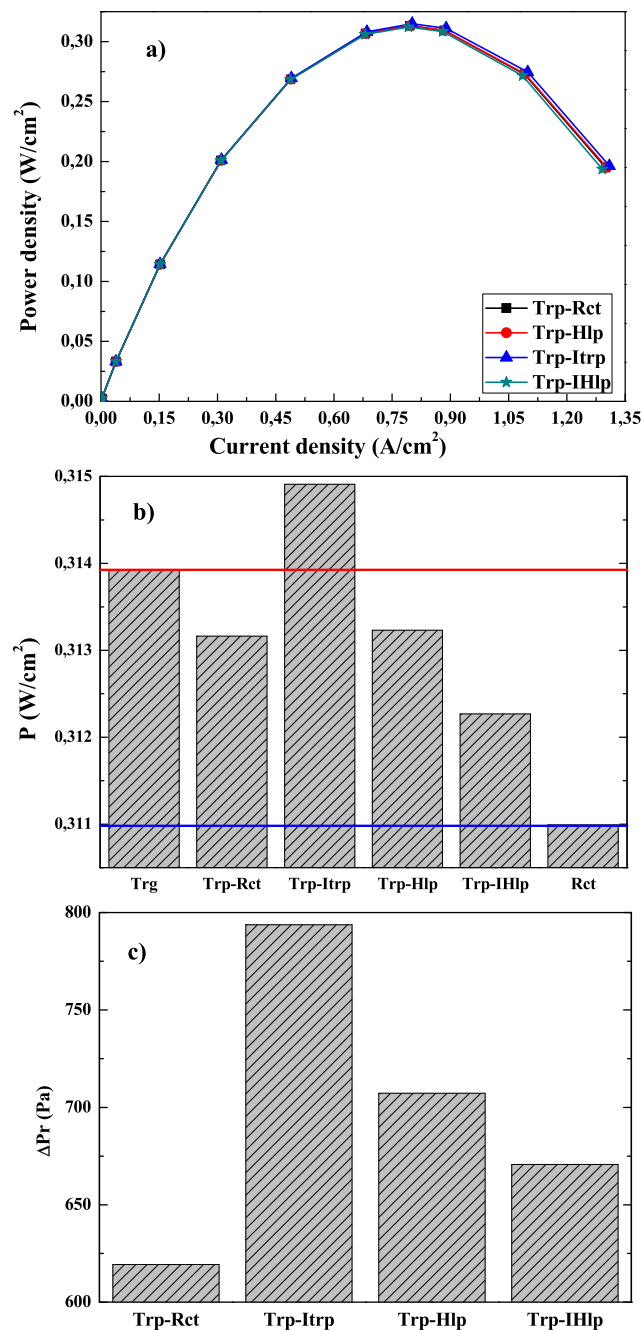


Fig. 6. Comparison between the CCS configurations with a trapezoidal base. a) I-P curves, b) maximum power density, c) pressure drop.

2.2. Numerical model

In order to investigate the effects of the CCSs presented in the cross-sectional geometries section on the PEMFC performance, pressure drop and other transport characteristics, numerical simulations are carried out using the commercial CFD ANSYS-Fluent.

The equations of the species transport, Navier-Stokes, energy, mass conservation, electrical charges and Butler-Volmer are involved in the three dimensional PEMFC model. The ANSYS PEMFC add-on Module manual describes and discusses in details the model equations and the methods of implementation [34].

In addition, the model assumed to be under steady-state and non-isothermal conditions, considered that the through is laminar and incompressible, the porous zone (GDLs, CLs and membrane) are assumed isotropic and homogeneous, the ideality in reactant gases are taken into

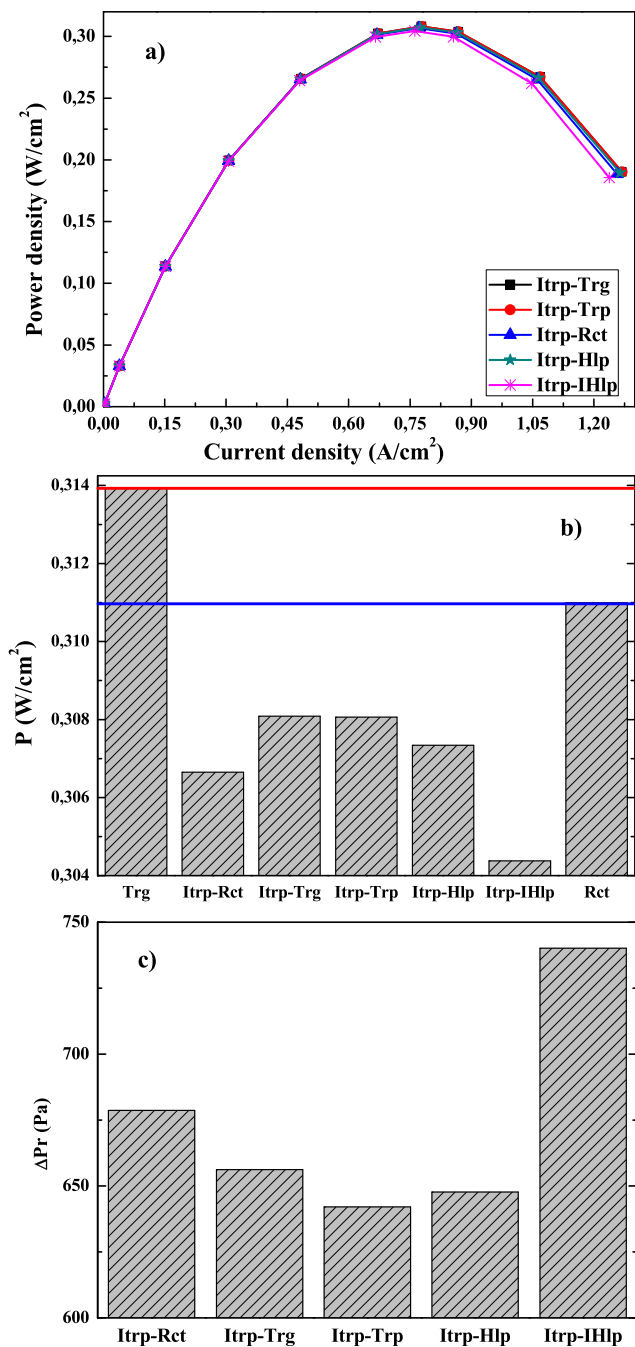


Fig. 7. Comparison between the CCS configurations with an inverted-trapezoidal base. a) I-P curves, b) maximum power density, c) pressure drop.

account; liquid water generation is not considered (neglecting water phase change, only water vapor is considered [13,35–37]. Before the exportation of the geometries to the ANSYS Fluent software, computational meshes were generated using ANSYS-Meshing [38]. A three dimensional hexahedral mesh type is used for most of the studied configurations except some configurations and combinations that have an unstructured grid (both tetrahedral and hexahedral meshes). All meshes contain approximately 69,892 elements. A test of mesh independency is performed to choose this number, avoid long computational time and ensure model accuracy. The mesh is composed of a non-uniform grid for x and y directions and uniform grid for z direction. The number of grids in the y direction is 17 for each collector, 5 for each gas diffusion layer, catalyst layer and membrane. In the z direction, the mesh is 60 grids along the cell.

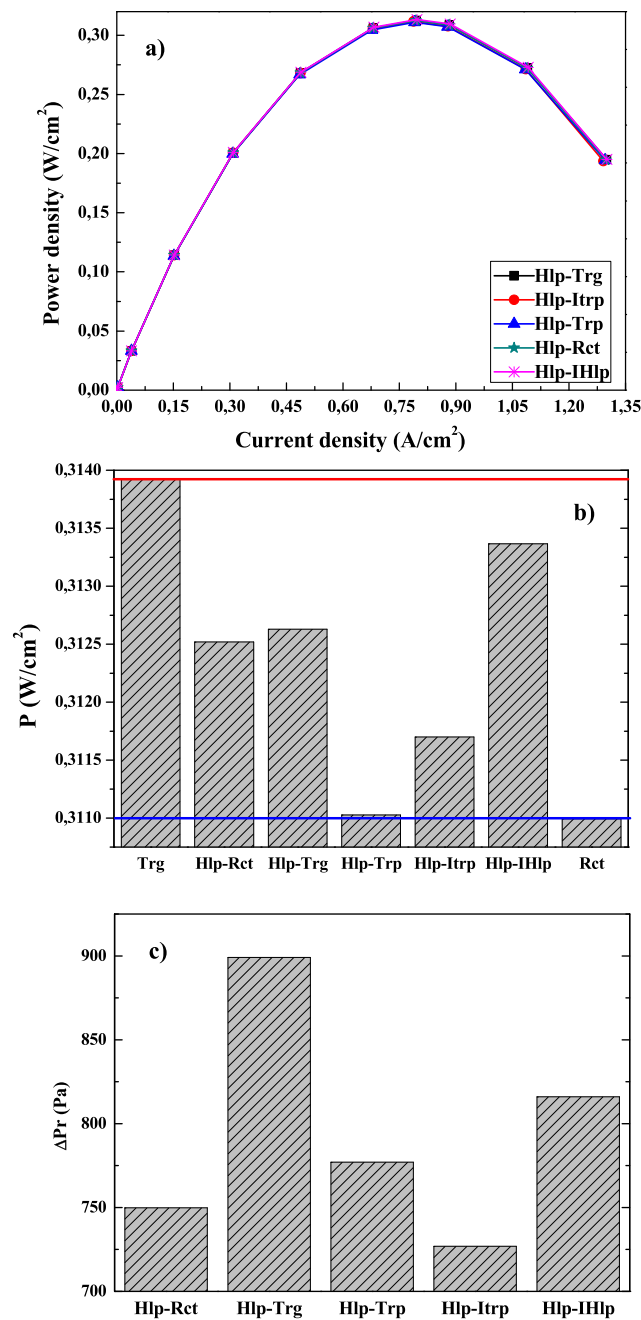


Fig. 8. Comparison between the CCS configurations with an elliptical base. a) I-P curves, b) maximum power density, c) pressure drop.

In order to run the calculations and to complete the simulations, the obtained grids from the meshing tool are imported into ANSYS fluent 16.0 software that includes the add-on module command. Appropriate boundary conditions are needed for all presented configurations, mass flow rate is set to be $6 \times 10^{-7} \text{ kg s}^{-1}$ with a mass fraction of 0.5/0.5 $\text{H}_2/\text{H}_2\text{O}$, $5 \times 10^{-6} \text{ kg s}^{-1}$ with a species mass fraction of 0.1785/0.15 $\text{O}_2/\text{H}_2\text{O}$ at the anode and the cathode respectively. These values are calculated correspond to the humidification conditions for the anode and cathode considering air as the oxidant. The operating temperature is set at 343 K for the terminal surface of the anode and cathode current collectors and the pressure is set at 1 atm at the channel outlets. All material properties and boundary conditions are based on previous experiment and numerical studies as summarized in Table 3.

To ensure solution stability, the under relaxation factors for the species equations, water content, water saturation, and energy are set to

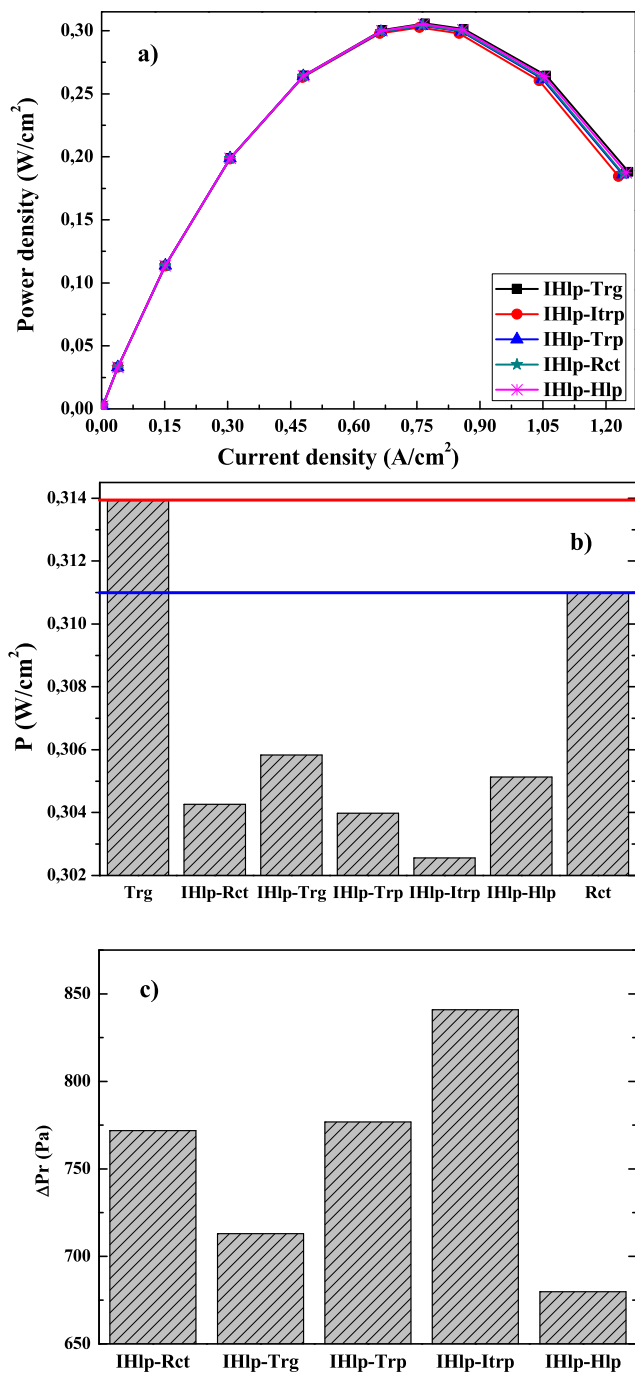


Fig. 9. Comparison between the CCS configurations with an inverted elliptical base. a) I-P curves, b) maximum power density, c) pressure drop.

0.95. In addition, a momentum under relaxation factor of 0.3 and a pressure under relaxation of 0.7 are used. F-cycle multi-grid solution control with AMG method is also used to increase the convergence rate. The double precision is served in all calculations for ensuring more accurate results.

2.3. Test and validation

In order to investigate clearly the effect of CCSs on the PEMFC

performance, the polarization (I-V) curve of the single-phase model is predicted using a steady state simulation. In addition, a voltage range of the open circuit voltage (OCV) from 0.3 to 0.9 V is considered to obtain the validation curve. The validation of this model including all the simulation parameters is taken by a viewpoint of the I-V polarization curve. The simulated PEMFC has a similar kind of geometry with the same dimensions used by Hood et al. [39] to ensure a fair comparison. Hood et al. [39] have compared their model with two numerical approaches and the experiment of Ticianelli et al. [40] to ensure the accuracy of the utilized model. Comparisons between our results, the numerical results of Hood et al. [39] and the experimental results of Ticianelli et al. [40] are performed to establish the accuracy of the simulated results. The comparison is performed for a 100 mm-long PEMFC with a rectangular cross-section.

At lower current densities, good agreements between the experimental data of Ticianelli et al. [40] and our simulation results are seen to be identical. Slight differences are seen between the current model and the numerical investigation of Hood et al. [39] Fig. 3.

At high-current-density regions, acceptable agreements are observed between the experimental curve of Ticianelli et al. [40] and both simulation curves. The experimental curve is below of both numerical curves (the present predicted curve and the polarization curve of Hood et al. [39]) with a small difference Fig. 3.

This difference is attributed to several factors including the used simplifying assumptions, acculturation of round off errors ... etc. Comparing the present ANSYS FLUENT model and the numerical model of Hood et al [39] with the experimental data of Ticianelli et al. [40] the respective errors are about 7.4% and 13.3%.

3. Results and discussions

In this section, and as was previously mentioned in the CCS geometries, the 30 configurations already simulated using ANSYS-FLUENT are examined in terms of power densities, pressure drops and other transport characteristics to extract and find out the CCSs effect on the PEMFC produced power density.

The comparison between the 30 studied configurations of the CCS is presented into six subsections. The first subsection compares the simple configurations, which are well-known configurations (Rct, Trg, Trp, Itrp, Hlp) added to the new configuration (inverted half of the ellipse). The second subsection compares the configurations that have a rectangular CCS base (Rct-Trg, Rct-Trp, Rct-Itrp, Rct-Hlp, Rct-IHlp). The third subsection compares the configurations that have a trapezoidal CCS base that is the same with triangular one as mentioned above (Trp-Rct, Trp-Itrp, Trp-Hlp, Trp-IHlp). The fourth subsection compares the configurations that have an inverted trapezoidal CCS base (Itrp-Rct, Itrp-Trg, Itrp-Trp, Itrp-Hlp, Itrp-IHlp). The fifth subsection compares the configurations that have a CCS that is half elliptical base (Hlp-Rct, Hlp-Trg, Hlp-Trp, Hlp-Itrp, Hlp-IHlp). The last subsection compares the configurations that have a CCS with an inverted half elliptical base (IHlp-Rct, IHlp-Trg, IHlp-Trp, IHlp-Itrp, IHlp-Hlp).

To make a clearer comparison of the presented subsections and to better evaluate the studied CCS configurations, the maximum power densities of the triangular and rectangular CCS configurations are integrated into the whole compressions. Where the triangular CCS is considered as the best performance configuration in the literature and the rectangular CCS is considered as the most used configuration.

3.1. Simple geometries

The I-P curves obtained by the simple CCS configurations are presented in Fig. 4a. It is clearly observed from this figure that at low

current densities (0–0.5 A/cm²), all curves almost coincide indicating that the CCS shapes do not have great effects on PEMFC performance and all CCS configurations gave similar power densities. At medium and high current densities (0.5–1.3 A/cm²), the CCS configuration becomes an influence parameter, which has a noticeable effect on the power density. The highest power densities are obtained by a current density of about 0.785 A/cm². In addition, the difference between the power densities obtained by the different CCS configurations is proportional to the current density.

The highest power density is reported by the triangular CCS configuration; which is almost 0.314 W/cm². The lower power density is obtained by the channel with the inverted half elliptical cross-section configuration; which is almost 0.306 W/cm². The use of the trapezoidal and half elliptical CCS configurations allows the obtaining of better power densities compared to the rectangular CCS configuration. The produced power densities using the trapezoidal CCS shape are greater than the ones obtained using half-elliptical CCS shape. In addition, the reported power density using the inverted trapezoidal CCS form is lower to that obtained using the rectangular CCS form Fig. 4a and 4b.

Fig. 4c presents the pressure drops produced inside the PEMFCs for the simple CCS configurations. From this figure, it should be noted that the triangular CCS shape causes the largest pressure drop compared to the other simple CCS shapes; which is about 983.7 Pa. The rectangular CCS shape provokes the smallest pressure drop (614.3 Pa). However, the pressure drops obtained by the other CCS configurations (trapezoidal, inverted trapezoidal, half elliptical and inverted half elliptical) are almost the same, the difference between these pressure drops do not exceed 63 Pa.

The triangular CCS shape forces the reactants to flow through a single path; this makes the maximum velocity distributed near the GDL compared to other simple CCS configurations. (View Fig. 14 in appendix). In addition, this CCS configuration increases the maximum outlet velocity, which leads to a decreasing of the outlet total pressure and an increasing of the pressure drop compared to the other simple CCS configurations (View Figs. 13 and 14 in appendix). This conducts to an increase in the mass transfer by convection due to the important reactant gases velocity that is lead to a more homogenous distribution of the oxygen and hydrogen, as well as a more concentration of water resultant compared to the other simple CCS configurations (View Figs. 10–12 in appendix). Therefore, the triangular CCS gets an enhancement of the PEMFC performance compared to the other simple CCS configurations. Moreover, the triangular CCS configuration shows slightly lower temperature values compared to the other simple CCS configurations (View Fig. 15 in appendix). Even as the PEMFC power density is proportional to the temperature in the reaction sites, this does not affect the power density produced since the temperature difference between all simple CCS configurations does not exceed 0.2 K.

3.2. Rectangular base geometries

The I-P curves obtained according to the CCSs rectangular base forms are shown in Fig. 5a. The highest power densities generated using CCSs rectangular base forms are obtained by a current density of about 0.785 A/cm². The highest power density is reported by the Rct-Trp CCS configuration; which is almost 0.312 W/cm². The lower power density is obtained by Rct-I-Hlp configuration; almost 0.308 W/cm². The use of the Rct-Trp, Rct-Trg and Rct-Hlp CCS shapes allows the obtaining of better power densities compared to the rectangular CCS shape. The obtained power density using the Rct-I-Trp and Rct-I-Hlp forms is lower than that obtained using the rectangular CCS form. In addition, all obtained power densities using the rectangular CCSs base forms are lower than that reported by the triangular CCSs forms Fig. 5a and 5b.

The pressure drops generated from the inlet to outlet of the PEMFCs having a CCS with a rectangular base form are presented in Fig. 5c. It should be noted that the Rct-I-Hlp and CCS configuration causes an important pressure drop compared to the Rct-Trp, Rct-I-Trp, Rct-Trg and Rct-Hlp. The maximum pressure drop is about 733.7 Pa. The smallest pressure drop is provoked by the Rct-Trp CCS shape; of about 626.1 Pa. Even though the Rct-Trp form of the CCS provokes the smallest pressure drop amongst the CCSs with a rectangular base form, it permits the obtaining of the largest power density, by dint of the considerable gas velocities at electrode/channel interfaces compared to other CCS forms with rectangular bases. (View Figs. 19 and 20 in appendix). This logically leads to an increase of the convective mass transfer of the reactant gases, as well as the resulted water concentration (View Figs. 16–18 in appendix). In addition, the Rct-Trp CCS shows higher temperature values at EMA compared to the other CCS forms with a rectangular base shapes (view Fig. 21 in appendix). This also helps in improving the power density produced from the PEMFC.

3.3. Trapezoidal base geometries

The I-P curves obtained according to the CCSs with trapezoidal base shapes are shown in Fig. 6a. The highest power densities obtained using trapezoidal CCSs base forms are obtained by a current density of about 0.797 A/cm². The highest power density is reported by the Trp-I-Trp CCS configuration; reaching almost 0.315 W/cm². The lower power density is obtained by Trp-I-Hlp configuration; of almost 0.312 W/cm². The use of the trapezoidal base CCS shapes allows the obtaining of better power densities compared to the rectangular CCS shape. In addition, the Trp-I-Trp CCS configuration shows better power densities compared to the triangular CCS. The obtained power density using the Trp-Rct, Trp-Hlp and Trp-I-Hlp forms is lower than the one obtained using the triangular CCS form Fig. 6a and 6b.

The pressure drops generated from the inlet to outlet of the cells having a trapezoidal CCS base shape are presented in Fig. 6c. The Trp-I-Trp CCS configuration has the highest pressure drop compared to the Trp-Hlp, Trp-I-Hlp and Trp-Rct. The maximum pressure drop is about 793.7 Pa. The smallest pressure drop is provoked by the Trp-Rct CCS shape; of about 619.7 Pa.

The Trp-I-Trp CCS form forces the reactants to flow through with a considerable velocity near the GDL compared to other trapezoidal CCS base configurations. (View Fig. 26 in appendix). This leads to a decrease of the outlet total pressure and a logical increase in pressure drop. (View Fig. 25 in appendix). Hence, an increase of the convective mass transfer of the reactant gases, as well as the resulted water concentration (view Figs. 22–24 in appendix). Moreover, the Trp-I-Trp CCS shape shows higher temperature values at EMA compared to the other CCS forms with a trapezoidal base (View Fig. 27 in appendix). This also contributes to a raise in the produced power density.

3.4. Inverted trapezoidal base geometries

The I-P curves obtained according to the CCSs with an inverted trapezoidal base configuration are shown in Fig. 7a. The highest power densities reported using inverted trapezoidal CCS base forms are obtained by a current density of about 0.770 A/cm².

The highest power density is reported by both I-Trp-Trg and the I-Trp-Trp CCS configuration; reaching almost 0.308 W/cm². The lower power density is obtained by I-Trp-I-Hlp configuration; of almost 0.304 W/cm². The use of the inverted trapezoidal base CCS shapes allows the obtaining of the lowest power densities compared to the rectangular and triangular CCS shapes Fig. 7a and 7b.

Fig. 7c presents the pressure drops generated from the inlet to outlet

of the PEMFCs having a CCS inverted trapezoidal base form. From this figure, it can be observed that the Itrp-IHlp CCS configuration provokes the highest pressure drop compared to the other CCS configurations. The maximum pressure drop is about 740.1 Pa, while the smallest pressure drop is about 642.1 Pa that addressed to the Itrp-Trp CCS.

The inverted trapezoidal base CCS form has open walls; this makes the maximum velocity farther the GDL and provokes relatively low-pressure drops compared to the other studied CCS forms (View Figs. 31 and 32 in appendix). This logically leads to a decrease in the velocity at electrodes/channels interfaces and convective mass transfer of the reactant gases, as well as the resulted water concentration in the GDL compared to the other studied CCS forms (view Figs. 28–30 in appendix).

Even as these forms have relatively high temperatures compared to the other studied CCS shapes, this does not improve the power density produced too much since the temperature increase of these CCS forms compared to the other studied forms does not exceed 0.2 K (view Fig. 33 in appendix).

3.5. Half elliptical base geometries

Fig. 8a shows the I-P curves obtained according to the half elliptical CCS base forms. The highest power densities generated using CCSs with half elliptical base configurations are obtained by a current density of about 0.792 A/cm². The highest power density is reported by the Hlp-I-Hlp CCS configuration; that almost reaches 0.313 W/cm². The lower power density is obtained by Hlp-Trp CCS configuration; of almost 0.311 W/cm². The use of the CCS with half elliptical base shapes allows the obtaining of better power densities compared to the rectangular CCS shape. In addition, all these configurations of the half elliptical base CCSs shows lower power densities compared to the triangular CCS shapes Fig. 8a and 8b.

Fig. 8c presents the pressure drops generated from the inlet to outlet of the PEMFCs having a half elliptical CCS base shape. It can be noted that the Hlp-Trg CCS configuration has the highest pressure drop compared to the Hlp-I-Hlp, Hlp-Trp, Hlp-Rct and Hlp-I-Trp. The maximum pressure drop is about 899.1 Pa. while the smallest pressure drop is about 726,9 Pa, which is generated by the Hlp-I-Trp CCS configuration.

The Hlp-I-Hlp CCS shape forces both gases to flow through with a considerable velocity near the electrodes/cannels interface compared to other half elliptical CCS base shapes (View Fig. 38 in appendix). This results in a decrease of the outlet total pressure and an increase in the pressure drop (view Fig. 37 in appendix). Hence, an increase in the convective mass transfer of the reactant gases, as well as the resulted water concentration (view Figs. 34–36 in appendix). Moreover, the Hlp-I-Hlp CCS shape shows higher temperature values at EMA compared to the other CCS forms with a half elliptical base (view Fig. 39 in appendix). This increase in the temperature values contributes also to the improving of the produced power density.

3.6. Inverted half-elliptical base geometries

The I-P curves obtained according to the inverted half-elliptical CCS base forms are shown in Fig. 9a. The highest power densities generated using CCSs with inverted half-elliptical base shapes are obtained by a current density of about 0.763 A/cm².

The highest power density is reported by the I-Hlp-Trg CCS configuration; which is almost 0.305 W/cm². The lower power density is obtained by I-Hlp-I-Trp configuration; reaching almost 0.301 W/cm². The use of the inverted half-elliptical base CCS shapes leads to

obtaining the lowest power densities compared to the triangular and rectangular CCS shapes Fig. 9a and 9b.

Fig. 9c presents the pressure drops generated from the inlet to outlet of the PEMFCs having a CCS with an inverted half-elliptical base shape. The I-Hlp-I-Trp CCS configuration has the highest pressure drop compared to the other CCS configurations. The maximum pressure drop is about 840.9 Pa. The smallest pressure drop is about 679.8 Pa, that is addressed to the I-Hlp-Hlp CCS configuration.

The inverted half-elliptical base CCS configurations has a divergent form from the bottom to top of channels; this reduces the gas velocities at the electrodes/channels interface and produces relatively low-pressure drops compared to the other studied CCS shapes (View Figs. 43 and 44 in appendix). This is reflected by a decrease in the convective mass transfer of the reactant gases and resulted water concentration compared to the other studied CCS configurations (View Figs. 40–42 in appendix). In addition, these forms have a slight increase in temperature relative to the other studied CCS forms (0.2 K), this does not really contribute to the power density improvement of these shapes (view Figs. 45 in appendix).

4. Conclusion

This paper presented a three dimensional CFD model using the software ANSYS-Fluent and its PEMFC module for the purpose of investigating the effect of the CCS shapes on the power density, pressure drop and local transport phenomena of the single channel PEMFC. 30 configurations of PEMFC's CCS with the same area for both anode and cathode sides including 5 well-known and 25 new innovative CCSs configurations have been investigated. Simulation results indicate that:

At low current densities and high voltage, the CCS shapes have a little influence on the power density (cell performance); contrariwise, at high current densities and low voltages, the CCS configuration has a significant effect of the PEMFC performance.

The Trp, Hlp, Rct-Trg, Rct-Trp and Rct-Hlp CCS configurations have a higher power density over than the rectangular CCS configuration; contrariwise, the Itrp, IHlp, Rct-Itrp and Rct-IHlp CCSs configurations have the worst cell performance over than the rectangular configuration.

All CCS shapes with trapezoidal and half elliptical bases have a higher power density over than the rectangular CCS shape; contrariwise, the CCSs shapes with the inverted trapezoidal and inverted half elliptical bases have the worst cell performance over than the ones with a rectangular shape.

The Trp-Itrp CCS configuration has a superior power density over the total number of the studied CCS configurations including the triangular CCS configuration that is considered as the best configuration in literature. The reported power density gain using the Trp-Itrp CCS configuration almost reaches 4.65%.

The largest pressure drop is obtained by the triangular CCS configuration; contrariwise, the smallest pressure drop is reported by the rectangular CCS configuration.

The Trp-Itrp CCS configuration allows a reduction in the pressure drop by 19.31% compared to the triangular CCS configuration. This decrease in the pressure drop logically results in lower pumping power, thus improving the global system performance (pumping - Fuel cell).

Declaration of Competing Interest

The authors declare that they have no known competing financial interests or personal relationships that could have appeared to influence the work reported in this paper.

Appendix 1

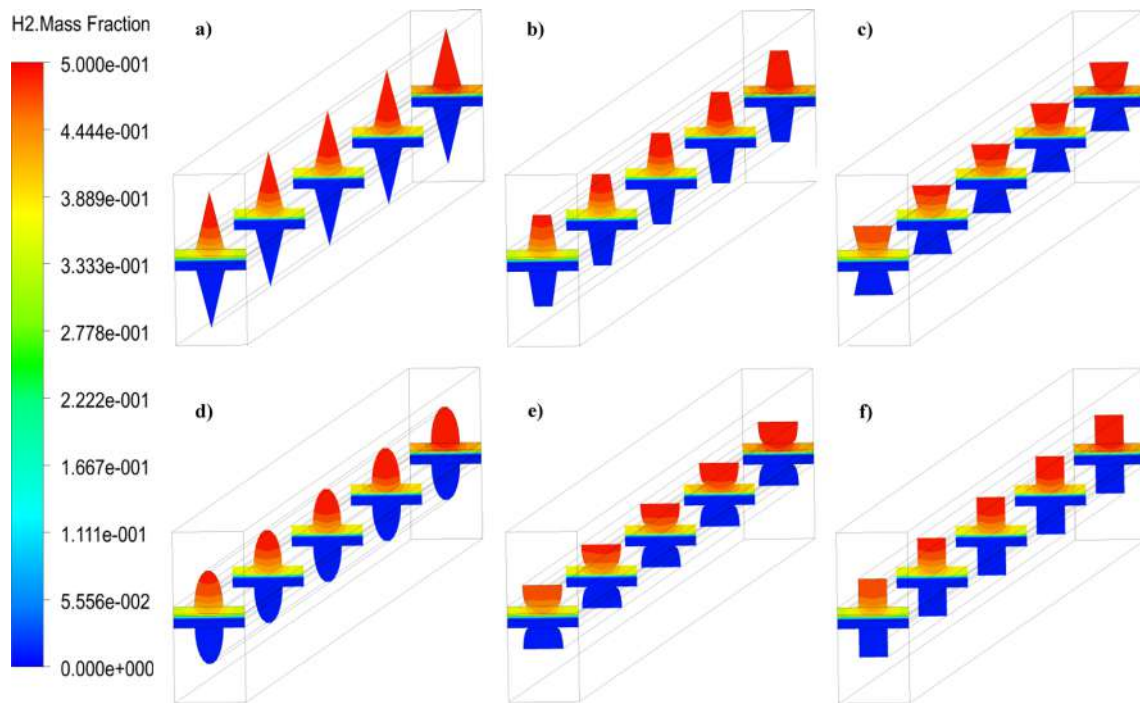


Fig. 10. H₂ mass fraction fields of the simple channel cross-section geometries. a) Trg, b) Trp, c) I-Trp, d) Hlp, e) I-Hlp, f) Rct.

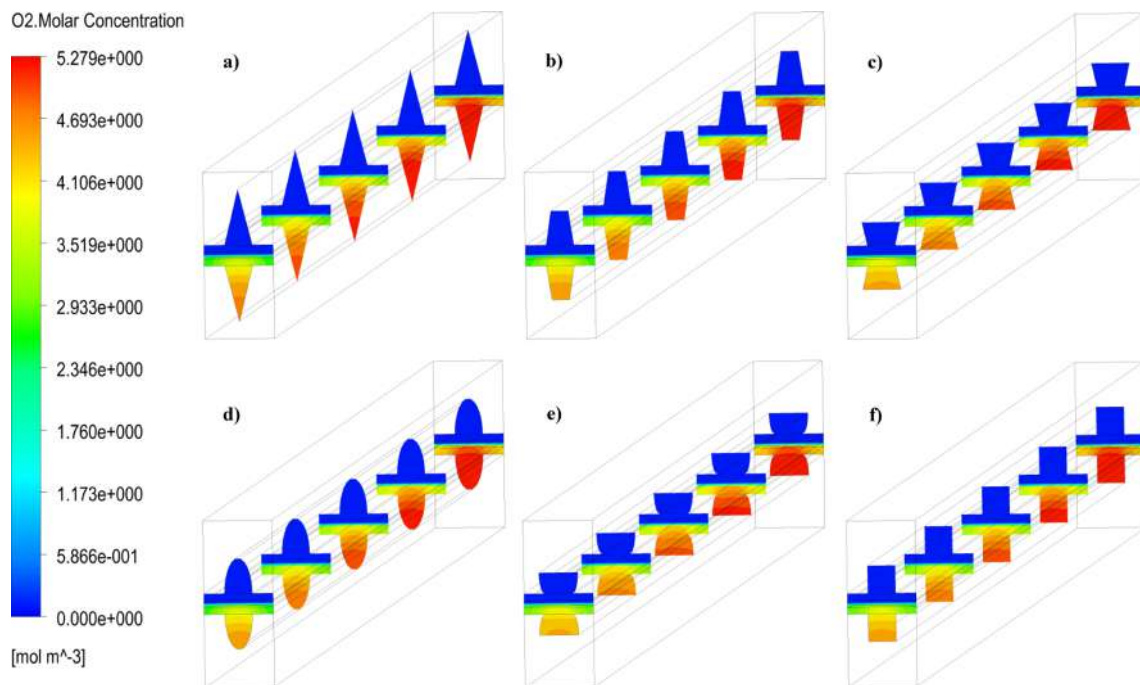


Fig. 11. O₂ molar concentration fields of the simple channel cross-section geometries. a) Trg, b) Trp, c) I-Trp, d) Hlp, e) I-Hlp, f) Rct.

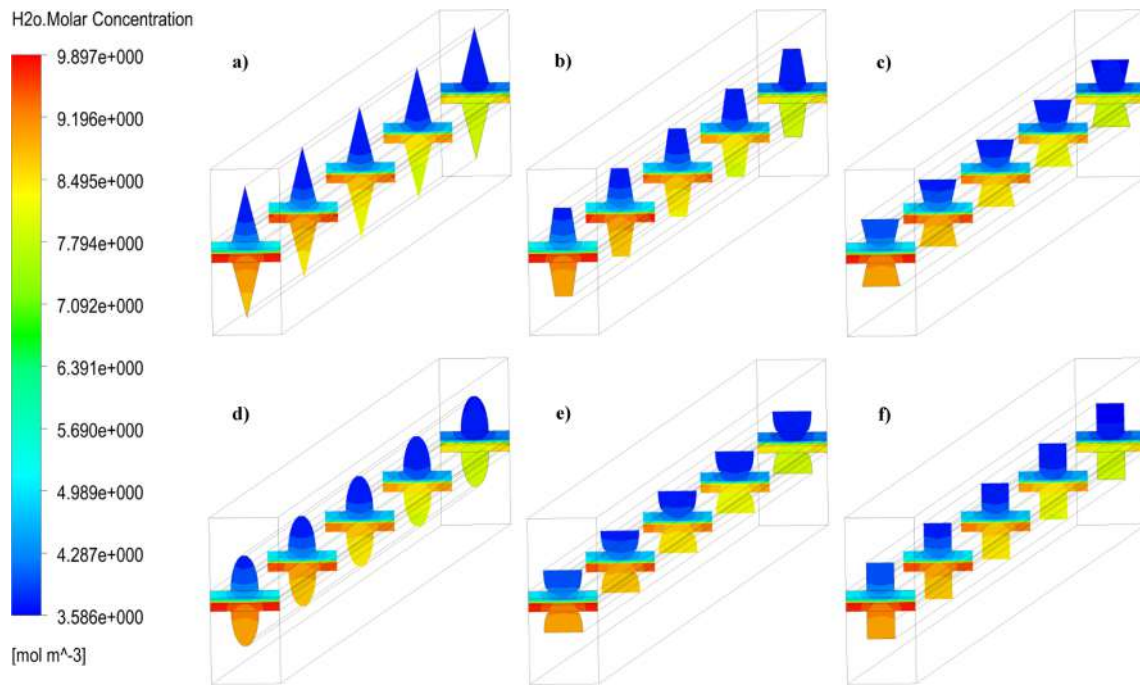


Fig. 12. H₂O molar concentration fields of the simple channel cross-section geometries. a) Trg, b) Trp, c) I-Trp, d) Hlp, e) I-Hlp, f) Rct.

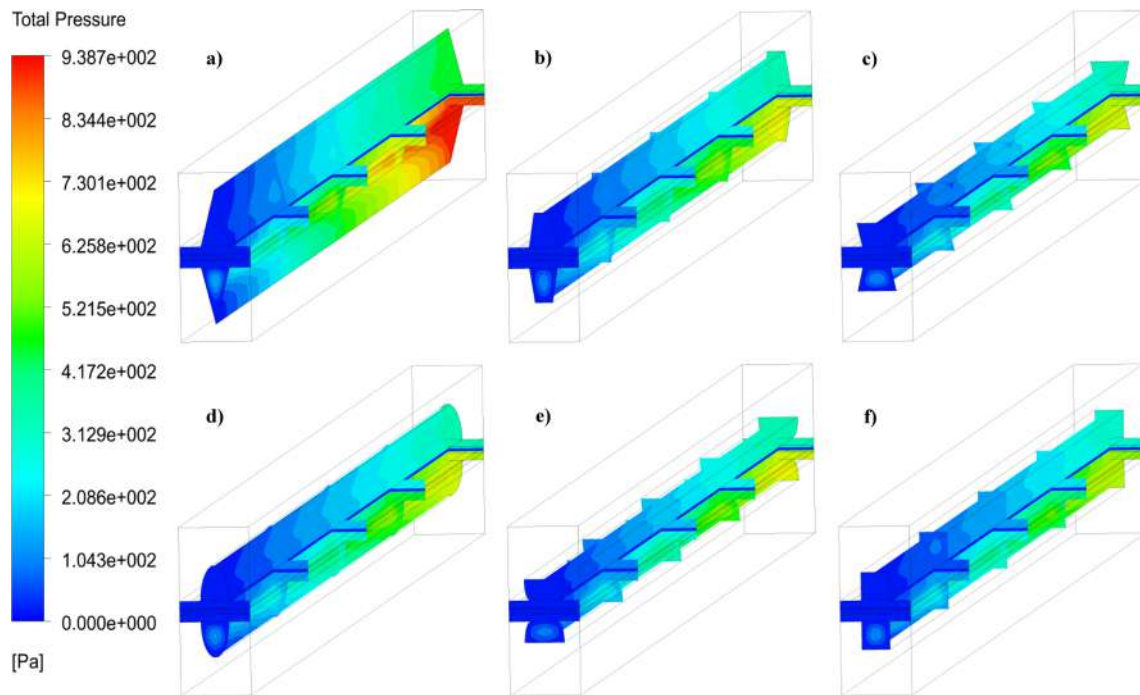


Fig. 13. Total pressure fields of the simple channel cross-section geometries. a) Trg, b) Trp, c) I-Trp, d) Hlp, e) I-Hlp, f) Rct.

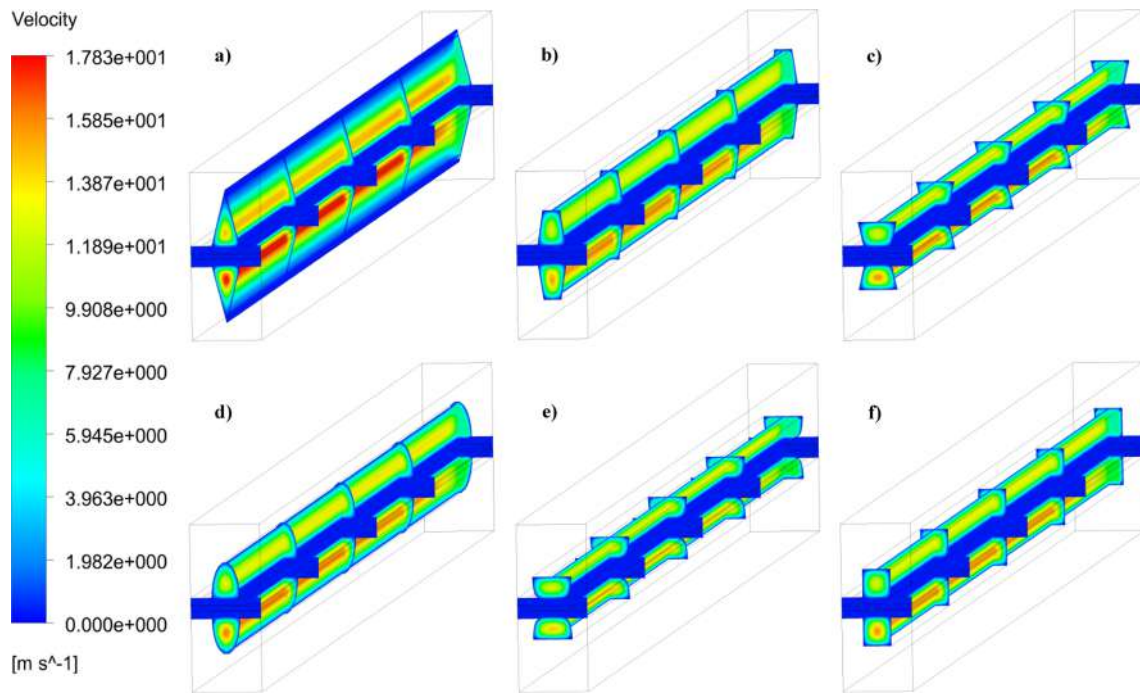


Fig. 14. Velocity fields of the simple channel cross-section geometries. a) Trg, b) Trp, c) I-Trp, d) Hlp, e) I-Hlp, f) Rct.

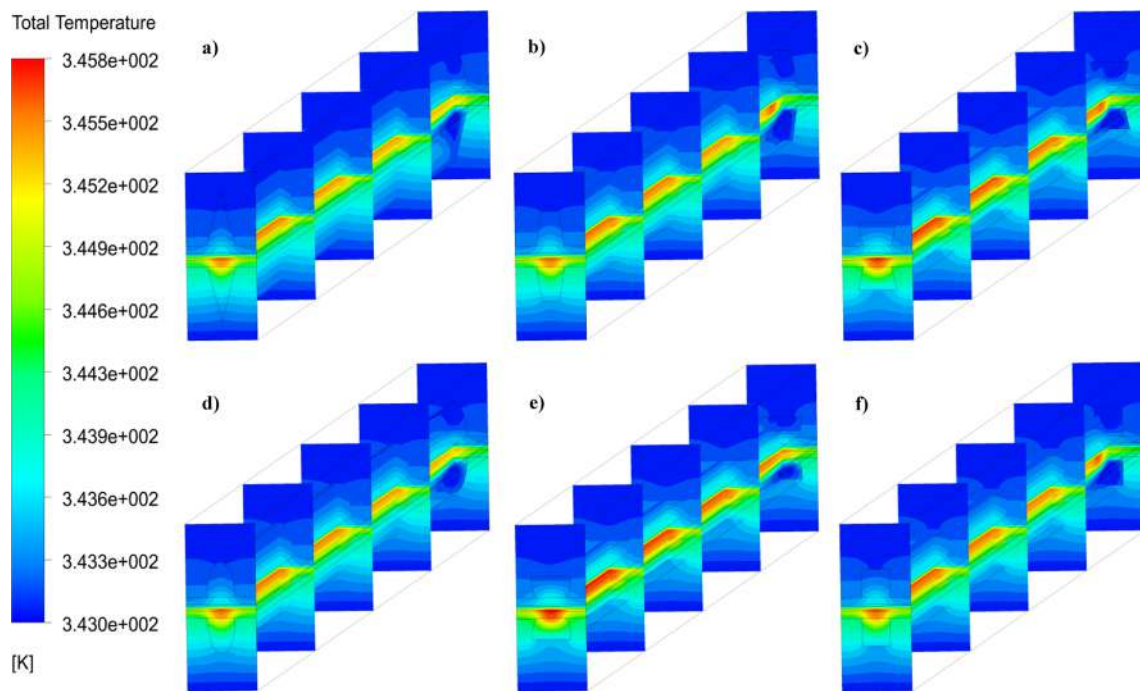


Fig. 15. Total temperature fields of the simple channel cross-section geometries. a) Trg, b) Trp, c) I-Trp, d) Hlp, e) I-Hlp, f) Rct.

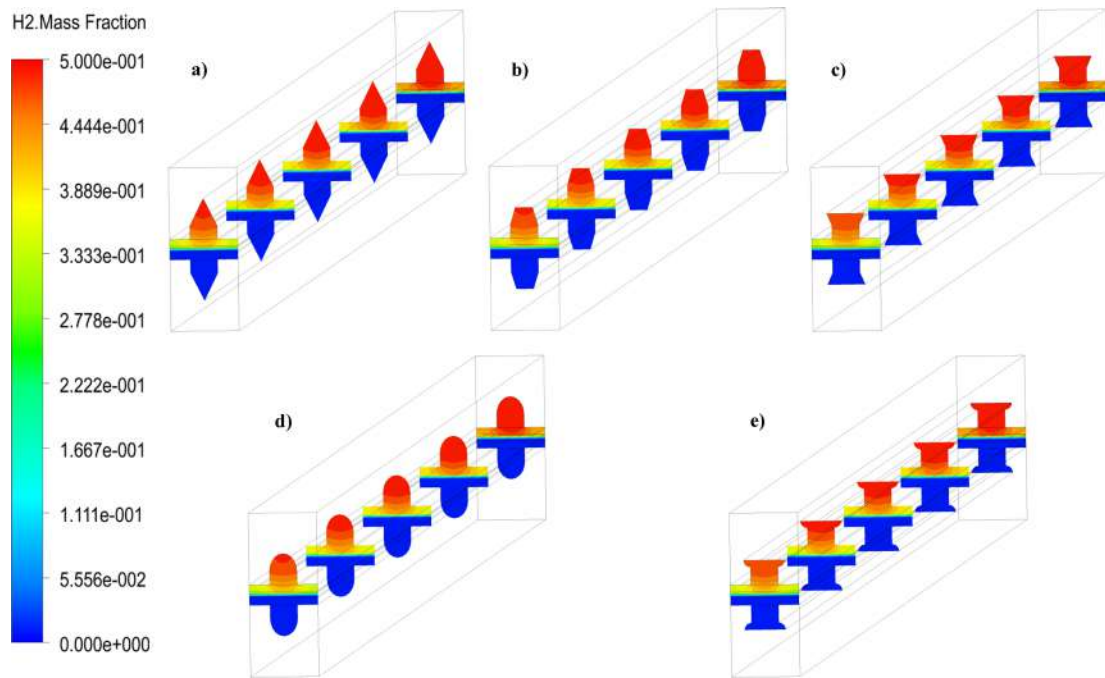


Fig. 16. H₂ mass fraction fields for rectangular base CCS geometries. a) Rct-Trg, b) Rct-Trp, c) Rct-I-Trp, d) Rct-Hlp, e) Rct-I-Hlp.

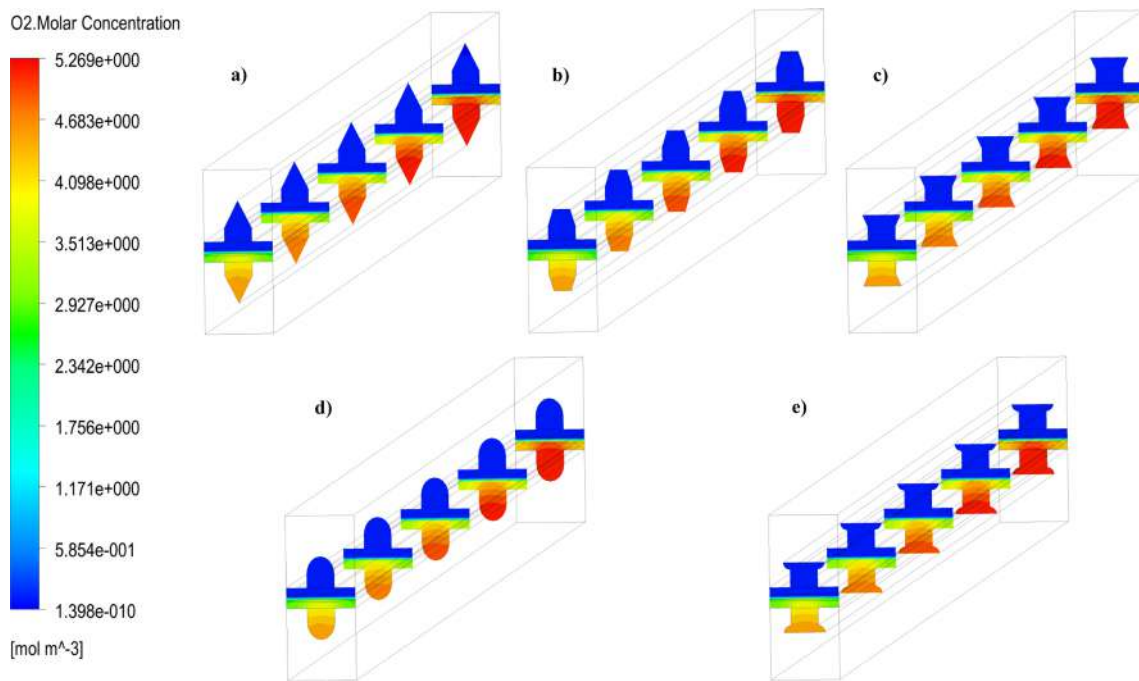


Fig. 17. O₂ molar concentration fields for rectangular base CCS geometries. a) Rct-Trg, b) Rct-Trp, c) Rct-I-Trp, d) Rct-Hlp, e) Rct-I-Hlp.

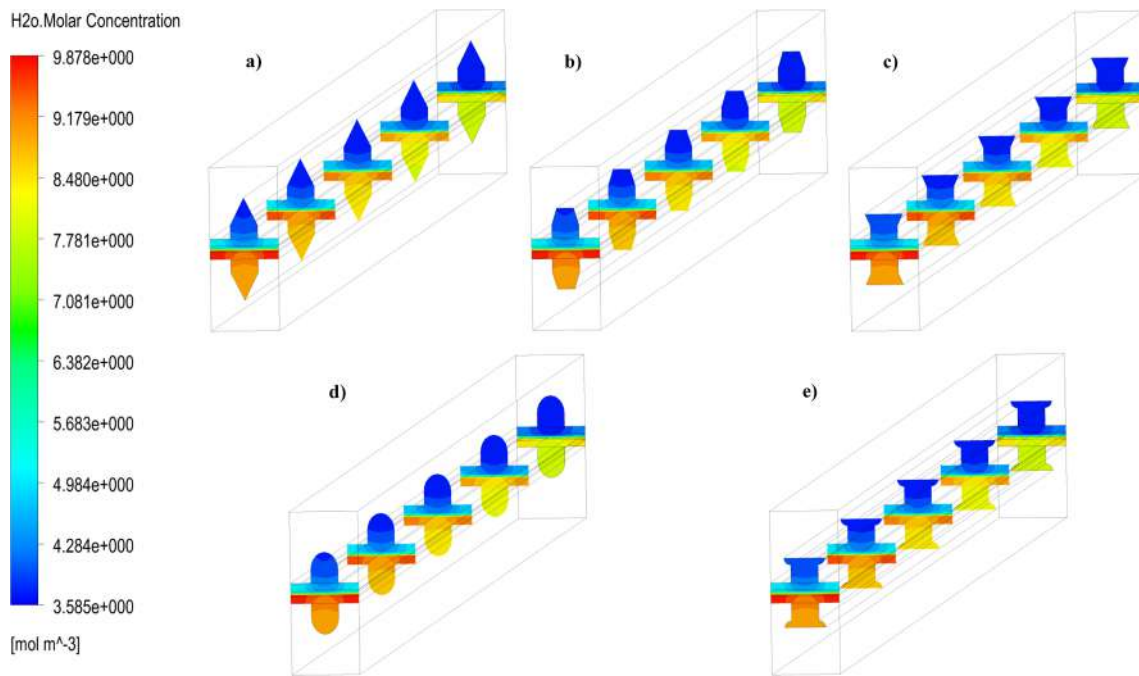


Fig. 18. H₂O molar concentration fields for rectangular base CCS geometries. a) Rct-Trg, b) Rct-Trp, c) Rct-I-Trp, d) Rct-Hlp, e) Rct-I-Hlp.

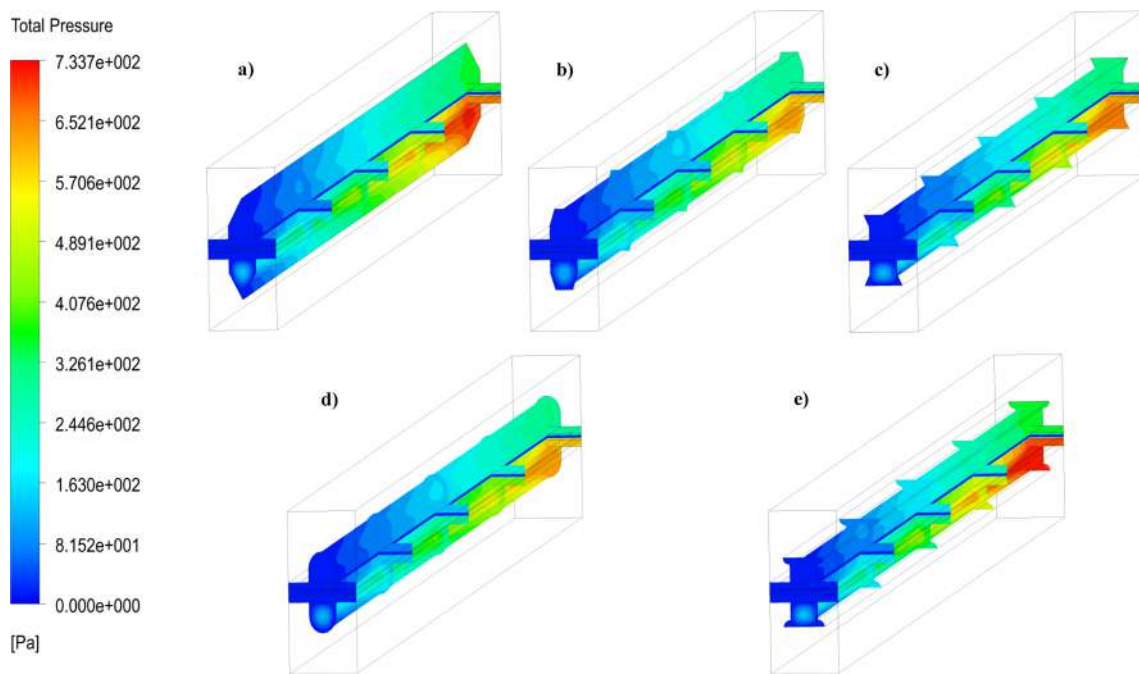


Fig. 19. Total pressure fields for rectangular base CCS geometries. a) Rct-Trg, b) Rct-Trp, c) Rct-I-Trp, d) Rct-Hlp, e) Rct-I-Hlp.

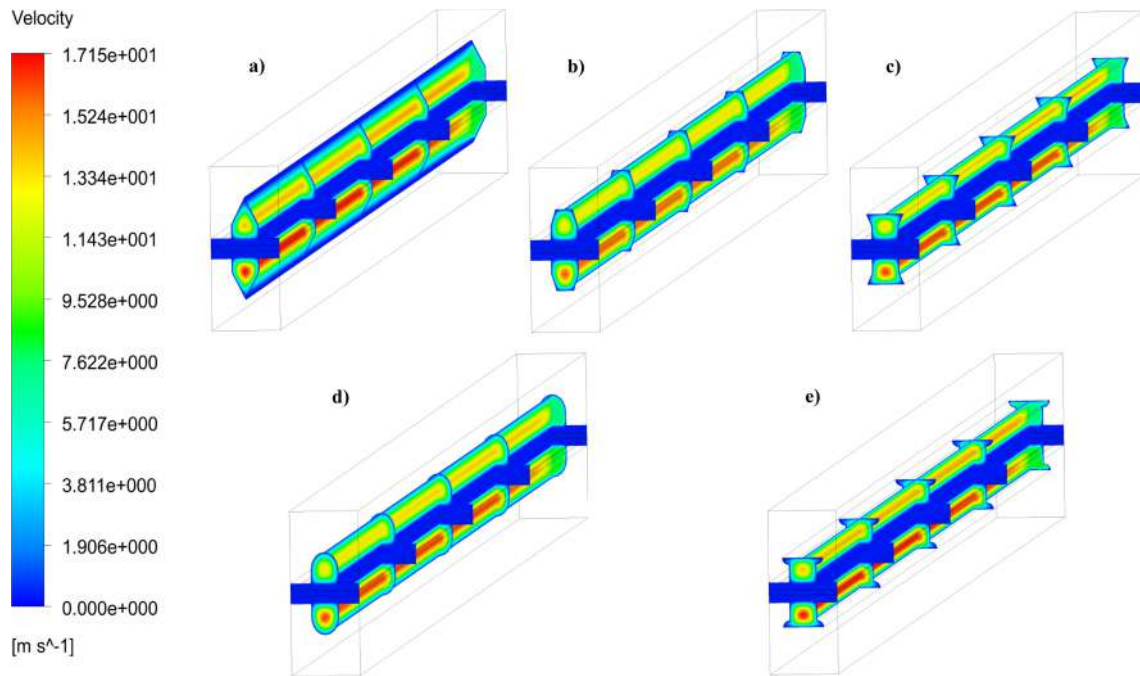


Fig. 20. Velocity fields for rectangular base CCS geometries. a) Rct-Trg, b) Rct-Trp, c) Rct-I-Trp, d) Rct-Hlp, e) Rct-I-Hlp.

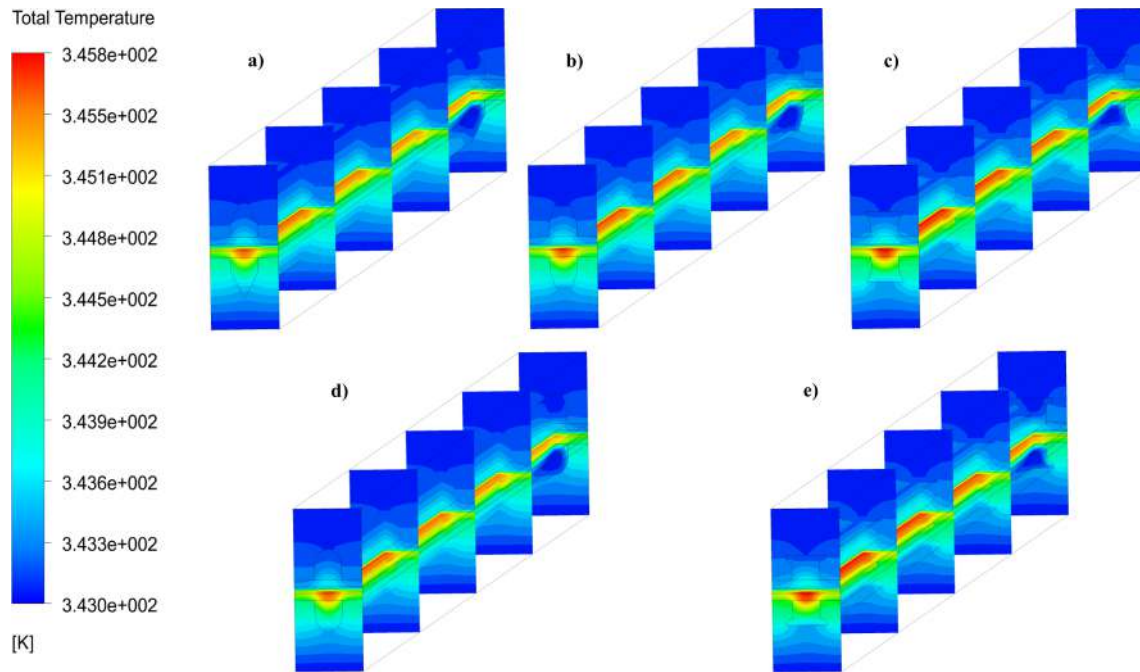


Fig. 21. Total temperature fields for rectangular base CCS geometries. a) Rct-Trg, b) Rct-Trp, c) Rct-I-Trp, d) Rct-Hlp, e) Rct-I-Hlp.

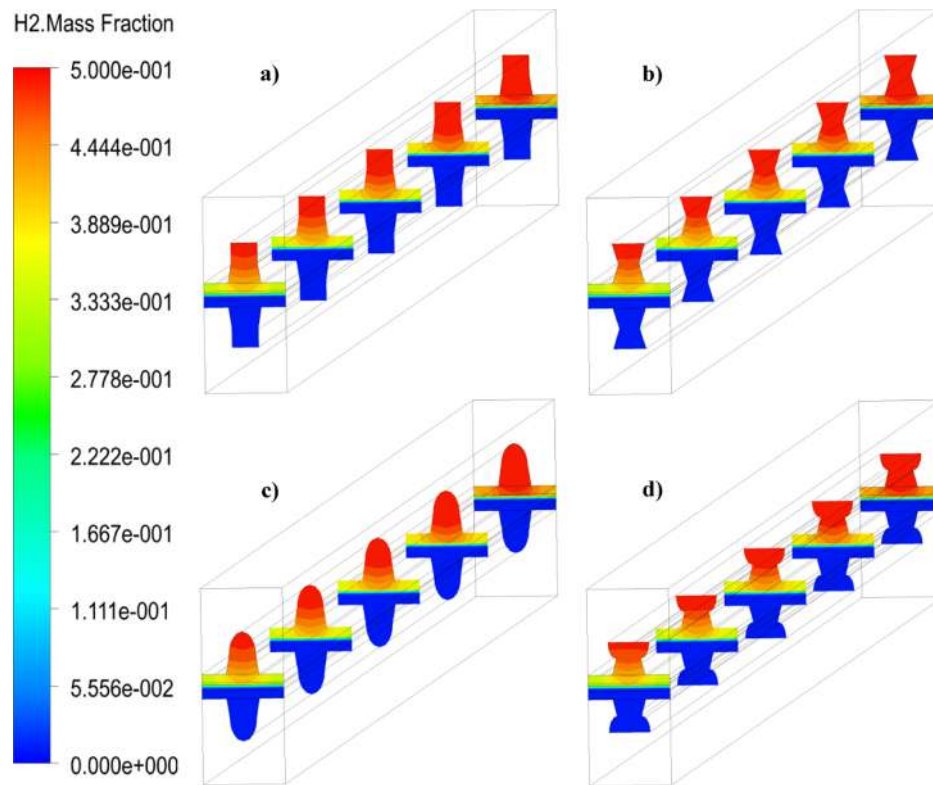


Fig. 22. H₂ mass fraction fields for trapezoidal base CCS geometries. a) Trp-Rct, b) Trp-I-Trp, c) Trp-Hlp, d) Trp-I-Hlp.

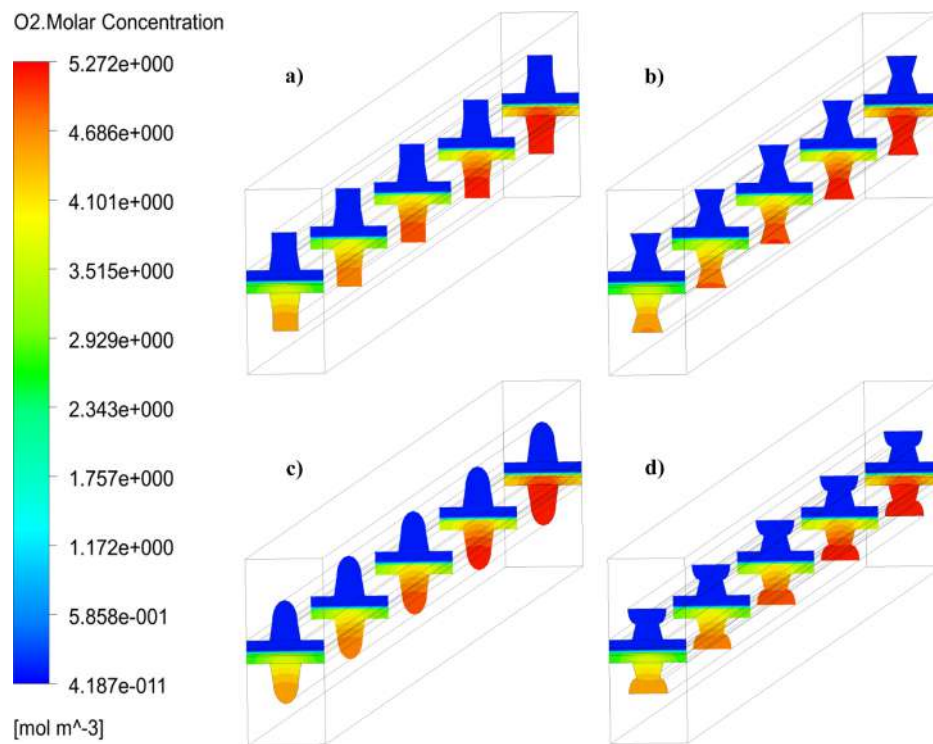


Fig. 23. O₂ molar concentration fields for trapezoidal base CCS geometries. a) Trp-Rct, b) Trp-I-Trp, c) Trp-Hlp, d) Trp-I-Hlp.

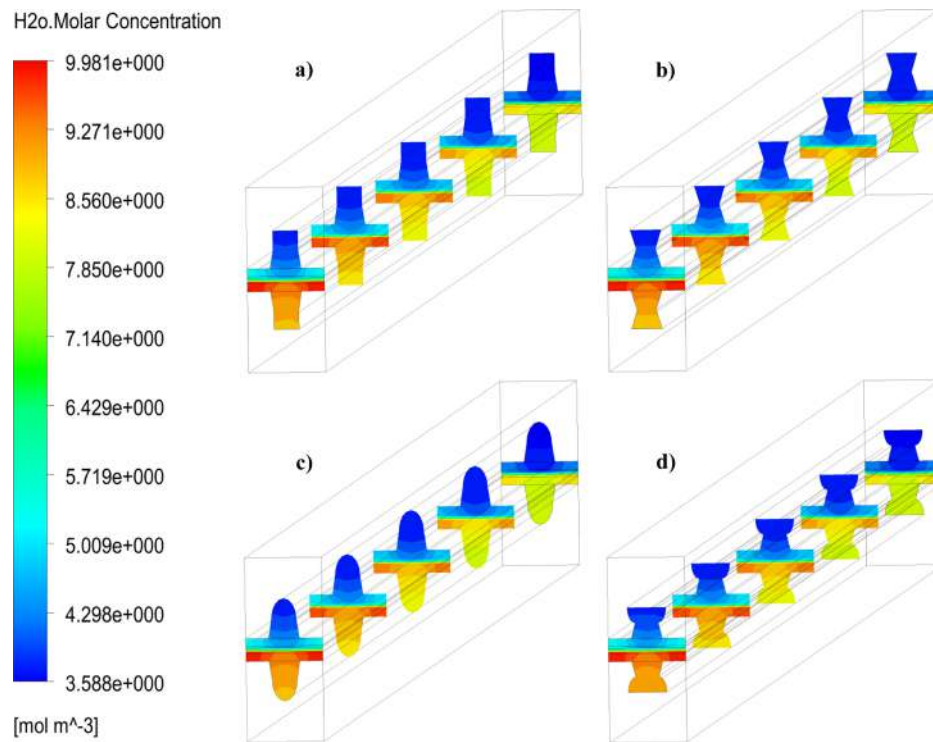


Fig. 24. H₂O molar concentration fields for trapezoidal base CCS geometries. a) Trp-Rct, b) Trp-I-Trp, c) Trp-Hlp, d) Trp-I-Hlp.

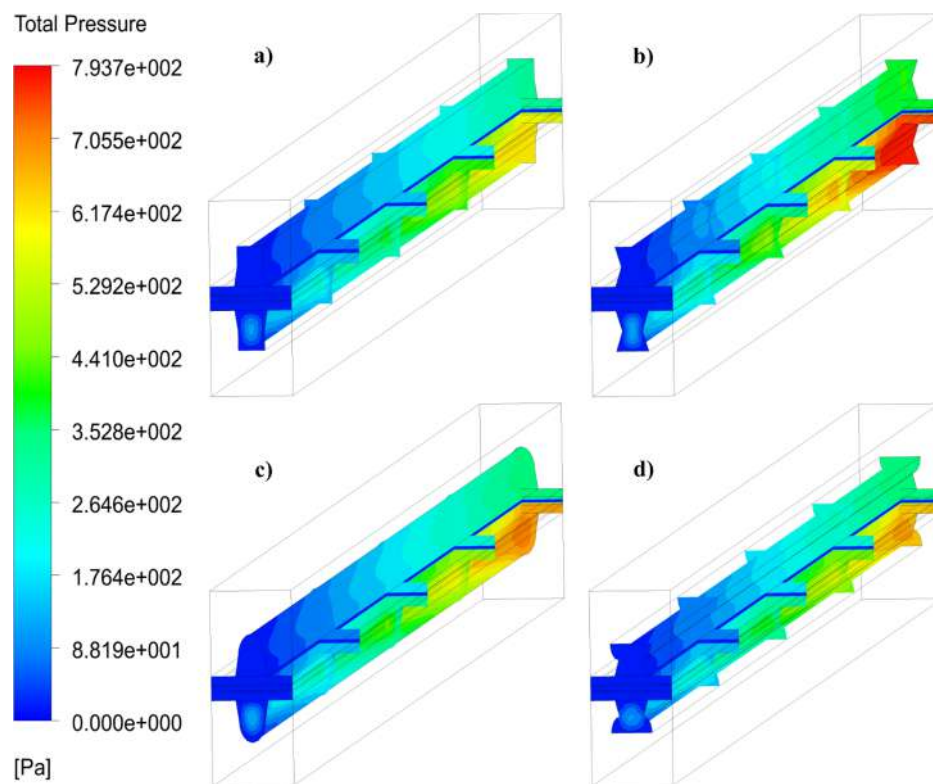


Fig. 25. Total pressure fields for trapezoidal base CCS geometries. a) Trp-Rct, b) Trp-I-Trp, c) Trp-Hlp, d) Trp-I-Hlp.

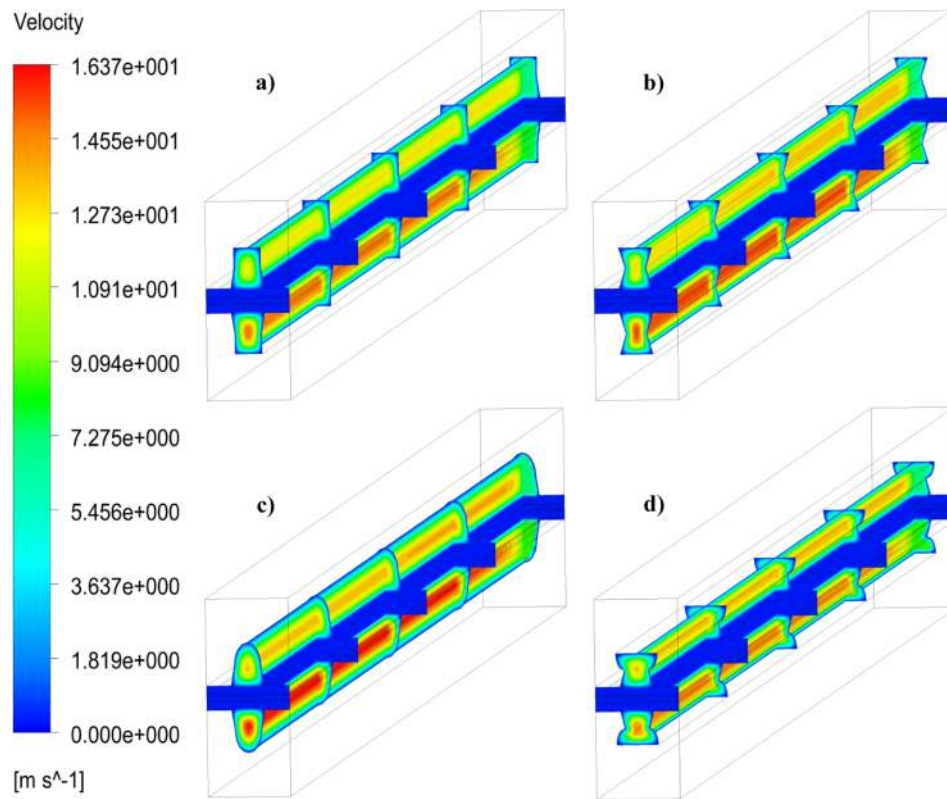


Fig. 26. Velocity fields for trapezoidal base CCS geometries. a) Trp-Rct, b) Trp-I-Trp, c) Trp-Hlp, d) Trp-I-Hlp.

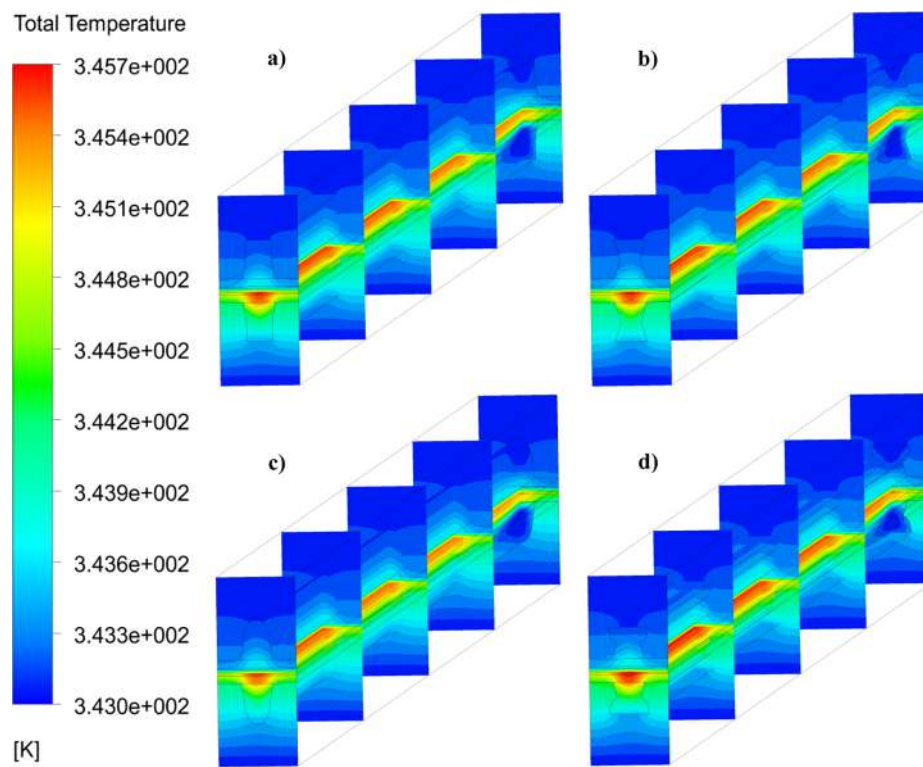


Fig. 27. Total temperature fields for trapezoidal base CCS geometries. a) Trp-Rct, b) Trp-I-Trp, c) Trp-Hlp, d) Trp-I-Hlp.

Appendix 2

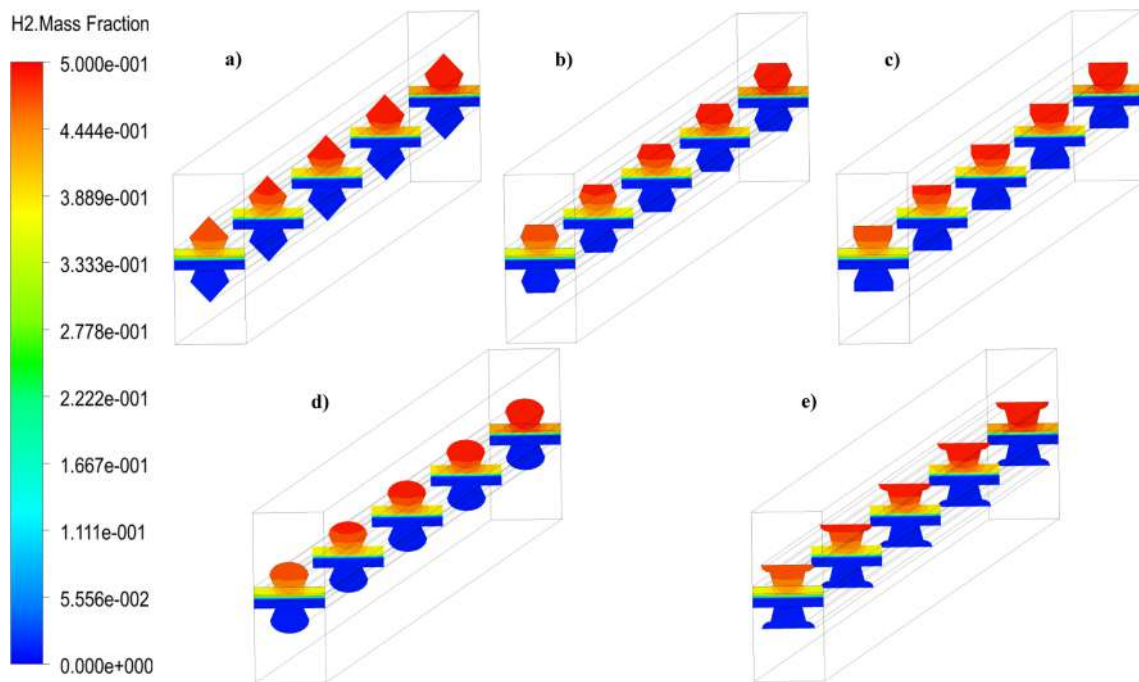


Fig. 28. H₂ mass fraction fields for Inverted-trapezoidal base CCS geometries. a) I-Trp-Trg, b) I-Trp-Trp, c) I-Trp-Rct, d) I-Trp-Hlp, e) I-Trp-I-Hlp.

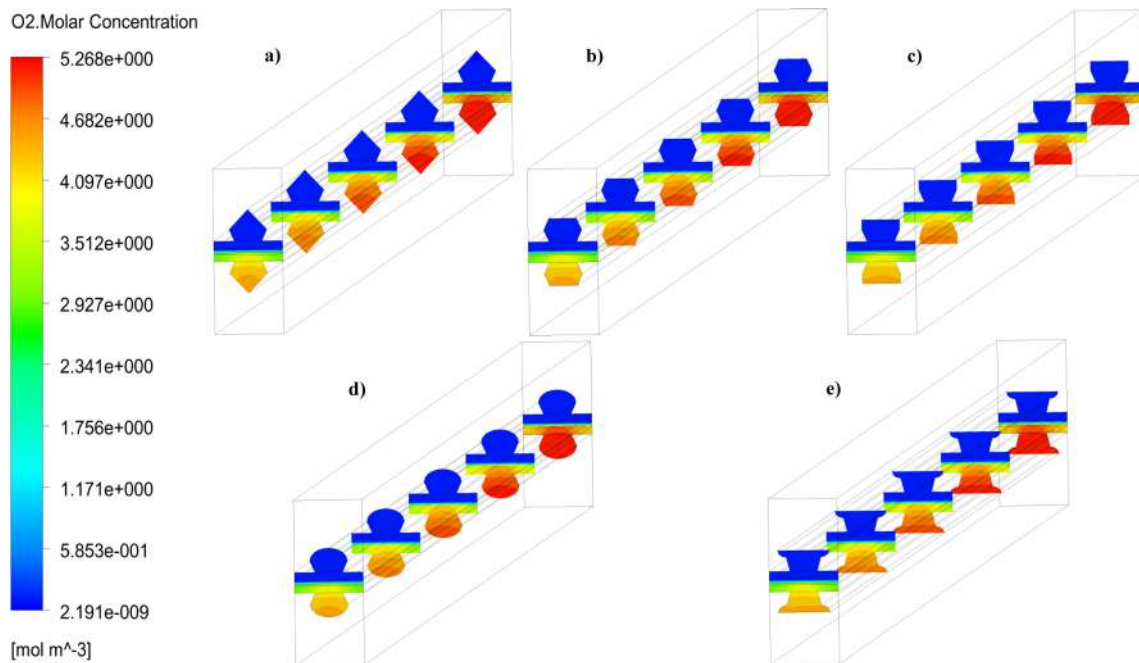


Fig. 29. O₂ molar concentration fields for Inverted-trapezoidal base CCS geometries. a) I-Trp-Trg, b) I-Trp-Trp, c) I-Trp-Rct, d) I-Trp-Hlp, e) I-Trp-I-Hlp.

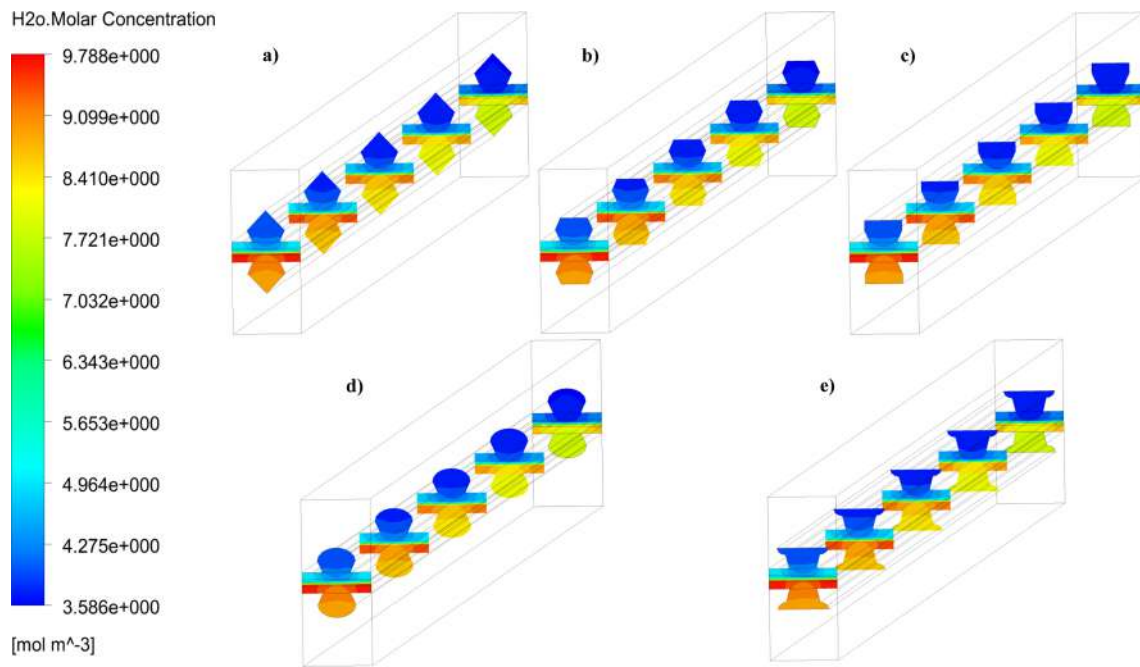


Fig. 30. H₂O molar concentration fields for Inverted-trapezoidal base CCS geometries. a) I-Trp-Trg, b) I-Trp-Trp, c) I-Trp-Rct, d) I-Trp-Hlp, e) I-Trp-I-Hlp.

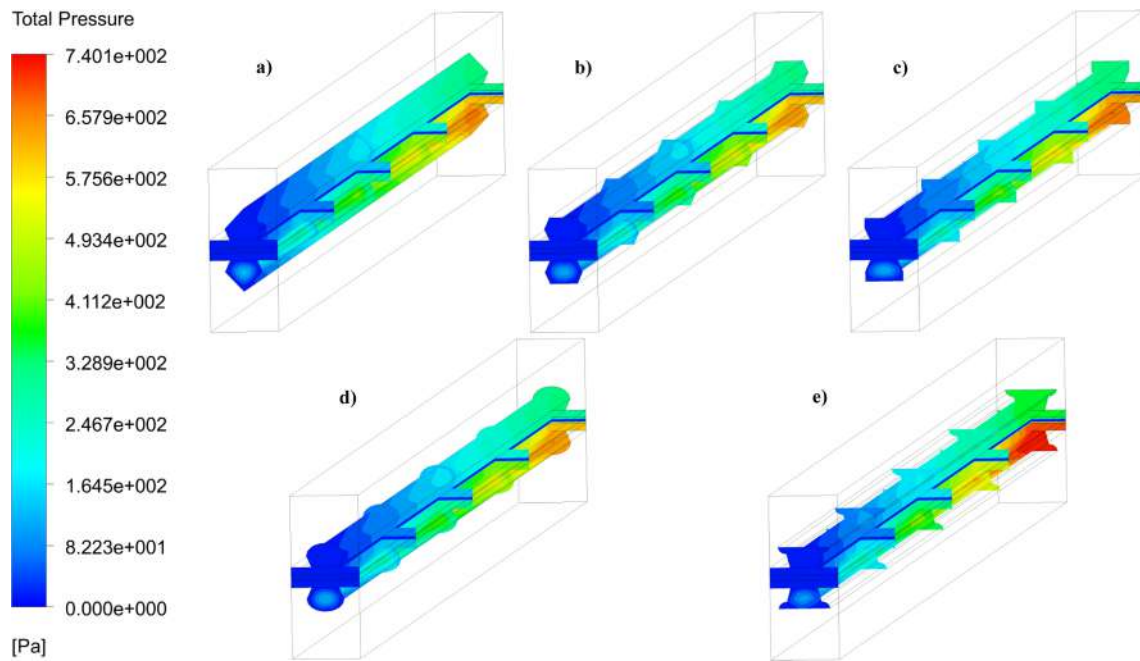


Fig. 31. Total pressure fields for Inverted-trapezoidal base CCS geometries. a) I-Trp-Trg, b) I-Trp-Trp, c) I-Trp-Rct, d) I-Trp-Hlp, e) I-Trp-I-Hlp.

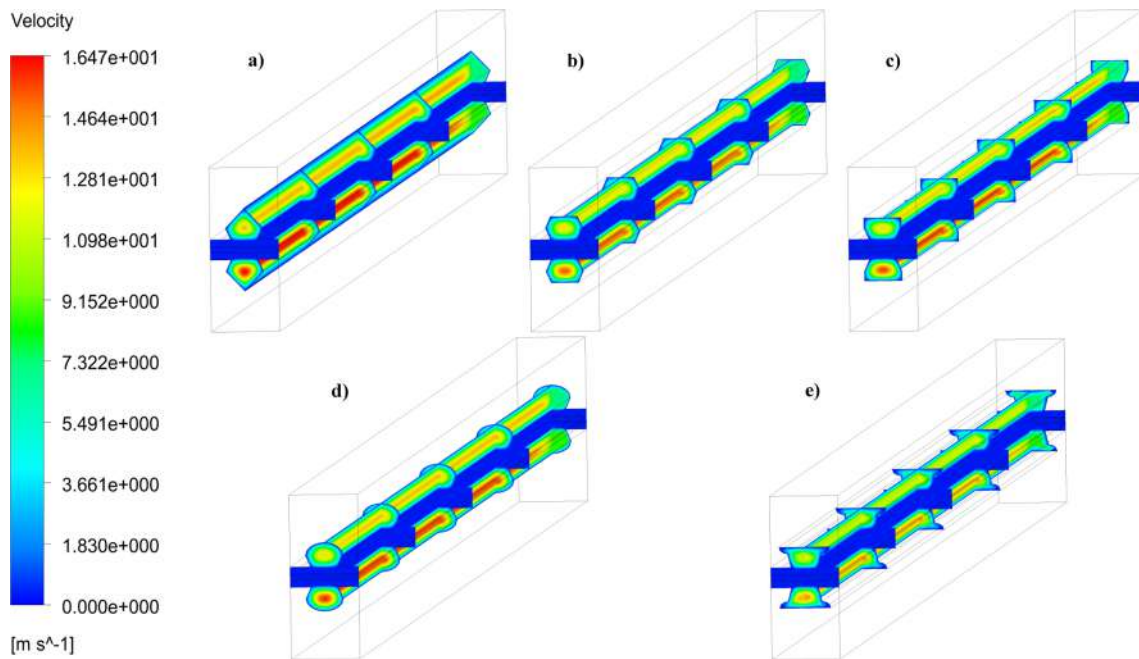


Fig. 32. Velocity fields for Inverted-trapezoidal base CCS geometries. a) I-Trp-Trg, b) I-Trp-Trp, c) I-Trp-Rct, d) I-Trp-Hlp, e) I-Trp-I-Hlp.

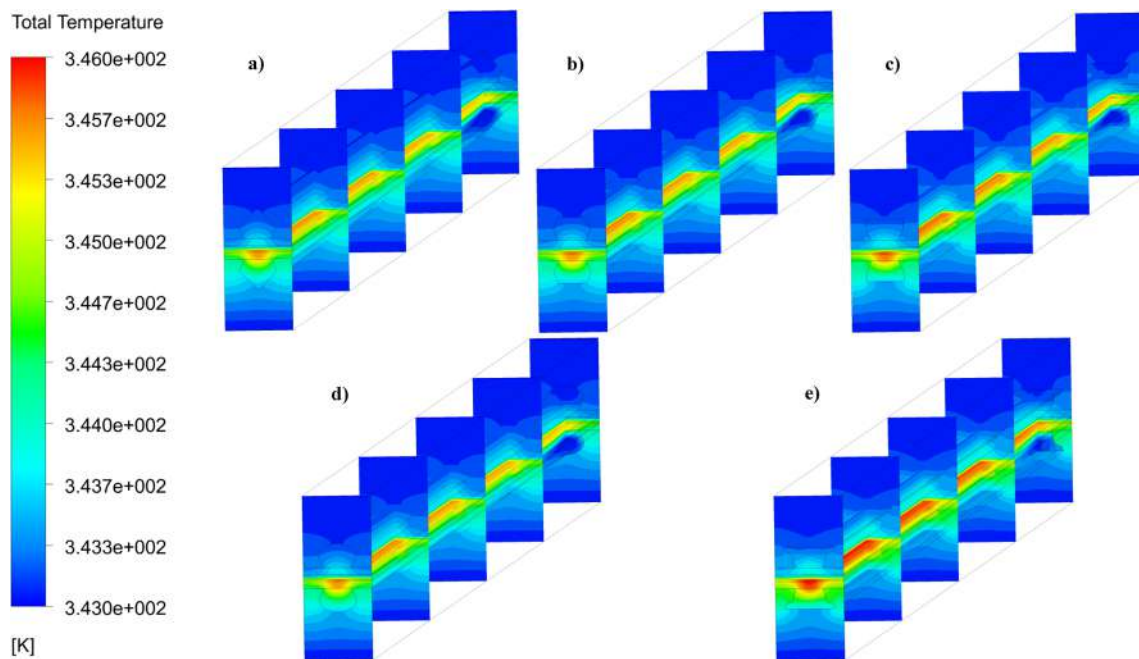


Fig. 33. Total temperature fields for Inverted-trapezoidal base CCS geometries. a) I-Trp-Trg, b) I-Trp-Trp, c) I-Trp-Rct, d) I-Trp-Hlp, e) I-Trp-I-Hlp.

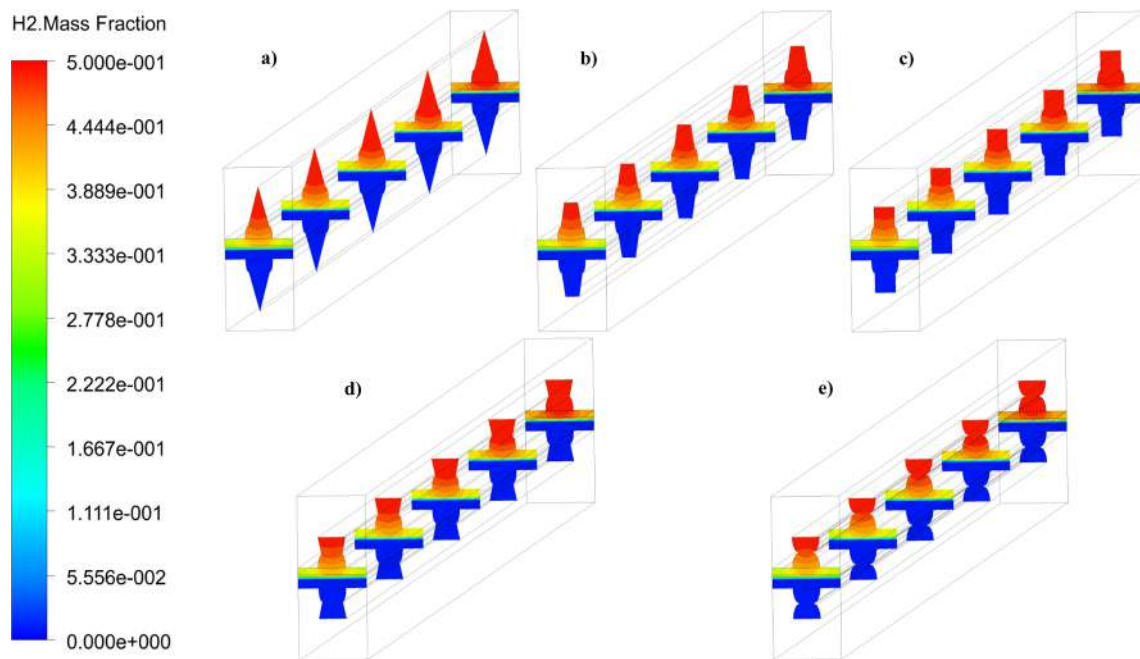


Fig. 34. H₂ mass fraction fields for elliptical base CCS geometries. a) Hlp-Trg, b) Hlp-Trp, c) Hlp-Rct, d) Hlp-I-Trp, e) Hlp-I-Hlp.

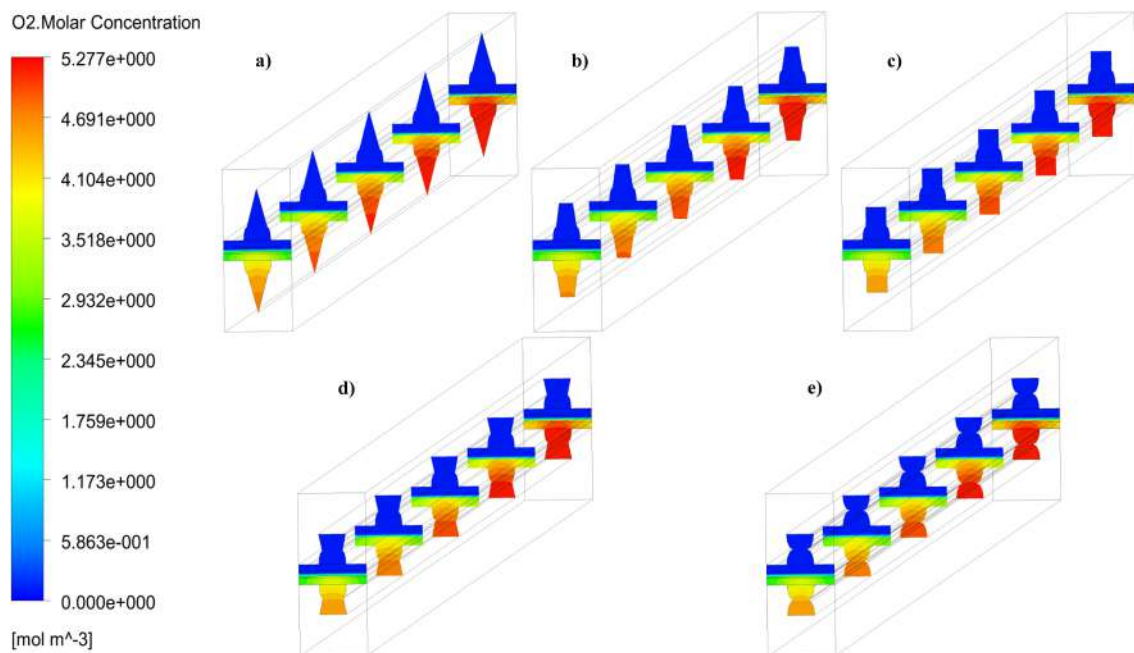


Fig. 35. O₂ molar concentration fields for elliptical base CCS geometries. a) Hlp-Trg, b) Hlp-Trp, c) Hlp-Rct, d) Hlp-I-Trp, e) Hlp-I-Hlp.

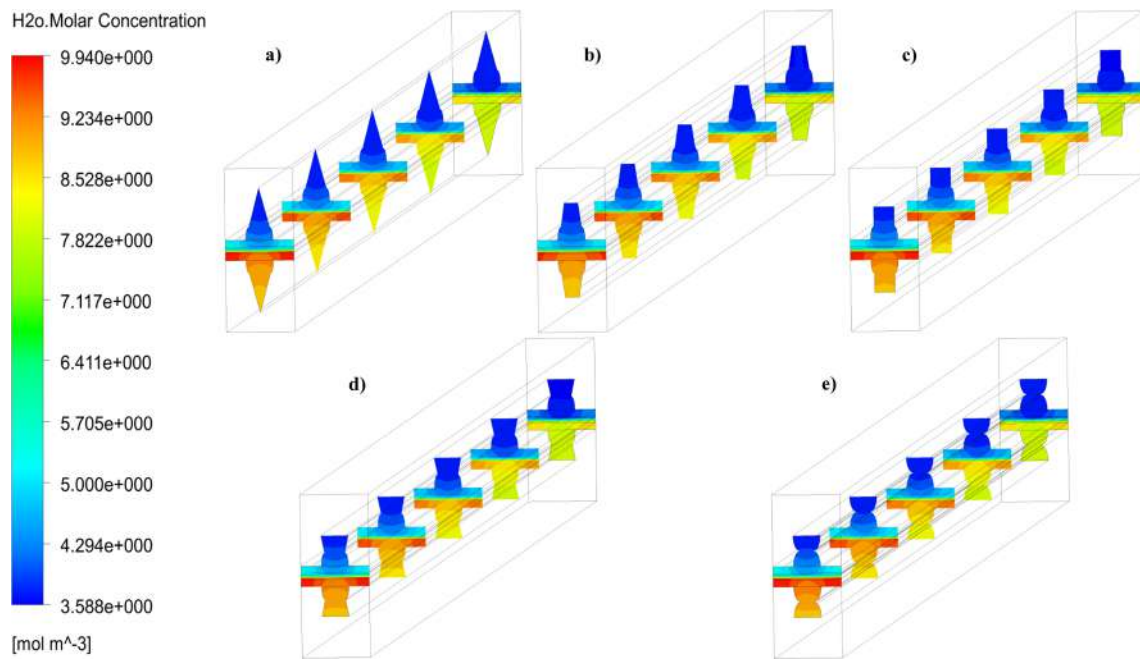


Fig. 36. H₂O molar concentration fields for elliptical base CCS geometries. a) Hlp-Trg, b) Hlp-Trp, c) Hlp-Rct, d) Hlp-I-Trp, e) Hlp-I-Hlp.

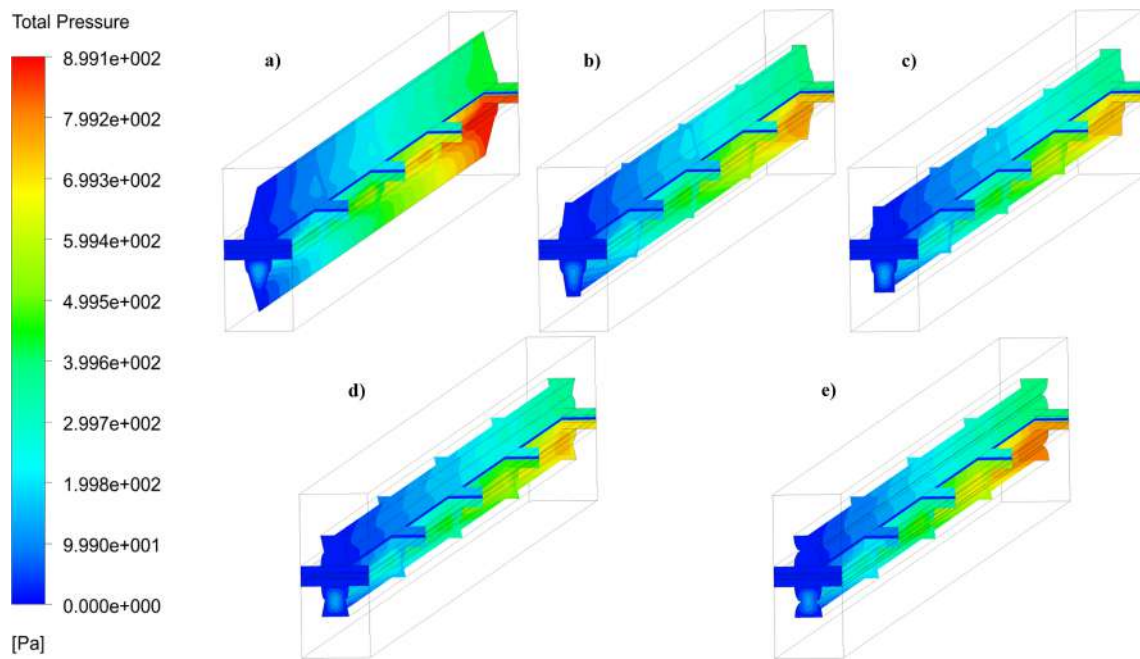


Fig. 37. Total pressure fields for elliptical base CCS geometries. a) Hlp-Trg, b) Hlp-Trp, c) Hlp-Rct, d) Hlp-I-Trp, e) Hlp-I-Hlp.

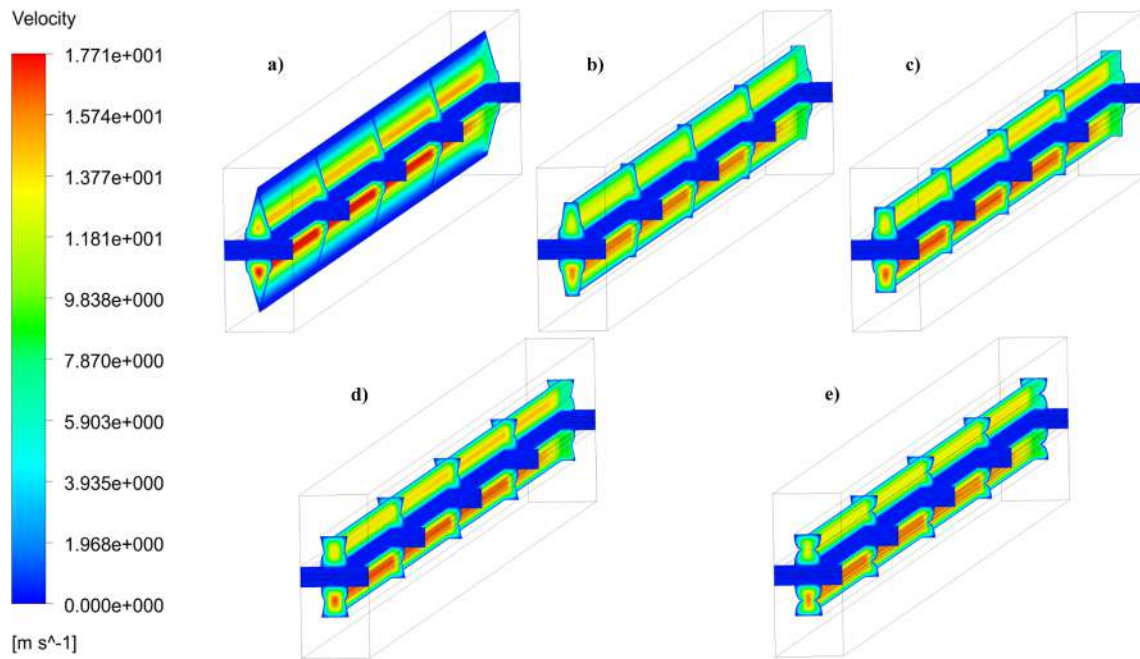


Fig. 38. Velocity fields for elliptical base CCS geometries. a) Hlp-Trg, b) Hlp-Trp, c) Hlp-Rct, d) Hlp-I-Trp, e) Hlp-I-Hlp.

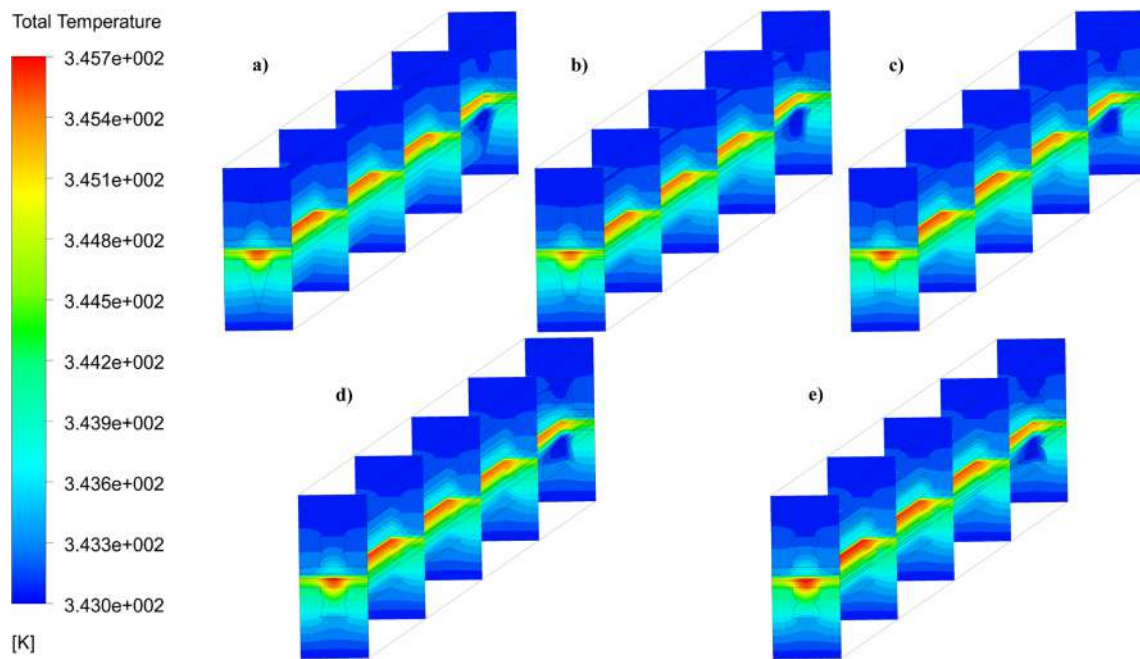


Fig. 39. Total temperature fields for elliptical base CCS geometries. a) Hlp-Trg, b) Hlp-Trp, c) Hlp-Rct, d) Hlp-I-Trp, e) Hlp-I-Hlp.

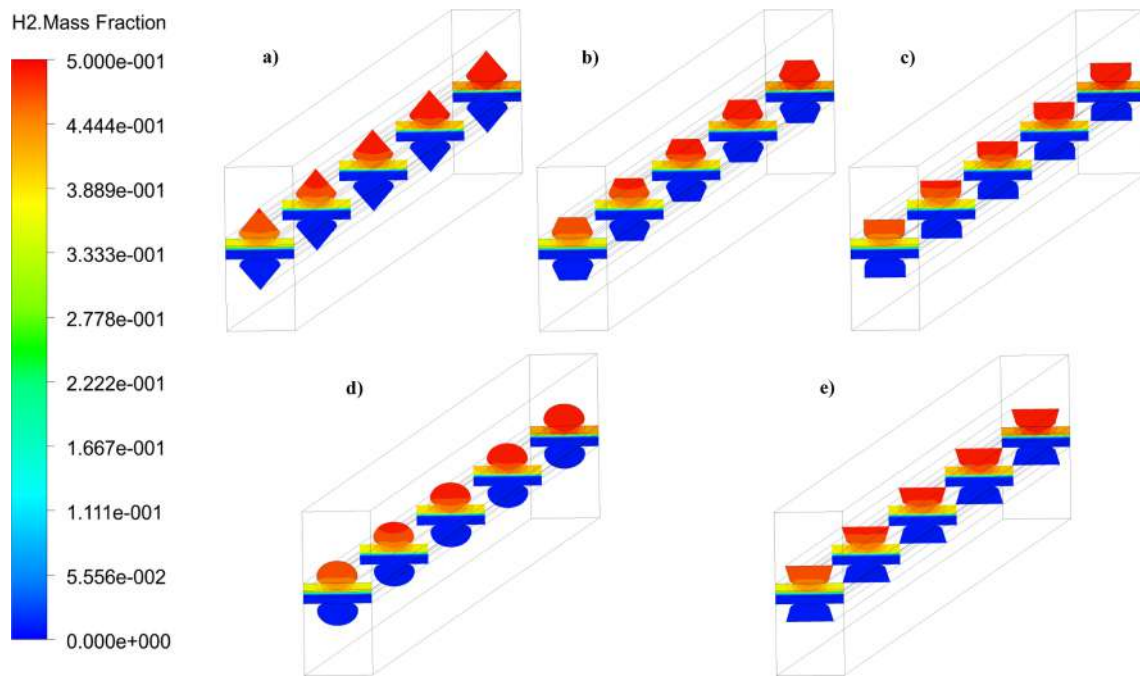


Fig. 40. H₂ mass fraction fields for inverted-elliptical base CCS geometries. a) I-Hlp-Trg, b) I-Hlp-Trp, c) I-Hlp-Rct, d) IHlp-I-Hlp, e) I-Hlp-I-Trp.

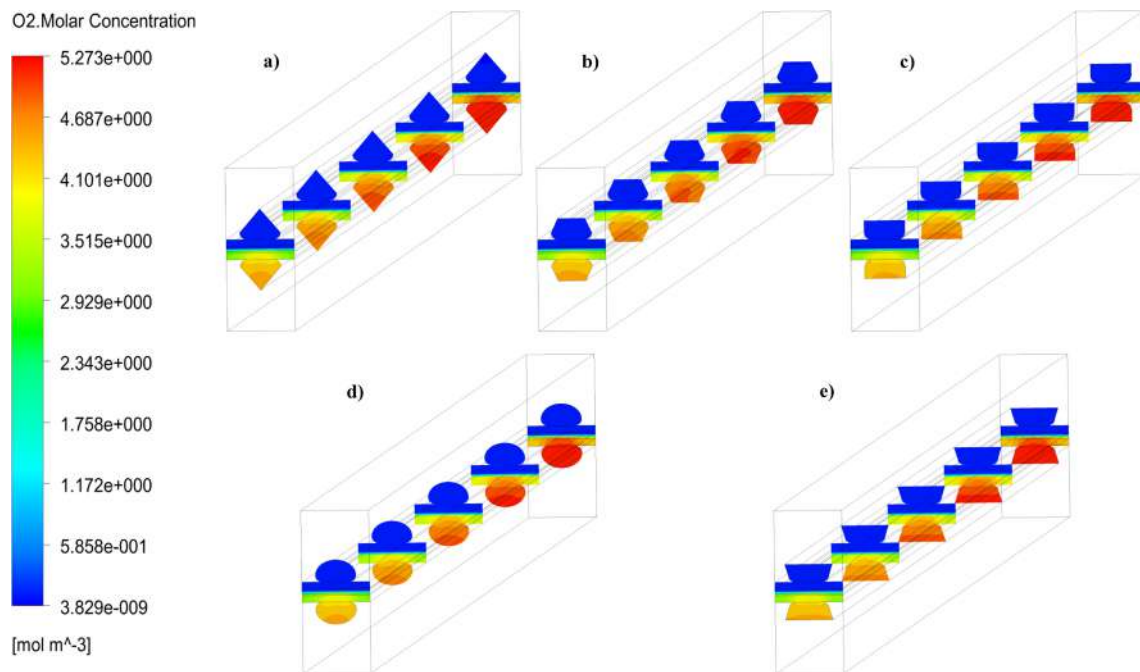


Fig. 41. O₂ molar concentration fields for inverted-elliptical base CCS geometries. a) I-Hlp-Trg, b) I-Hlp-Trp, c) I-Hlp-Rct, d) IHlp-I-Hlp, e) I-Hlp-I-Trp.

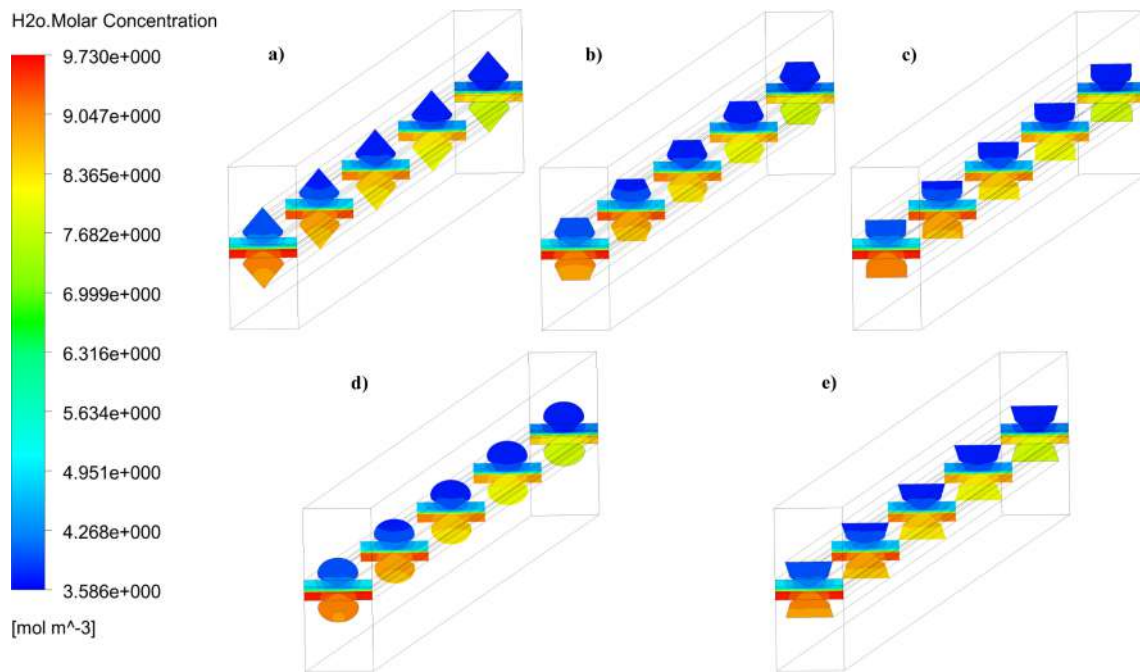


Fig. 42. H₂O molar concentration fields for inverted-elliptical base CCS geometries. a) I-Hlp-Trg, b) I-Hlp-Trp, c) I-Hlp-Rct, d) IHlp-I-Hlp, e) I-Hlp-I-Trp.

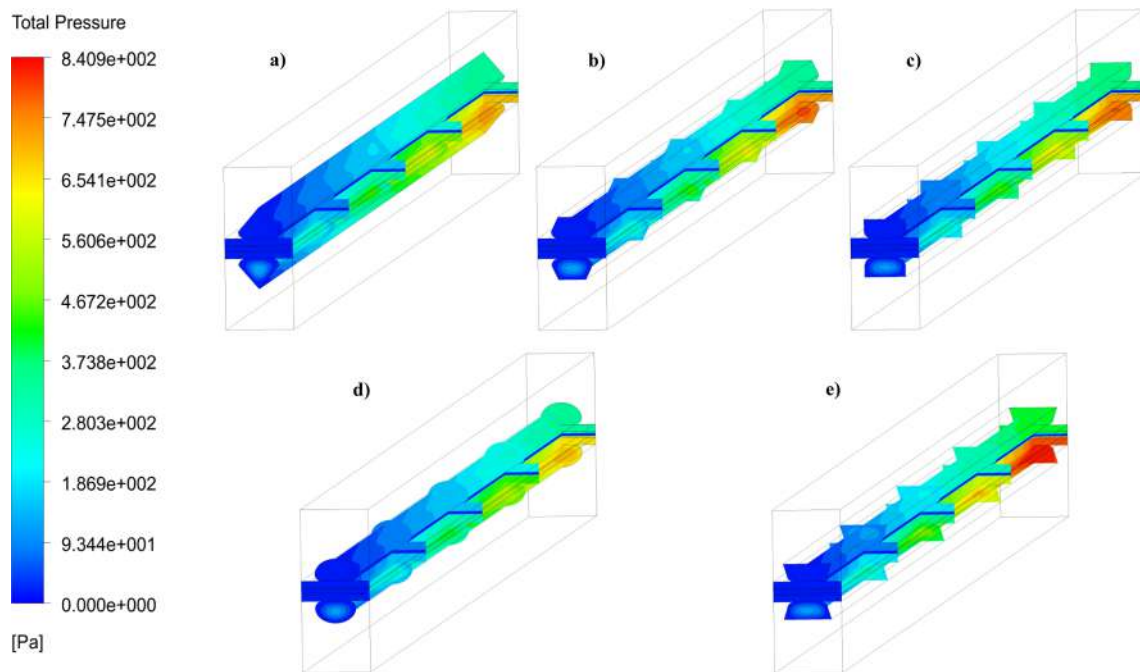


Fig. 43. Total pressure fields for inverted-elliptical base CCS geometries. a) I-Hlp-Trg, b) I-Hlp-Trp, c) I-Hlp-Rct, d) IHlp-I-Hlp, e) I-Hlp-I-Trp.

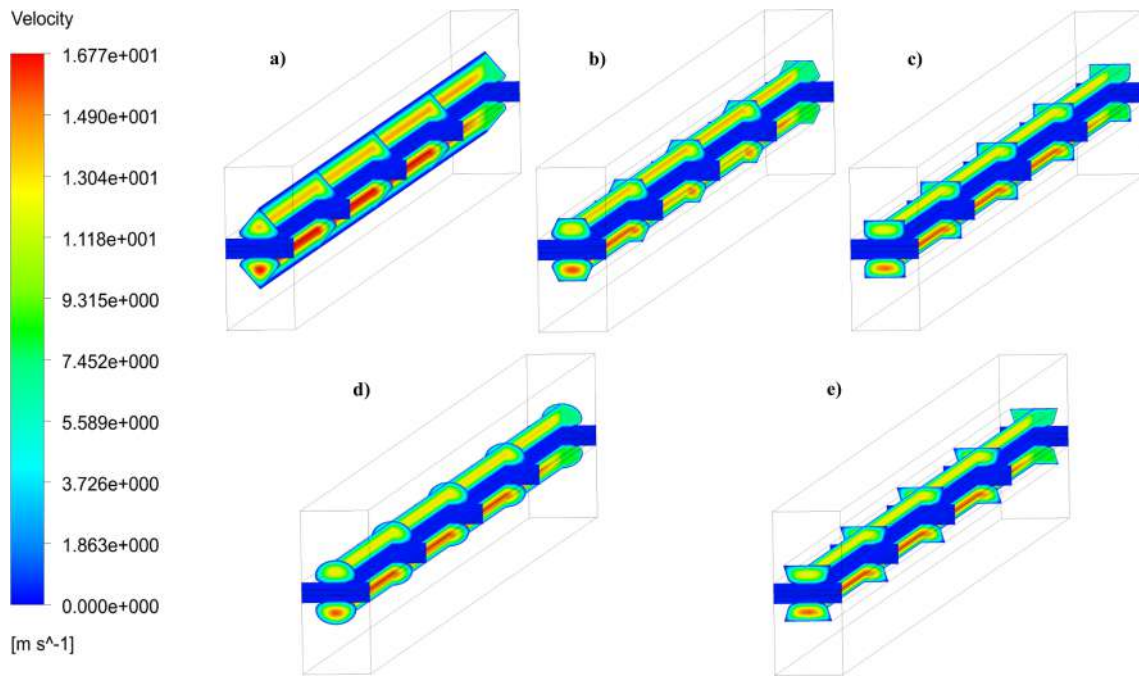


Fig. 44. Velocity fields for inverted-elliptical base CCS geometries. a) I-Hlp-Trg, b) I-Hlp-Trp, c) I-Hlp-Rct, d) IHlp-I-Hlp, e) I-Hlp-I-Trp.

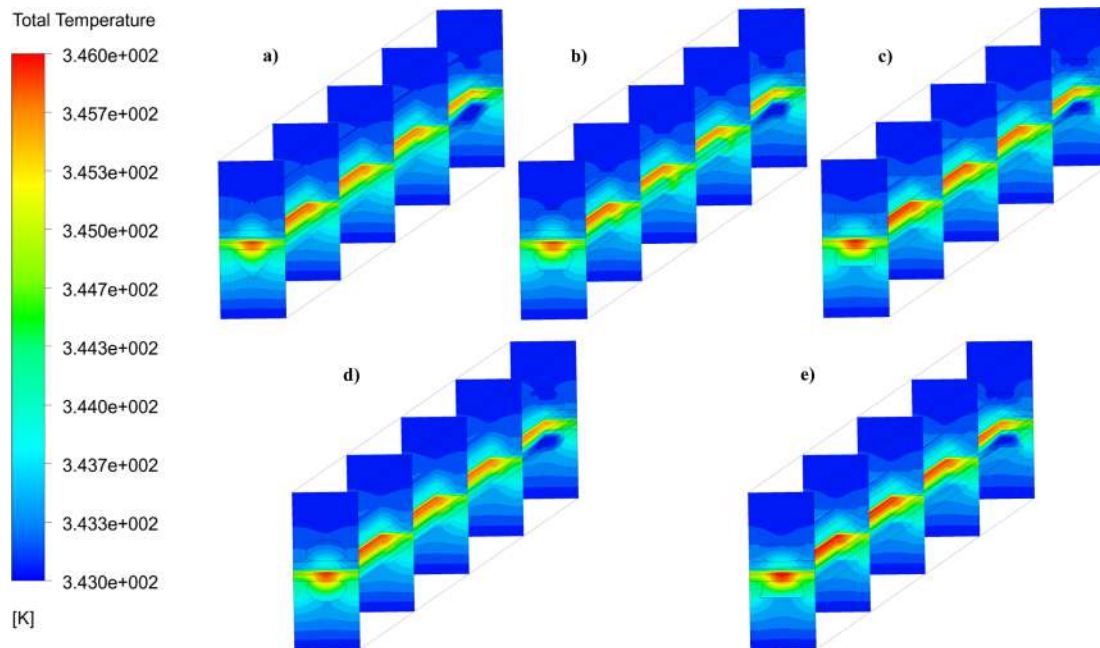


Fig. 45. Total temperature fields for inverted-elliptical base CCS geometries. a) I-Hlp-Trg, b) I-Hlp-Trp, c) I-Hlp-Rct, d) IHlp-I-Hlp, e) I-Hlp-I-Trp.

References

[1] Wang J. Appl Energy 2015;157:640–63. <https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2015.01.032>.

[2] Pei P, Chen H. Appl Energy 2014;125:60–75. <https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2014.03.048>.

[3] Li X, Sabir I. Int J Hydrogen Energy 2005;30:359–71. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2004.09.019>.

[4] Kahraman H, Orhan MF. Energy Convers Manag 2017;133:363–84. <https://doi.org/10.1016/j.enconman.2016.10.053>.

[5] Manso AP, Marzo FF, Barranco J, Garikano X, Garmendia Mujika M. Int J Hydrogen Energy 2012;37:15256–87. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2012.07.076>.

[6] Cano-andrade S, Hernandez-guerrero A, Von Spakovsky MR. Energy 2010;35:920–7. <https://doi.org/10.1016/j.energy.2009.07.045>.

[7] Fontana É, Mancusi E, Cocco V, Augusto A, De Souza U, Guelli SMA, et al. Int J Heat Mass Transf 2011;54:4462–72. <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2011.06.037>.

[8] Jang, Cheng C, Liao W, Huang Y, Tsai Y. Appl Energy 2012;99:67–79. <https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2012.04.011>.

[9] Guo N, Leu MC, Koylu UO. Int J Hydrogen Energy 2014;39:21185–95. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2014.10.069>.

[10] Pourmahmoud N, Sadeghifar H, Torkavannejad A. Int J Heat Mass Transf 2017;108:577–84. <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2016.12.058>.

[11] Shimpalee S, Van Zee JW. Int J Hydrogen Energy 2007;32:842–56. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2006.11.032>.

- [12] Wang X, Yan W, Duan Y, Weng F, Jung G, Lee C. *Energy Convers Manag* 2010;51:959–68. <https://doi.org/10.1016/j.enconman.2009.11.037>.
- [13] Kerkoub Y, Benzaoui A, Haddad F, Ziari YK. *Energy Convers Manag* 2018;174:260–75. <https://doi.org/10.1016/j.enconman.2018.08.041>.
- [14] Kumar A, Reddy RG. *J Power Sources* 2003;113:11–8. [https://doi.org/10.1016/S0378-7753\(02\)00475-5](https://doi.org/10.1016/S0378-7753(02)00475-5).
- [15] Ahmed DH, Sung HJ. *J Power Sources* 2006;162:327–39. <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2006.06.083>.
- [16] Sun L, Oosthuizen PH, McAuley KB. *Int J Therm Sci* 2006;45:1021–6. <https://doi.org/10.1016/j.ijthermalsci.2006.01.005>.
- [17] Owejan JP, Trabold TA, Jacobson DL, Arif M, Kandlikar SG. *Int J Hydrogen Energy* 2007;32:4489–502. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2007.05.044>.
- [18] Metz T, Paust N, Claas M, Zengerle R, Koltay P. *Sens Actuators, A* 2008;143:49–57. <https://doi.org/10.1016/j.sna.2007.06.037>.
- [19] Akhtar N, Qureshi A, Scholta J, Hartnig C, Messerschmidt M, Lehnert W. *Int J Hydrogen Energy* 2009;34:3104–11. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2009.01.022>.
- [20] Bunmark N, Limtrakul S, Fowler MW, Vatanatham T, Gostick J. *Int J Hydrogen Energy* 2010;35:6887–96. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2010.04.027>.
- [21] Zhu X, Liao Q, Sui PC, Djilali N. *J Power Sources* 2010;195:801–12. <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2009.08.021>.
- [22] Khazaei I, Ghazikhani M, Mohammadiun M. *Sci Iran* 2012;19:585–93. <https://doi.org/10.1016/j.scient.2011.11.039>.
- [23] Ben Salah Y, Tabe Y, Chikahisa T. *Energy Procedia* 2012;28:125–33. <https://doi.org/10.1016/j.egypro.2012.08.046>.
- [24] Wang XD, Lu G, Duan YY, Lee DJ. *Int J Hydrogen Energy* 2012;37:15778–86. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2012.04.028>.
- [25] Freire LS, Antolini E, Linardi M, Santiago EI, Passos RR. *Int J Hydrogen Energy* 2014;39:12052–60. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2014.06.041>.
- [26] Khazaei I, Mohammadiun M. *Int J Appl Mech Eng* 2013;18:85–98. <https://doi.org/10.2478/ijame-2013-0006>.
- [27] Khazaei I. *Heat Mass Transf* 2015;51:1681–9. <https://doi.org/10.1007/s00231-015-1531-5>.
- [28] Ahmadi N, Rezaadeh S, Dadvand A, Mirzaee I. *Period Polytechnol Chem Eng* 2018;62:97–105. <https://doi.org/10.3311/PPch.9369>.
- [29] Xu Y, Peng L, Yi P, Lai X. *Int J Hydrogen Energy* 2016;41:5084–95. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2016.01.073>.
- [30] Korkischko I, Carmo BS, Fonseca FC. *Fuel Cells* 2017;17:809–15. <https://doi.org/10.1002/fuce.201700168>.
- [31] Paulino ALR, Cunha EF, Robalinho E, Linardi M, Korkischko I, Santiago EI. *Fuel Cells* 2017;17:1–10. <https://doi.org/10.1002/fuce.201600141>.
- [32] Kim JH, Kim WT. *Energies* 2018;11:1403. <https://doi.org/10.3390/en11061403>.
- [33] Hadjadj R, Kaabar W. *J. Eng. Sci. Tech.* 2018;13:1070–89.
- [34] ANSYS fluent 14.0 Fuel Cell Modules Manual. ANSYS Inc.; 2011.
- [35] Arvay A, Ahmed A, Peng X, Kannan AM. *Int J Hydrogen Energy* 2011;37:2482–9. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2011.11.005>.
- [36] Hashemi F, Rowshanzamir S, Rezakazemi M. *Math Comput Model* 2012;55:1540–57. <https://doi.org/10.1016/j.mcm.2011.10.047>.
- [37] Kahveci EE, Taymaz I. *Fuel* 2018;217:51–8. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2017.12.073>.
- [38] TD Canonsburg, ANSYS fluent meshing user's guide, 15317 (2013) 724–746.
- [39] A. Hood, S. Slater, M. Bouchet, S.Z. Islam, In: Ali Sayigh, (Editor). *Renewable energy in the service of mankind Vol I*. Switzerland: Springer; 2014. p. 159–71. doi: [10.1007/978-3-319-17777-9_15](https://doi.org/10.1007/978-3-319-17777-9_15).
- [40] Ticianelli EA, Derouin CR, Srinivasan S. *J Electroanal Chem* 1988;251:275–95.

ملخص

إن شكل قنوات التدفق الصغيرة يؤثر بشكل جوهري على توزيع و استهلاك المواد المتفاعلة داخل خلية PEMFC إضافة إلى كثافة طاقتها المنتجة. في هذه الأطروحة، كمرحلة أولى، يستخدم برنامج Fluent-ANSYS لحل المعادلات الرياضية التي تتمزج الظواهر الفيزيائية الناتجة أثناء تشغيل و محاكاة خلية PEMFC. تم تحسين أشكال قنوات التدفق الصغيرة وأبعاد الخلية بما في ذلك الأشكال العرضية للقنوات و أشكال مسارات التدفق لدراسة تأثيرها على أداء الخلية. في المرحلة الثانية، تم تصميم خلية PEMFC أنبوبية مبتكرة بقنوات تدفق حلزونية الشكل لدراسة أشكال مختلفة للمقاطع العرضية للقنوات ومعرفة مدى تأثيرها على كفاءة الخلية، ايضاً نقل و استهلاك المتفاعلات. تم تطوير برنامج حسابي FORTRAN لنمذجة الأشكال الجديدة و حل المعادلات المتحصل عليها بغرض دراسة تأثير شكل هته القنوات في الخلية الأنبوبية.

Abstract

The micro-channel configurations have an important impact on the reactants distribution and consumption added to the PEMFC's power density. In this thesis, Fluent-ANSYS is used in the first phase attempting to solve the mathematical equations governing the physical phenomena produced during the operation of a single cell of a planar PEMFC. Different micro-channel configurations and cell dimensions including micro-channel cross-sectional shapes, channel path shapes also micro-channel dimensions are optimized to investigate the influence on the PEMFC performance. In the second phase, an innovative tubular PEMFC with a twisted flow filed is designed to investigate the effect of different channel cross section shapes on the transfer reactants and consumption, and cell efficiency. A FORTRAN code is developed to reed solve the obtained equation system to study the effect of the micro-channel configuration in the tubular PEMFC.

Résumé

Les configurations des micro-canaux ont un impact important sur la distribution et la consommation des réactifs ainsi que la densité de puissance du PEMFC. Dans cette thèse et en première phase, on a utilisé le code ANSYS-Fluent pour résoudre les équations mathématiques régissant les phénomènes physiques inhérents au fonctionnement d'une seule cellule PEMFC planaire. Les différentes configurations des micro-canaux, y compris leurs formes transversales, leurs dimensions ainsi que les dimensions des cellules et le chemin d'écoulement, ont été optimisées pour étudier leurs influences sur la performance du PEMFC. En deuxième phase, une PEMFC tubulaire innovante avec des micro-canaux spiraux a été simulée pour étudier l'effet des différentes formes de sections transversales de ces micro-canaux sur le transfert et la consommation de réactifs ainsi que l'efficacité de la cellule. Un programme FORTRAN a été développé pour résoudre le système d'équations obtenu et pour créer les nouvelles géométries dans le but d'étudier l'impact de la configuration des micro-canaux dans la PEMFC tubulaire.