

# MODELISATION NUMERIQUE DE L'ÉCOULEMENT TURBULENT DANS LE CANAL ET LA COUCHE DE DIFFUSION CATHODIQUE D'UNE PILE A COMBUSTIBLE (PEMFC)

Hocine BEN MOUSSA<sup>1</sup>, Djamel HADDAD<sup>1</sup>, Kafia OULMI<sup>2</sup>, Bariza ZITOUNI<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Département de Mécanique, Faculté des Sciences de l'Ingénieur

<sup>2</sup>Département de Chimie, Faculté des Sciences

Université de BATNA (Algérie)

hocine\_b@hotmail.com

## Résumé :

Un modèle bidimensionnel transitoire de l'écoulement de gaz dans les parties canal et couche de diffusion cathodique d'une pile à combustible (PEMFC) est présenté. Le modèle  $k-\varepsilon$  pour modéliser le phénomène de turbulence dans le canal est choisi. Les équations, gouvernant le phénomène physique, ont été résolues par la méthode des volumes finis. L'objectif de cette étude est de quantifier la concentration d'oxygène ( $O_2$ ) à la sortie de la couche de diffusion et de déterminer les conditions de performance de la pile. Les résultats numériques montrent l'effet du régime de l'écoulement et la nature du milieu poreux sur la distribution de gaz dans la couche de diffusion.

**Mots clés :** Couche de diffusion cathodique, écoulement turbulent, concentration, PEMFC.

## 1. INTRODUCTION

Une pile à combustible permet de convertir directement de l'énergie chimique en énergie électrique. L'un des intérêts de la pile à combustible est que les températures sont d'un plus faible niveau que dans les turbines ou les moteurs à combustion. Ceci permet entre autres d'éviter la formation de NOx. L'hydrogène est plus convenable à ce niveau de température. L'écoulement des réactifs est un phénomène très intéressant à étudier dans ce type de pile. La détermination de la nature de milieu (continue, discontinue), et l'état physique des fluides sont importantes, afin de modéliser les phénomènes qui se produisent dans les différentes parties du système. L'objectif de notre travail est la modélisation numérique de l'écoulement turbulent de l'oxygène humide dans la partie cathodique (canal, couche de diffusion de gaz). Cette modélisation permet de visualiser la transition du milieu continu (canal) vers le milieu poreux (couche de diffusion de gaz) ainsi que l'effet de perméabilité et le nombre de Reynolds sur la nature de l'écoulement.

## 2. MODELE MATHEMATIQUE

Les équations mathématiques de transport, les termes sources et les relations de fermeture sont présentés. La forme d'équation peut changer d'un composant à un autre de la pile à combustible, chaque composant possède sa propre équation. Les canaux des

gaz sont considérés un milieu continu, le régime turbulent est considéré et régi par l'équation de Navier Stockes. Les couches de diffusion et catalyseur sont des milieux poreux ; l'effet de la force exercée par le solide sur le fluide est caractérisé par un nouveau terme additionnel dans l'équation de mouvement. Le phénomène de turbulence est négligé dans les milieux poreux (les vitesses d'écoulement sont faibles).

## 2.1. Canaux de gaz

Dans les canaux de gaz, les équations de continuité, de Navier Stockes, de conservation des espèces et de l'énergie régissant les processus physiques s'écrivent :

$$\text{Equation de continuité : } \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho U}{\partial x} + \frac{\partial \rho V}{\partial y} = 0 \quad (1)$$

Equation de mouvement :

$$\frac{\partial \rho U}{\partial t} + U \frac{\partial \rho U}{\partial x} + V \frac{\partial \rho U}{\partial y} = -\frac{\partial P}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left( (\mu + \mu_t) \frac{\partial U}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( (\mu + \mu_t) \frac{\partial U}{\partial y} \right) \quad (2)$$

$$\frac{\partial \rho V}{\partial t} + U \frac{\partial \rho V}{\partial x} + V \frac{\partial \rho V}{\partial y} = -\frac{\partial P}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial x} \left( (\mu + \mu_t) \frac{\partial V}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( (\mu + \mu_t) \frac{\partial V}{\partial y} \right) \quad (3)$$

Equation de conservation de masse:

$$\frac{\partial C_k}{\partial t} + U \frac{\partial C_k}{\partial x} + V \frac{\partial C_k}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial x} \left( (D_k + \frac{\mu_t}{Sc_t}) \frac{\partial C_k}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( (D_k + \frac{\mu_t}{Sc_t}) \frac{\partial C_k}{\partial y} \right) \quad (4)$$

Equation d'énergie :

$$\frac{\partial T}{\partial t} + U \frac{\partial T}{\partial x} + V \frac{\partial T}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial x} \left( \left( \alpha + \frac{\mu_t}{Pr_t} \right) \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \left( \alpha + \frac{\mu_t}{Pr_t} \right) \frac{\partial T}{\partial y} \right) \quad (5)$$

Pour le calcul de la viscosité turbulente, on a choisi deux modèles de fermeture: modèle à 0 équation (longueur de mélange) et le modèle à 2 équations ( $k - \varepsilon$ ).

$$\text{- modèle à 0 équation (longueur de mélange, } l_m): \mu_t = \rho l_m^2 \left| \frac{\partial U}{\partial y} \right| \quad (6)$$

$$\text{- modèle à 2 équations } (k - \varepsilon): \mu_t = \rho C_\mu k^2 / \varepsilon \quad (7)$$

Les constantes empiriques prennent les valeurs suivantes pour les écoulements simples (écoulement en canal):  $C_\mu = 0.09$ ,  $C_{1\varepsilon} = 1.44$ ,  $C_{2\varepsilon} = 1.92$ ,  $\sigma_k = 1$ ,  $\sigma_\varepsilon = 1.3$

Le modèle ( $k - \varepsilon$ ) a été appliqué après un test et une comparaison avec le modèle à zéro équation (figure 1).

## 2.2. Couche de diffusion de gaz.

Dans les diffuseurs de gaz, afin de tenir compte de la nature poreuse, et d'employer des formes semblables d'équations,  $U$  et  $V$  sont les composantes de la vitesse dans les pores,

$$\text{Equation de continuité: } \frac{\partial \varepsilon_d \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho \varepsilon_d U}{\partial x} + \frac{\partial \rho \varepsilon_d V}{\partial y} = 0 \quad (10)$$

Equation de mouvement:

$$\frac{\partial \rho \varepsilon_d U}{\partial t} + U \frac{\partial \rho \varepsilon_d U}{\partial x} + V \frac{\partial \rho \varepsilon_d U}{\partial y} = -\varepsilon_d \frac{\partial P}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left( r \cdot \mu \frac{\partial U}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( r \cdot \mu \frac{\partial U}{\partial y} \right) - \varepsilon_d^2 \frac{\mu}{k_h} U \quad (11)$$

$$\frac{\partial \rho \varepsilon_d V}{\partial t} + U \frac{\partial \rho \varepsilon_d V}{\partial x} + V \frac{\partial \rho \varepsilon_d V}{\partial y} = -\varepsilon_d \frac{\partial P}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial x} \left( r \cdot \mu \frac{\partial V}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( r \cdot \mu \frac{\partial V}{\partial y} \right) - \varepsilon_d^2 \frac{\mu}{k_h} V \quad (12)$$

Où les termes sources de l'équation de mouvement expliquent la résistance de l'écoulement (c'est-à-dire le terme de Darcy).

Equation de conservation d'espèces : ( $k : O_2, H_2O$ )

$$\frac{\partial \varepsilon_d C_k}{\partial t} + U \frac{\partial \varepsilon_d C_k}{\partial x} + V \frac{\partial \varepsilon_d C_k}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial x} \left( D_k^{eff} \frac{\partial C_k}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( D_k^{eff} \frac{\partial C_k}{\partial y} \right) \quad (13)$$

Equation d'énergie:

$$\varepsilon_d \rho c_p \left( \frac{\partial T}{\partial t} + U \frac{\partial T}{\partial x} + V \frac{\partial T}{\partial y} \right) = k^{eff} \left( \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right) \quad (14)$$

Les nombres adimensionnels Prandtl et Schmitt sont calculés avec des valeurs

$$\text{effectives: } Pr^g = \frac{\mu c_p}{k_{eff}} \text{ et } Sc_k^g = \frac{\mu}{\rho D_k^{eff}}.$$

$$\text{La conductivité thermique effective : } k_{eff} = -2k_{gr} + \frac{1}{\frac{\varepsilon_g}{2k_{gr} + k_{gas}} + \frac{1 - \varepsilon_g}{3k_{gr}}} \quad (15)$$

$$\text{La diffusivité effective du milieu poreux est : } D_k^{eff} = D_k \varepsilon_d^{1.5} \quad (16)$$

Le facteur de correction du milieu poreux  $r$  dans l'équation de quantité de mouvement

$$\text{est exprimée par [Dagan, 1979]: } r = 2,25 \frac{(1 - \varepsilon_d)^2}{\varepsilon_d^2} \quad (17)$$

### 3. RESULTATS ET DISCUSSIONS

On a suppose le régime turbulent dans les canaux des gaz et le régime laminaire dans la couche de diffusion. Le modèle de turbulence étudié dans notre cas est celui de  $k-\varepsilon$ . Les résultats représentant le comportement transitoire de la pile à combustible PEMFC sont présentés dans cette étude. La perméabilité du GDL et du nombre de Reynolds sont parmi les paramètres importants qui ont une grande influence sur le fonctionnement de la pile. Un programme a été développé dans ce sens pour obtenir les profils de température, la concentration des espèces, le champ de vitesse. Dans cette étape on s'intéresse à étudier le comportement dynamique du profil de vitesse pour différents paramètres, tels que le régime d'écoulement et la nature du milieu continu ou poreux (perméabilité).

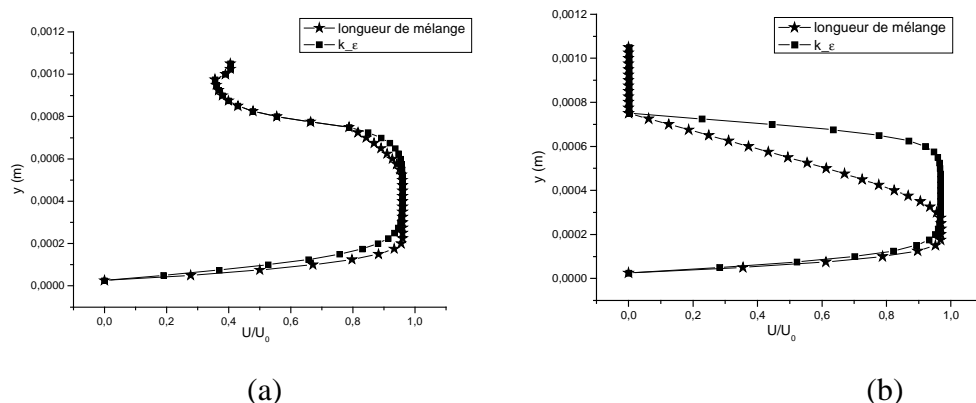


Figure 1 : profil de vitesse dans les parties canal, couche de diffusion et couche de catalyseur, pour  $Re = 10^4$  et (a)  $k = 10^{-10}$  (b)  $k = 10^{-15}$

Les deux figures ci-dessus montrent une comparaison entre deux modèles de turbulence avec  $Re = 10^4$  pour deux différentes valeurs de perméabilité de la couche de diffusion. En ce qui concerne les profils de la composante horizontale de la vitesse, la différence entre les deux modèles est nette, surtout à l'interface de la couche de diffusion pour une valeur plus petite de perméabilité, car le modèle de longueur de mélange demande des informations sur l'épaisseur de la couche limite pour calculer la viscosité turbulente. Suite à ce résultat on a opté pour le modèle  $k_\epsilon$ . On remarque que le profil de vitesse a une forme parabolique symétrique pour les faibles valeurs de perméabilités (cas d'écoulement entre deux parois solides). La valeur de la vitesse augmente lorsque la perméabilité est grande, et devient plus grande en augmentant le nombre de Reynolds. On distingue que pour un  $K$  très grand, le terme de Darcy devient négligeable, et pour un  $K$  se rapprochant de 0 le terme de Darcy est prépondérant. La représentation en deux dimensions des champs de vitesses se trouve dans la figure 3.

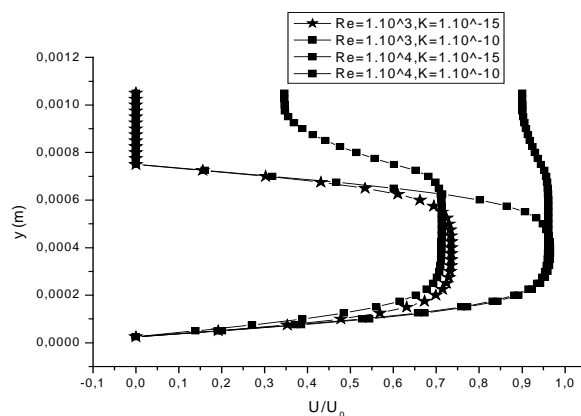


Figure 2 : L'effet du nombre de Reynolds et de la perméabilité sur les profils de vitesse (modèle  $k_\epsilon$ )

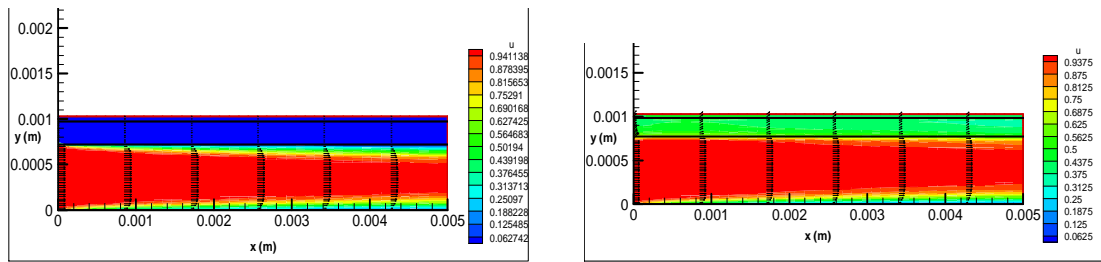


Figure 3 : Répartition de champs de vitesses pour une perméabilité à gauche,  $K = 10^{-15}$  et à droite  $k = 10^{-10}$

## 4. CONCLUSION

La formulation mathématique des phénomènes de transfert de chaleur et masse dans les parties canal et couche de diffusion cathodique de la pile à combustible a été présentée. Le régime l'écoulement est considéré turbulent dans le canal et laminaire dans la GDL. Le modèle  $k-\epsilon$  a été choisi, après une étude comparative avec le modèle de longueur de mélange. La variation des profils de vitesse s'explique par la présence de phénomène de turbulence même dans un domaine de faible dimension. La différence entre l'écoulement dans un milieu continue et un milieu poreux est traduit par le changement de la vitesse avec la perméabilité de la couche de diffusion de gaz.

### Nomenclature.

$U, V$	composante de vitesse horizontale et verticale m/s	$K_h$	perméabilité ( $m^2$ )
$t$	temps (s)	$\epsilon_d$	porosité
$C_K$	Concentration molaire de l'espèce k. $mole.cm^{-3}$	$c_p$	chaleur spécifique J/kg.k
$D_k^{eff}$	Coefficient de diffusion effective de l'espèce k $m^2/s$	$\lambda_{eff}$	Conductivité thermique w/m k
$\rho$	masse volumique ( $kg / m^3$ )	$T$	Température K

### Références

- [1] T.E. Springer, T.A. Zawodzinski, S. Gottesfeld, "Polymer Electrolyte Fuel Cell Model", *J. Electrochem. Soc.*, Vol. 138, No. 8, 1991, pp. 2334-2341.
- [2] T.E. Springer, S. Gottesfeld, "Pseudohomogeneous Catalyst Layer Model for Polymer Electrolyte Fuel Cell", Proc. of the Symposium on Modeling of Batteries and Fuel Cells 1990.
- [3] K. Broka, P. Ekdunge, "Modelling the PEM fuel cell cathode," *J. Applied Electrochemistry*, Vol. 27, pp. 281-289, 1997.
- [4] P.C. Sui, L.D. Chen, J.P. Seaba, Y. Wariishi, "Modeling and Optimization of a PEMFC Catalyst Layer," *SAE Congress*, 1999-01-0539, 1999, pp. 61-70.
- [5] Z.H. Wang, C.Y. Wang, "Two-Phase Flow and Transport in the Interdigitated Air Cathode of Proton Exchange Membrane Fuel Cells," *Proceedings ASME Heat Transfer Division*, HTD-Vol.366-1, 2000, pp. 27-33.
- [6] D. Natarajan, T. Van Nguyen, "A Two-Dimensional, Two-Phase Multi component, Transient Model of the Cathode of a Proton Exchange Membrane Fuel Cell Using Conventional Gas Distributors," *J. Electrochem. Soc.*, Vol. 148, No. 12, 2001, pp. A1324- A1335.