SIMULATION NUMÉRIQUE DU TRANSFERT THERMIQUE INCLUANT LE MODE DE RAYONNEMENT DANS UNE PILE À COMBUSTIBLE A OXYDE SOLIDE

N. Meddour¹, H. Ben Moussa² et H. Mahcene^{1,*}

¹ Laboratoire des Energies Nouvelles et Renouvelables des Zones Arides et Sahariennes (LENREZA), Faculté des Sciences et de la Technologie et Sciences de la Matière, Université Kasdi Merbah Ouargla, Ouargla 30000, Algérie

² Département de mécanique, Université Hadj Lakhdar Batna, Batna 05000, Algérie

* Email : <u>hmohcin@yahoo.fr</u>

RESUME : Le but de cette étude est de faire apparaître l'influence du mode de transfert de chaleur par rayonnement dans la pile à combustible à oxyde solide (SOFC). La température maximale sous l'effet de différentes sources de chaleur et avec l'ajout de source radiative, la distribution unidimensionnelle de la température à l'électrolyte et le champ bidimensionnel de la température dans les électrodes sont étudiés.

MOTS CLÉ: Pile à combustible, SOFC, rayonnement, distribution de la température.

1. Introduction:

La population mondiale ne cesse de croître avec l'espérance de vie qui augmente dans l'ensemble des pays du globe. De plus, les pays dits 'pauvres' du début du 19^{iéme} siècle connaissent un essor économique croissant depuis plusieurs décennies. Ces deux effets combinés provoquent un besoin en énergie de plus en plus important. Les énergies actuelles (gaz naturel, pétrole,...) sont des ressources limitées au sein de la terre et dont les réserves commencent à être épuisées. Les développements industriels des moyens de transport (automobile, avion,...) de l'homme se sont accompagnés de l'émission de gaz nocifs (CO₂, NO_x, SO_x) dont les conséquences sont importantes sur l'atmosphère et sur l'équilibre de l'écosystème terrestre [1, 2].

Une solution proposée depuis plusieurs années consiste à produire l'énergie par le moyen des centrales nucléaires, mais, de nos jours, les hommes se trouvent confrontés aux problèmes de la gestion des déchets radioactifs et du recyclage des centrales. Dans le futur, la production d'énergie devra être diversifiée, mais les moyens pour la produire ne sont pas encore définis. Cependant, ces méthodes de production devront être non polluantes (respect de l'environnement) et efficaces. Les techniques évoquées sont la géothermie, l'éolien, le photovoltaïque, ou encore les piles à combustible.

Les piles à combustible produisent de l'énergie électrique par un processus électrochimique [3]. Il existe différents types de piles à combustible qui se distinguent par leur températeure d'utilisation. Dans le cadre de ce travail, les piles totalement solide à hautes températures sont étudiées (Solid Oxide Fuel Cell : SOFC). Le domaine d'application pour ce genre de dispositif est l'énergie stationnaire (maison, industrie, ...) ou l'energie mobile (auxiliaire de puissance pour les voitures,...). Les problémes majeurs des SOFC, qui freinent leur utilisation, résident dans leurs températures de fonctionnement élevées, d'environ 1000 °C, et dans leurs miniaturisations. Une telle température de travail imlique :

- L'utilisation d'électrodes et d'interconnecteurs en céramiques,
- Et un vieillissement prématuré de l'électrolyte solide [4, 5].

Le but de notre travail est de faire apparaître l'effet de mode de transfert de chaleur par rayonnement comme source en chaque élément de la pile et de localiser la valeur maximale de la température. Bien entendu, avant de se lancer dans le développement de piles SOFC, il est nécessaire d'acquérir un savoir-faire et les compétences de base sur ces piles.

2. Le principe de fonctionnement :

Le principe de fonctionnement des SOFC est basé sur le mécanisme suivant : l'oxygène est dissocié à la cathode en O²⁻, puis le cation migre à travers l'électrolyte conducteur ionique à haute température et va se combiner à l'anode avec l'hydrogène pour former de l'eau et libérer des électrons [2, 6].

Les réactions mises en jeu sont les suivantes :

À l'anode :
$$H_2 + O^2 => H_2O + 2 e^{-\frac{1}{2}}$$

Et à la cathode :
$$O_2 + 4 e^2 \Rightarrow 2O^{2-}$$

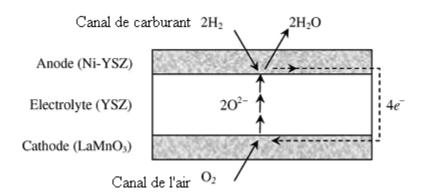


Figure 1: Schéma de principe de fonctionnement de la pile SOFC [4]

3. Equations et modélisation Numérique du SOFC :

3.1. Modèle physique:

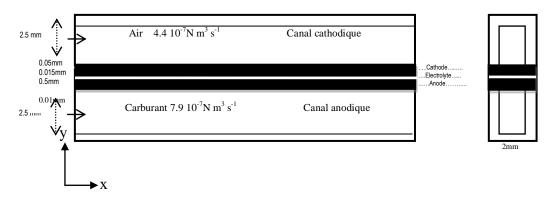


Figure 2 : Schéma d'une cellule élémentaire d'une pile SOFC à anode supportée [7].

3.2. Equations régissantes le phénomène :

Electrolyte

Equation d'énergie:

Le transfert de chaleur due aux diffusions dans la partie solide de la pile est plus dominant que le transfert due aux conductions ; l'équation qui gouverne le mode de transfert peut s'écrire comme suit [8,9, 10]:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda_{eff \, \'ele} \, \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\lambda_{eff \, \'ele} \, \frac{\partial T}{\partial y} \right) + S_{T \, \'ele} = 0 \tag{1}$$

- Source ohmique:

La source d'énergie qui existe dans l'électrolyte d'une pile SOFC est due aux pertes ohmiques ; elle est exprimée comme suit :

$$S_{Ohm} \quad _{\'ele} = \frac{i^2}{\sigma_{\'ala}} \tag{2}$$

- Source radiative :

$$q_{R}(y) = C_{1}e^{2ky} + C_{2}e^{-2ky}$$
(3)

$$C_{1} = -\sigma \left(T_{\text{sup}}^{4} - T^{4}\right) e^{-2kl} \tag{4}$$

$$C_2 = \sigma \left(T_{\text{inf}}^4 - T^4 \right) \tag{5}$$

\Lau Cathode et L'anode :

Equation d'énergie :

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda_{\text{eff}} \cdot \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\lambda_{\text{eff}} \cdot \frac{\partial T}{\partial y} \right) + S_{T} = 0$$
 (6)

• Le terme source :

En plus des trois sources, ohmique, chimique et activation on va ajouter la source radiative.

$$S_{T} = S_{Ohm} + S_{act} + S_{chi} + S_{R}$$

$$\tag{7}$$

La source d'énergie due aux pertes ohmiques est la somme des pertes ohmiques anode, cathode et électrolyte [11, 12].

$$S_{Ohm} = S_{Ohm, an} + S_{Ohm, éle} + S_{Ohm, cat}$$
(8)

Où:

$$S_{Ohm, \, \text{éle}} = \frac{i^2}{\sigma_{\text{ele}}}$$
, $S_{Ohm, \, \text{an}} = \frac{i^2}{\sigma_{\text{an}}}$, $S_{Ohm, \, \text{cat}} = \frac{i^2}{\sigma_{\text{cat}}}$ (9)

$$\sigma_{\rm an} = \frac{95.10^6}{T} \exp\left(\frac{-1150}{T}\right) \tag{10}$$

$$\sigma_{ca} = \frac{42.10^6}{T} \exp\left(\frac{-1200}{T}\right) \tag{11}$$

$$\sigma_{\text{ele}} = 3.34.10^4 \exp\left(\frac{-10300}{T}\right) \tag{12}$$

Meddour N., Ben Moussa H. et Mahcene H.

La source due aux pertes d'activation cathodique s'écrit :

$$S_{\text{act cat}} = \eta_{\text{act cat}} \cdot j \tag{13}$$

La perte d'activation cathodique prend la forme suivante :

$$\eta_{\text{act cat}} = \frac{RT}{\alpha \, nF} \cdot \ln \left(\frac{j}{j_{0 \, \text{cat}}} \right) \tag{14}$$

Avec j_{0, cat} la densité de courant d'échange, qui a la forme :

$$j_{0 \text{ cat}} = \frac{RT}{4F} K_{\text{cat}} \cdot \exp\left(\frac{-E_{\text{act}}}{RT}\right)$$
 (15)

-La source due aux pertes d'activation anodique s'exprime comme suit :

$$S_{act an} = \eta_{act an}.j \tag{16}$$

La perte d'activation anodique prend la forme suivante :

$$\eta_{\text{act an}} = \frac{RT}{\alpha nF} . \ln \left(\frac{i}{i_{0 \text{ an}}} \right)$$
 (17)

Avec i_{0.an}: la densité de courant d'échange, elle s'exprime sous la forme :

$$i_{0 \text{ an}} = \frac{RT}{2F} K_{\text{an}} \tag{18}$$

La source de chaleur due à la réaction électrochimique s'écrit :

$$S_{chi} = T\Delta S. \frac{j}{2F} = \left(\Delta S^{0} + \int_{r_{0}}^{r} \frac{\Delta c_{Pr}(T)}{T} dT\right) \frac{j}{2F}$$
(19)

$$c_{PO_2}(T) = 37.432 + 0.0201 \cdot \left(\frac{T}{100}\right)^{1.5} - 178.57 \left(\frac{T}{100}\right)^{-1..5} + 236.88 \left(\frac{T}{100}\right)^{-2}$$
 (20)

$$c_{PH_2}(T) = 56.505 - 702.74 \cdot \left(\frac{T}{100}\right)^{-0.75} - 1165 \left(\frac{T}{100}\right)^{-1} - 560.70 \left(\frac{T}{100}\right)^{-1..5}$$
(21)

$$c_{PH_2O}(T) = 143.05 - 183.54 \cdot \left(\frac{T}{100}\right)^{-0.25} + 82.751 \left(\frac{T}{100}\right)^{0..5} - 3.6959 \left(\frac{T}{100}\right)$$
(22)

$$\Delta c_{Pr}(T) = c_{PH_2O}(T) - \frac{1}{2}c_{PO_2}(T) - c_{PH_2}(T)$$
(23)

4. Résultats et interprétations :

Les résultats présentés ci-dessous sont obtenus dans deux cas : le cas unidimensionnel et le cas bidimensionnel, montrant l'effet de rayonnement dans différentes parties de la pile.

Dans la première partie on a traité le rôle de transfert de chaleur par rayonnement dans l'équation de l'énergie avec différentes épaisseurs optiques de l'électrolyte.

Dans la deuxième étude (bidimensionnelle), on a traité l'influence de chaque source (perte) séparément sur la distribution de la température dans les différentes parties constituant la pile.

4.1. Modélisation unidimensionnel

4.1.1. Influence des sources de chaleur radiative sur le profil de température dans la partie solide (l'électrolyte)

Par l'introduction du terme de l'épaisseur optique τ =k.l, [13, 14]; qui est le produit du coefficient d'absorbation et l'épaisseur de l'électrolyte (relation) dans l'équation de transfert de chaleur par rayonnement. Si τ augmente, on remarque un changement dans le profil de la température (du linaire au non linaire). On peut dire que l'influence du rayonnement apparait lorsque l'épaisseur devient plus grande (on augmente le coefficient d'absorption ou l'épaisseur de l'électrolyte) (Figure 3).

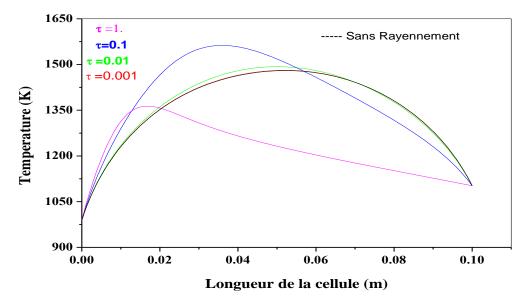


Figure 3: Profil de la température (Cond+Ray +effet joule) à l'électrolyte.

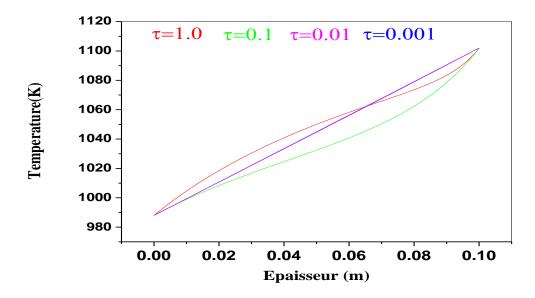


Figure 4.a : Profil de la température (Cond+Ray) pour différentes valeurs de τ

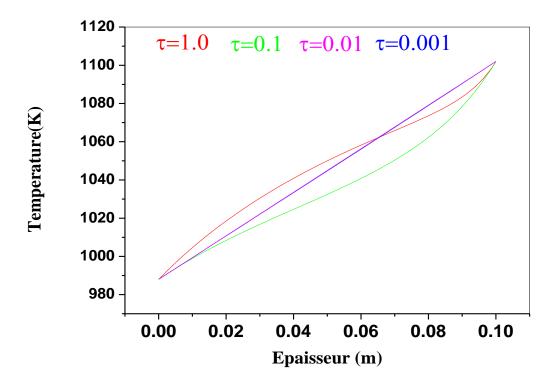


Figure 4.b : Profil de la température (Cond+Ray) pour différentes valeurs de τ

Pour des valeurs très petites de l'épaisseur optique (τ =0.001) on ne voit aucune influence de la source radiative ; la source ohmique est dominante. De même pour la valeur τ =0.01, l'effet du rayonnement reste négligeable. Lorsque τ prend les valeurs de 0.1 à 1 l'effet du rayonnement devient considérable dans la partie de l'électrolyte (figure 4.a et figure 4.b).

Tableau 1 : Les propretés d'une cellule SOFC (solid oxide fuel cell) [3].

Zone	Epaisseur (µm)	Conductivité thermique (W/mK)
Anode	500	3.7
Electrolyte	15	2.3
Cathode	50	0.8

4.2. Modélisation bidimensionnel

4.2.1. Influence des sources de chaleur sur le champ de température dans l'anode :

Sous l'effet des différentes sources de chaleur, les pertes d'activation deviennent importantes devant les sources de type ohmique et chimique. Aussi on peut dire que l'ajout de terme source radiative avec les autres termes n'est pas important (la température maximale n'a pas changé).

4.2.2. Influence des sources de chaleur sur le champ de température dans la partie solide (l'électrolyte) :

on remarqe que l'ajout du terme source radiative concernant la partie solide (électrolyte) est considérable et la difference dans la température maximale est ΔT =66K.

4.2.3. Influence des sources de chaleur sur le champ de température dans la cathode:

L'influence du terme ohmique est moins importante par rapport à l'influence du terme d'activation. L'effet radiatif n'a pas d'influence remarquable.

4.2.4. Influence des sources de chaleur sur le champ de température dans toute la cellule :

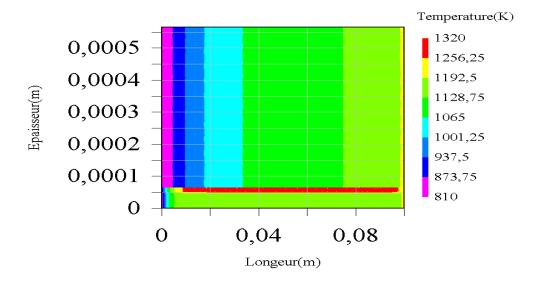


Figure 5 : Champ de température sous l'effet des trois sources dans la cellule

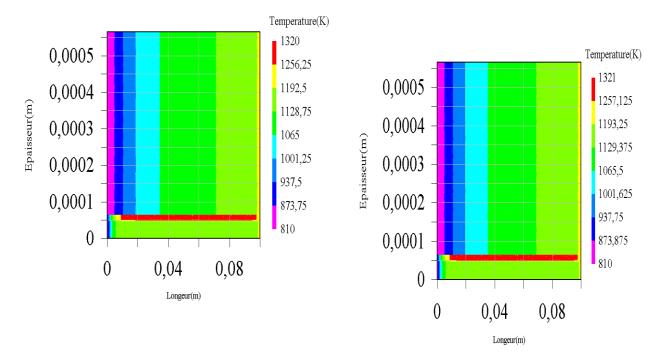


Figure 6 : Champ de température sous l'effet des trois sources + source radiative avec τ =0.1 dans la cellule

Figure 7 : Champ de température sous l'effet des trois sources + source radiative avec τ =0.2 dans la cellule

D'une façon générale l'effet de la source de rayonnement sur la pile à combustible est négligeable, le difference dans la température maximale est ΔT =28K. Mais si on s'intéresse à chaque partie de la pile, on remarque que les plus hautes températures se trouvent dans l'électrolyte (Figures 5, 6, 7).

5. Conclusion générale et recommandations

Ce travail consiste à une simulation du transfert thermique incluant le mode de rayonnement dans une pile à combustible type SOFC à anode supportée. Les résultats de cette étude permettent d'acquérir de bonnes connaissances sur les phénomènes de transfert de chaleur qui se déroulent au sen de la pile. Les équations mathématiques ont été modélisées dans deux cas : unidimensionnel et bidimensionnel. Un programme informatique en "visual fortran 6.0" a été développé. La méthode des différences finies a été choisie pour la résolution de l'équation d'énergie dans la partie solide (l'électrolyte) pour 1D; la méthode des volumes finis a été choisie pour la résolution de ces équations pour 2D et la bibliothèque mathématique numérique IMSL est utilisé pour résoudre le système matriciel. Nous avons conclu les résultats suivants :

- Le mode de transfert de chaleur par rayonnement est négligeable devant la conduction dans les électrodes.
- Le mode de transfert de chaleur par rayonnement est considérable dans l'électrolyte si on augmente le coefficient d'absorption ou l'épaisseur de l'électrolyte.
- Pour faire apparaître l'effet de source radiative dans la pile à combustible on peut étudier en 1D seulement.

D'après les résultats obtenus, nous proposons :

- L'étude du champ de température avec une source radiative fonction de la densité de courant.
- L'influence de la source radiative sur la performance de la pile.

6. Références

- [1] Brioie Pascale ; Synthèse par pulvérisation cathodique et caractérisation d'électrolytes solide en couches minces pour piles à combustible à oxydes solides(SOFC) fonctionnant à température intermédiaire ; Thèse de doctorat, Institut National Polytechnique de Loraine, Ecole de Nancy. France (2005).
- [2] Kakac S., Pramuanjaroenkij A. et Zhou XY.; A review of numerical modeling of solid oxide fuel cells.; International Journal of Hydrogen Energy; **32**, 761-86 (2007).
- [3] Meng Ni.; Computational fluid dynamics modeling of a solid oxide electrolyzer cell for hydrogen production.; Int J Hydrogen Energy; **34**, 7795-7806 (2009).
- [4] Kordesch K.et Simader G.; Fuels Cells and Their Applications, ed VCH; Fuel Cell Handbook (5ème édition), EG&G Services, Parson, Inc. Sciences Applications International Corporation (CD ROM) (1996).
- [5] Patankar S. V.; Numerical heat transfer and fluid flow; New York; McGraw-Hill Book Company; (1980).
- [6] Chan S.H., Ho. H.K. et Tian. Y.; Multi-level modeling of SOFC–gas turbine hybrid system; International Journal of Hydrogen Energy; **28**, 889-900 (2003).
- [7] Mahcene H, Ben Moussa H, Bouguettaia H,Bechki D . Study of species distribution and solid oxide fuel cells performance in a 2-D model. PROCEEDINGS OF THE GLOBAL CONFERENCE ON GLOBAL WARMING 2009 July 5-9, .Istanbul, Turkey (2009)
- [8] Sánchez D., Chacartegui R., A. Muñoz, T, Sánchez On the effect of methane internal reforming modelling in solid oxide fuel cells. Int J Hydrogen Energy; **33**: 1834-1844 (2008).
- [9] Luca Andreassi, Giampiero Rubeo, Stefano Ubertini, Piero Lunghi, Roberto Bove; Experimental and numerical analysis of a radial flow solid oxide fuel cell; Int J Hydrogen Energy; **32**, 4559-4574 (2007).
- [10] Anchasa Pramuanjaroenkij, Sadik Kakaç, Xiang Yang Zhou; Mathematical analysis of planar solid oxide fuel cells; International Journal of Hydrogen Energy; **33**, 2547-2565 (2008).

- [11] Roberto Bove Piero Lunghi, Nigel M. Sammes.; SOFC mathematic model for systems simulations. Part 2: from a micro-detailed to macro-black-box model; International Journal of Hydrogen Energy; **30**, 189-200 (2005).
- [12] Roberto Bove, Piero Lunghi et Nigel M. Sammes; SOFC mathematic model for systems simulations. Part one: from a micro-detailed to macro-black-box model; International Journal of Hydrogen Energy; **30**, 181–187 (2005).
- [13] Dokamaingam P., Assabumrungrat S., Soottitantawat A. et Laosiripojana N.; Modeling of SOFC with indirect internal reforming operation: Comparison of conventional packed-bed and catalytic coated-wall internal reformer; Int J Hydrogen Energy; **34**, 410-421 (2009).
- [14] K.J. Daun, S.B. Beale, F. Liu et G.J. Smallwood; Radiation heat transfer in planar SOFC electrolytes; Journal of Power Sources **157**, 302-310 (2006).