

## APPLICATION D'UNE PILE A COMBUSTIBLE PEMFC SUR UN VEHICULE DE TRANSPORT

DOKKAR Boubekeur<sup>1\*</sup>, SETTOU Noureddine<sup>1</sup>, IMINE Omar<sup>2</sup>, SAIFI Nadia<sup>1</sup>,  
NEGROU Belkhir<sup>1</sup>, BENMOUSSA Hocine<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Laboratoire de valorisation et promotion des ressources sahariennes (VPRS),  
Université Kasdi Merbah Ouargla, Algérie

<sup>2</sup>Faculté de Mécanique Université Mohammed Boudiaf Oran, Algérie

<sup>3</sup>Département de Mécanique Université Hadj Lakhdar Batna, Algérie

\*e-mail : [boubekeur.ogx@gmail.com](mailto:boubekeur.ogx@gmail.com)

**RESUME** : Les moyens de transport alimentés en combustible fossile sont à l'origine de 23 % des émissions polluantes. Durant les 30 dernières années, ces émissions ont été réduites grâce à des mesures prises sur l'amélioration des carburants, la combustion, la filtration et l'introduction progressive des moteurs alternatifs. Mais c'est sur la pile à combustible, alimentée en hydrogène et qui se caractérise par l'absence des émissions polluantes, que les constructeurs automobiles misent. La pile à combustible de type à membrane échangeuse de protons (PEMFC) est la pile la plus utilisée sur les véhicules, mais elle nécessite une bonne gestion d'eau pour son fonctionnement optimal. Dans le but d'analyser le comportement d'eau dans la pile, nous présentons une simulation de l'écoulement de mélange des gaz dans la couche de diffusion des gaz (GDL) dans la zone cathodique. L'étude se base sur un modèle mathématique simplifié; en supposant que la couche catalyseur comme interface et en utilisant la corrélation de Burggman pour le coefficient de diffusion. La solution numérique est calculée à l'aide de la méthode des volumes finis avec un programme écrit en Fortran. Les résultats obtenus sont en bonne concordance avec les plus récentes expériences reportées dans la littérature.

**MOTS-CLES** : véhicule, carburants alternatifs, hydrogène, pile PEMFC, gestion d'eau.

### 1 - Introduction

Un taux de 97 % des consommations d'énergie du secteur des transports est assuré par le pétrole et qui restera prépondérant en absence de solution de substitution à grande échelle. Les transports utilisaient un tiers de la production mondiale de pétrole en 1973, contre plus de 50 % aujourd'hui. Le parc automobile actuel est de 600 millions de voitures particulières et 200 millions de véhicules utilitaires ; il va doubler dans les trois prochaines décennies [1]. Donc d'après certains experts la pénurie de pétrole pourrait progressivement s'installer en un peu plus d'un siècle. Les rejets de CO<sub>2</sub>, principales causes à effet de serre (60 %), qui proviennent à près de 80 % de la combustion d'énergies fossiles. Les oxydes de soufre et d'azote, peuvent rendre les précipitations plus acides une fois convertis en acides sulfuriques et nitriques [2]. La diminution des émissions polluantes par l'introduction des moteurs et carburants alternatifs, n'aboutira pas à une résolution complète du problème. Donc il est devenu indispensable de trouver des alternatives énergétiques possédant les mêmes propriétés que les hydrocarbures en termes de stockage et de transport. Dans ce contexte, l'hydrogène s'avère être un candidat très sérieux. La pile à combustible, alimentée en hydrogène, s'impose alors naturellement comme le chaînon manquant en transformant l'énergie chimique en énergie électrique. Ce mode de production d'énergie devient plus attirant, et en particuliers la pile à combustible de type PEMFC (Proton Exchange Membrane Fuel Cell) qui est le type le plus commode au parc roulant. Des véhicules à pile à combustible sont au stade de prototypes et une commercialisation sera dans les proches avenir. Cependant, il reste de bien maîtriser certains aspects de coût et de fonctionnement tel que la gestion d'eau. Parmi les éléments principaux qui règlent la gestion d'eau dans la pile on distingue la couche de diffusion des gaz (GDL) au côté cathode [3]. Les modèles disponibles dans la littérature pour le transport des espèces dans la GDL sont des modèles plus au moins compliqués comme ceux appliqués par S. Um et al. [4] et P. Seigel [5], mais la tendance c'est de faire concevoir des modèles plus réduits et représentatifs. A cet effet nous présentons un modèle simple inspiré du modèle opté par J. Stockie et

al. [6], tout en considérant la couche très fine de catalyseur comme interface [7] et en appliquant des conditions aux limites plus détaillées données par C. Bao et al. [8].

## **2. Les alternatifs aux carburants et moteurs conventionnels**

### **2.1. Les alternatifs aux carburants**

La diversification des sources d'énergie utilisées dans les transports, avec une introduction progressive des carburants qui offrent de nettes améliorations sur le plan des émissions de CO<sub>2</sub>.

Les biocarburants sont des carburants d'origine végétale (biodiesel, Ethanol et ETBE), ils peuvent être mélangés aux carburants actuels sans dommage ni adaptation particulière du véhicule. L'objectif étant de passer d'un ajout de quelque % à plus de 20 %. La production de biocarburants dans le monde s'élève actuellement à 41 millions de tonnes [9].

Le Gaz de Pétrole Liquéfié carburant (GPLc) est un mélange de butane et de propane, il présente des faibles rejets de soufre, plomb et benzène. Au niveau mondial, le parc de véhicules utilisant le GPL progresse régulièrement et atteint l'ordre de 10 millions d'unité. L'inconvénient du GPLc réside dans le surcoût occasionné lors de l'achat du véhicule car ces véhicules sont majoritairement équipés d'un système de bicarburant (Essence - GPLc) [9].

Le gaz naturel utilisé pour les véhicules (GNV) est une voie qui offre de nombreux avantages, parmi lesquels, une aptitude réelle à réduire l'effet de serre (- 25 % d'émissions de CO<sub>2</sub> par rapport à l'essence) et des réserves plus importantes que le pétrole. Son utilisation est compatible avec les progrès des moteurs. Sur les 800 millions de véhicules dans le monde, 4 millions roulent au GNV [9].

Les carburants liquides de synthèse, produits par une étape de gazéification à partir d'autres ressources que le pétrole telles que la biomasse (bois ou paille) et d'autres énergies fossiles (charbon/CTL ou gaz/GTL). Deux unités de GTL et une unité de CTL fonctionnent aujourd'hui dans le monde [9]. Le procédé GTL permet, à partir de gaz naturel, d'obtenir un carburant diesel de très bonne qualité : sans soufre, ni aromatiques.

### **2.2. Les alternatifs au moteur conventionnel**

Par motorisation alternative, on entend soit des moteurs dédiés à un nouveau type de carburant tel que gaz naturel, biocarburant ou hydrogène soit une remise en cause profonde de l'architecture des moteurs actuels.

Les moteurs à gaz naturel sont souvent issus de la conversion de moteurs classiques, puisque le marché relativement réduit n'incite pas des développements lourds spécifiques. Mais des moteurs conçus pour le gaz naturel sont en cours de développement et permettent une réduction des émissions de CO<sub>2</sub> de l'ordre de 5 à 10 % par rapport à un moteur diesel.

Le véhicule électrique, entraîné par l'électricité produite d'une batterie rechargeable, offre des performances et une autonomie très réduites, ce qui semble devoir limiter son développement en l'absence de marge de progrès réelle. Le "tout électrique", sauf rupture technologique brutale et inattendue, est donc appelé à rester une solution de niche.

Le véhicule hybride avec double alimentation, carburant ou électricité, permet l'optimisation de l'utilisation de l'énergie à bord du véhicule, la réduction des émissions de polluants et de CO<sub>2</sub> (un fonctionnement tout électrique est possible en ville). Le coût de ce véhicule reste encore élevé, des constructeurs ont mis sur le marché plusieurs modèles. Il va falloir attendre au moins dix ans pour que la technologie de l'hybride total se diffuse.

## **3. L'hydrogène et la pile à combustible**

Le véhicule à l'hydrogène, avec uniquement la vapeur d'eau à l'échappement, peut apparaître comme une solution inépuisable et propre. On pourrait envisager l'utilisation de l'hydrogène dans des moteurs à combustion interne dédiés à l'hydrogène. Cette solution est souvent imaginée comme une étape vers la pile à combustible puisqu'elle permet de commencer la validation de toute la filière hydrogène. Mais c'est sur la pile à combustible, alimentée à l'hydrogène et qui offre un

meilleur rendement énergétique que celui des moteurs traditionnels, que les constructeurs automobiles misent, même si de nombreuses difficultés demeurent pour sa mise en œuvre à grande échelle.

**4. Comparaison entre la pile à combustible et le moteur à Combustion Interne**

Un avantage particulier de la cellule carburant c'est son rendement très élevé qui est de 70 à 95 % par contre les moteurs à combustion interne tourne autour 40 % [10] (voir Fig.1). Cette comparaison se base sur le rendement thermodynamique de la pile à combustible ( $\Delta G/\Delta H$ ) et le rendement de Carnot de moteur  $(T_c - T_f)/ T_c$ . Ce dernier rendement est limité par les températures des sources froide et chaude. En plus la cellule à carburant se caractérise par l'absence des pièces mobiles ce qui réduit l'usure par frottement et le degré sonore de la pile.

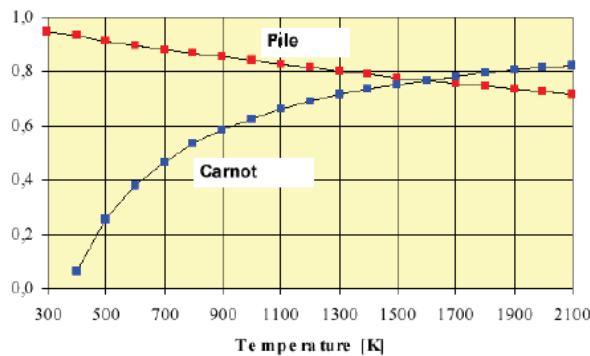


Figure 1. : Comparaison de rendement théorique [10]

**5. Les différents types de piles à combustible**

Les piles à combustible se différencient généralement selon la nature de leur Electrolyte. Elles sont classées sur la base du niveau de leur température de fonctionnement (voir tableau 2). On distingue les types suivant : la pile à membrane électrolyte polymérique (PEMFC), la pile à méthanol direct (DMFC), la pile à électrolyte alcalin (AFC), la pile à acide phosphorique (PAFC), la pile à oxyde solide (SOFC ) et la pile à carbonates fondus (MCFC).

Tableau 2 : Caractéristiques des piles à combustible [5]

Type de la pile	PEMFC	DMFC	AFC	PAFC	MCFC	SOFC
Ion mobile	$H^+$	$H^+$	$OH^-$	$H^+$	$CO_3^{2-}$	$O^{2-}$
Température de fonction °C	50 -100	80	50 -200	~ 220	~ 650	600-1000
Densité de puissance kW/m <sup>2</sup>	2,6 - 5	0,6	0,7-8.1	0,9-3,2	0,75- 1,8	1,5 - 6,5
Rendement de l'assemblage %	40 - 55	25-30	45-60	40 - 50	50 - 60	50 - 65
Temps de démarrage	Sec-min	Sec-min	Min.	Heures	Heures	Heures

## 6. La pile à combustible PEMFC et ses éléments constitutifs

### 6.1. Définition

Les piles PEMFC ont des multiples applications autant dans le domaine automobile que dans le domaine stationnaire et portable. Elles présentent plusieurs avantages : non sensibles au CO<sub>2</sub> (comme l'est l'AFC), faible température de fonctionnement permettant un démarrage rapide, grande souplesse de fonctionnement et une meilleure gestion thermique, multi usage et couvrent un large spectre de puissance. Cependant, elles présentent encore des problèmes qui doivent être réglés : très sensibles au CO, faible valorisation de la chaleur et coût élevé de catalyseur (Platine).

### 6.2. Principe de fonctionnement

Un élément de la pile transforme directement l'énergie chimique d'une réaction en énergie électrique grâce aux nombres d'électrons échangés dans les réactions électrochimiques élémentaires de l'hydrogène/oxygène (voir fig. 2). L'atome d'hydrogène se dissocie au niveau de l'anode en proton d'hydrogène en libérant des électrons, les protons traversent l'électrolyte pour arriver à la cathode où ils réagissent avec l'oxygène pour former l'eau selon les réactions chimiques suivantes [10] :

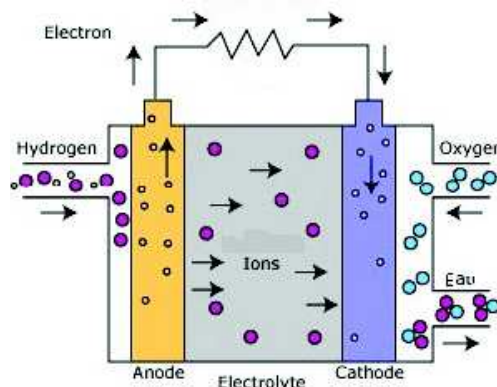
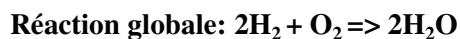


Figure 2 : Principe de fonctionnement de la pile PEMFC [10]

## 7. Les phénomènes physicochimiques dans la pile PEM

La réaction chimique idéale précédemment présentée va s'accompagner de pertes supplémentaires. Les différents phénomènes physico-chimiques au sein d'une pile à combustible sont : les phénomènes fluidiques (flux gazeux), la diffusion des gaz, les phénomènes ohmiques (transport des protons), le transport d'eau, les phénomènes électrochimiques et les phénomènes thermiques (flux thermiques). Dans notre travail on se concentre sur la gestion d'eau qui présente un phénomène essentiel pour le bon fonctionnement de la pile.

### 8. Transport d'eau

L'eau est produite par la réduction de l'oxygène (coté cathode) et passe à travers la zone de diffusion cathodique et à travers la membrane. La figure 3 présente un schéma des principaux phénomènes antagonistes coexistants au niveau de la membrane :

- L'électro-osmose, phénomène qui se définit par un entraînement des molécules d'eau qui se trouvent autour des sites sulfonates, dans le sillage des protons migrant sous l'effet du champ électrique. Ce phénomène entraîne les molécules d'eau de l'anode vers la cathode.
- Le transport dû au gradient de concentration de molécules d'eau qui est plus important au côté cathode. Ce phénomène de diffusion entraîne les molécules de la cathode vers l'anode.

L. Gerbaux [11] a remarqué qu'à partir d'un certain niveau de courant, l'électro-osmose était mal compensé par la diffusion. Dans notre travail nous avons étudié la couche de diffusion des gaz du côté cathode qui joue le rôle principal dans le phénomène de transport d'eau dans la pile.

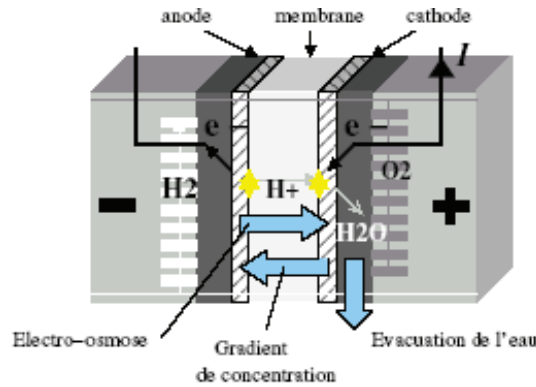


Figure 3 : Phénomènes de transport d'eau [12]

**9. Modèle mathématique de la couche de diffusion**

La couche de diffusion des gaz (GDL) dans la zone cathodique de la pile se caractérise par la structure présentée avec l'ensemble des éléments cathodiques sur la figure 4. Cette couche est un milieu poreux dans laquelle passent les réactants gazeux et la vapeur d'eau.

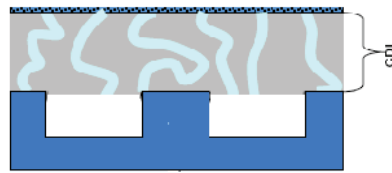


Figure 4 : Structure de la couche de diffusion

**9.1. Les hypothèses**

- Le mélange des gaz est assimilé à un gaz parfait.
- La température de la cellule est constante.
- L'écoulement des gaz est laminaire et incompressible, mais la densité est variable.
- La viscosité de mélange des gaz, constante, est calculée à partir des conditions d'entrée.
- La structure de la couche de diffusion est isotrope et homogène.
- Les équations de quantité de mouvement seront réduites en équations de Darcy.
- Le domaine de calcul est bidimensionnel.
- La réaction électrochimique à la couche catalyseur se passe d'une façon instantanée.

**9.2. Les équations régissantes**

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U}) = 0 \tag{1}$$

$$\mathbf{U} = -\frac{K}{\varepsilon \mu} \nabla P \tag{2}$$

$$\frac{\partial C_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{U} C_k) = \nabla \cdot (D_k^{eff} \nabla C_k) \tag{3}$$

Le vecteur des vitesses de mélange  $\mathbf{U}$  est exprimé en fonction de la concentration de mélange  $C$  à l'aide de loi des gaz parfaits  $P = CRT$ , et la concentration de mélange est exprimée par la relation  $C = [\rho + (M_z - M_o)C_o + (M_z - M_v)C_v] / M_z$ .

### 9.3. Les conditions aux limites

Les inconnus sont  $\rho$ ,  $C_{O_2}$ ,  $C_{H_2O}$ , donc aux frontières extérieures du domaine de calcul on utilise la condition de flux nul sauf pour l'entrée d'air et avec la couche de catalyseur :

- A l'entrée d'air on prend les valeurs moyennes régnant dans le canal d'air.
- Sur la surface (paroi) de la plaque collectrice du courant on applique les conditions des flux et vitesses nuls.
- Sur les axes passant par les moitiés des ouvertures des canaux des gaz on applique la condition de symétrie.
- A la frontière avec la couche catalyseur les flux diffusifs des espèces sont exprimés en fonction de la densité de courant local.

### 9.4. Les procédures de la résolution numérique

Les équations régissant sont discrétisées à l'aide de la méthode des volumes finis [13]. Une interpolation à différence centrée est appliquée sur les variables de l'espace et un schéma implicite pour le variable temporelle. Les systèmes d'équations linéaires sont résolus à l'aide de la méthode itératif de Gauss-Seidel. Un programme est élaboré à l'aide de langage FORTRAN pour exécuter les calculs [14].

## 10. Résultats et discussions

### 10.1. Profils des concentrations de la vapeur d'eau

La courbe illustrée sur la figure 5 présente les fractions molaires de la vapeur d'eau dans la GDL ; elles montrent une bonne concordance avec les résultats expérimentaux de C. Bao et al. [8]. La concentration de vapeur d'eau croit le long du sens positif de l'axe des y au fur et mesure que la vapeur d'eau est produite, elle atteint la plus forte teneur à la surface de la couche catalyseur sur l'axe de la moitié de la plaque collectrice.

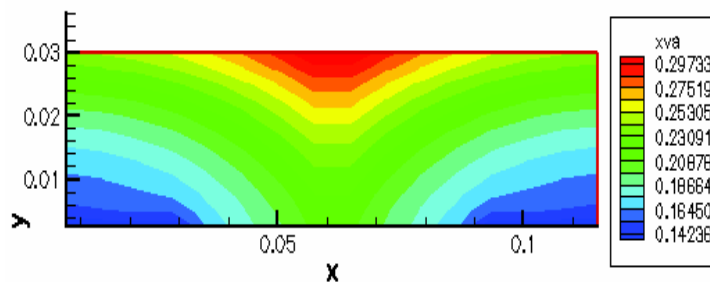


Figure 5 : Fraction molaire de vapeur d'eau

### 10.2. Influence des paramètres opératoires

Le présent système à canal d'air conventionnel, le point le plus critique pour le contrôle de la concentration de vapeur d'eau c'est le point qui se trouve à la proximité de la surface de catalyseur et sur l'axe passant par la moitié de la plaque collectrice. Donc on choisit ce point comme point de référence pour le contrôle de concentration de vapeur d'eau. Les effets de la variation des paramètres opératoires tel que l'humidification et la stoechiométrie d'air d'admission et la pression au canal d'air sont illustrés respectivement sur les figures 6 ,7 et 8.

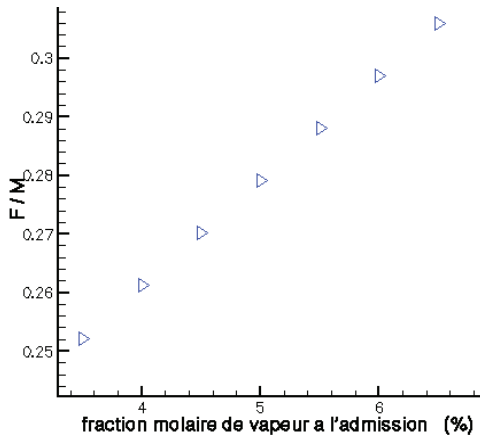


Fig. 6: Effet de l'humidification d'air

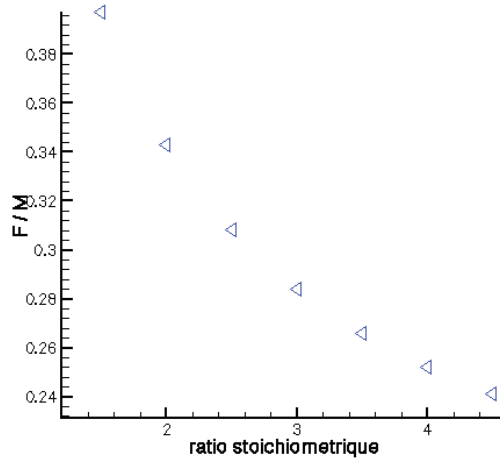


Fig. 7 : Effet de la stoichiométrie d'air

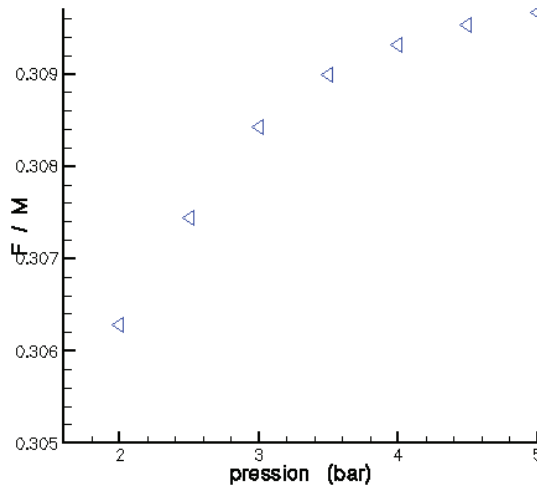


Fig. 8 : Effet de la pression d'air

### 11. Conclusion

Le transport routier se développe dans des proportions tout aussi impressionnantes, puisque dans les trente prochaines années, le nombre de véhicules en circulation progressera de 100 %. Le phénomène est préoccupant à deux titres : les réserves pétrolières non renouvelables et la pollution importante engendrée par les transports. La consommation d'énergie dans le domaine de transport, qui représente le pourcentage le plus haut de pollution, est très difficile de le remplacer par les autres énergies renouvelables. La voiture à pile à combustible serait donc le véhicule « zéro émission » s'affranchissant des limites du véhicule électrique à batteries, même si de nombreuses difficultés demeurent pour sa mise en œuvre à grande échelle.

Sur les effets de la variation des paramètres on constate que l'augmentation du ratio stoichiométrique de l'air de 2,5 jusqu'à 4,5 provoque une nette diminution de la concentration de vapeur d'eau dans le point critique ce qui implique que l'augmentation de flux d'air facilite l'évacuation de l'eau de GDL ce qui réduira le problème de blocage des milieux poreux. Par contre l'augmentation de pression de 2 bars jusqu'à 5 bars provoque une forte production d'eau qui est due à un fonctionnement à haute puissance. L'aboutissement à ces deux avantages nécessite une étude de dimensionnement et d'optimisation de la consommation électrique du compresseur d'air.



Le présent modèle partiel ne permet pas de tracer la courbe de polarisation de la cellule ce qui nécessite le passage au modèle complet qui englobe toutes les couches de la cellule et permettra de déterminer la puissance de la cellule et comparer les résultats de simulation avec celles obtenus par l'expérience. Les deux thématiques (compresseur d'air et modèle complet) font l'objet d'articles étudiés et publiés séparément.

## Références

- [1] [www.ifp.fr](http://www.ifp.fr), Energie et environnement, Site consulté le : 05/02/2008.
- [2] [www.chu-rouen.fr](http://www.chu-rouen.fr), Pluie acide, Site consulté le : 07/02/2008.
- [3] James Larminie et Andrew Dicks; "Fuel Cell Systems Explained", Second Edition, John Wiley & Sons Ltd, England, 2003.
- [4] S. Um, C.Y. Wang et K. S. Chen; "Computational Fluid Dynamics Modeling of Proton Exchange Membrane Fuel Cells," J. Electrochem. Soc, Vol 147, No 12, pp.4485-4493, 2000
- [5] N. Phillip Siegel; "Development and Validation of a Computational Model for a Proton Exchange Membrane Fuel Cell", Doctorat Thesis, Virginia Polytechnic and State University, 2003.
- [6] J. M. Stockie, K. Promislow et Brian R. Wetton; "A finite volume method for multicomponent gas transport in a porous fuel cell electrode". Int. J. Numer. Meth. Fluids 1, pp1-22, 2001.
- [7] J. Hwang, C. Chen, R. Savinel, C. Liu et J. Wainright, "A three-dimensional numerical simulation of the transport phenomena in the cathodic side of a PEMFC", Journal of Applied Electrochemistry 34, pp 217-224, 2004.
- [8] C. Bao, M. Ouyang et B. Yi, "Analysis of Water Management in Proton Exchange Membrane Fuel Cells", Tsinghua Science and Technologie, vol. 11, N° 1, pp 54-64, 2006.
- [9] [www.anglure-sous-dun.fr](http://www.anglure-sous-dun.fr), carburants alternatifs, Site consulté le : 15/02/2008.
- [10] R. VanLeeuwen, R. Forman, F. Henderson et D. Warchuck, "Review and Analysis of Proton Exchange Membrane Fuel Cells", Mech-320 Thermodynamics Final Design Project, USA, 2003.
- [11] L. Gerbaux ; "Modélisation d'une pile à combustible de type hydrogène/air et validation expérimentale", Thèse de doctorat, Institut National Polytechnique de Grenoble, 1996.
- [12] Guillaume Fontès, "Modélisation et caractérisation de la pile PEM pour l'étude des interactions avec les convertisseurs statiques", Thèse de doctorat, Institut National Polytechnique de Toulouse, 2005.
- [13] Suhas Patankar ; "Numerical Heat Transfer and Fluid Flow", Hemisphere, Washington D.C., 1980.
- [14] Dokkar Boubekeur, "Etude et simulation de la gestion d'eau dans la zone cathodique d'une pile à combustible PEMFC, Mémoire de magister, Université Kasdi Merbah Ouargla, Algérie, 2007.