



Université Kasdi Merbah Ouargla

**FACULTE DES SCIENCES
ET SCIENCES DE L'INGENIEUR**

N° d'ordre :
N° de série :

DEPARTEMENT DES SCIENCES DE LA MATIERE

Mémoire

Présenté pour l'obtention du diplôme de

MAGISTERE

Spécialité : physique

Option : énergétique et thermique

Présenté par :

Meddour Nedjma

Thème :

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

Soutenu publiquement le : 16 / 06/ 2010

Devant le jury composé de :

Mr. Bouguettaia Hamza	Professeur	Université d'Ouargla	Président
Mr. Aiadi Kamel Eddine	MC	Université d'Ouargla	Examineur
Mr. Saidi Moukhtar	Professeur	Université d'Ouargla	Examineur
Mr. H. Ben Moussa	Professeur	Université de Batna	Rapporteur
Mr. H. Mohcene	M.A	Université d'Ouargla	Invité

Dédicaces

Ce mémoire est dédié

*A mes regrettés parents qui m'ont toujours poussé et motivé
dans mes études.*

*A mon mari qui m'a toujours encouragé et mon petit
fils Islam*

*A mes frères et sœurs, spécialement
Rabiaa, à ma famille*

A tous mes amis (Blala, zeineb...etc.) et collègues

A tous ceux qui m'ont aidé à finir ce mémoire.

REMERCIEMENTS

Au terme de ce travail, je tiens à exprimer mes vifs remerciements :

Avant tout au dieu tout-puissant qui m'a toujours soutenu.

A mes chers parents.

*Au jury de Messieurs, le Professeur **BOUGUETTAIA HAMZA**, le Professeur **SAIDI MOUKHTAR** et le Docteur **AIADI KAMEL EDDINE** de leur présence et leur suis reconnaissant d'avoir pris le temps d'examiner ce mémoire.*

*Au Professeur **BEN MOUSSA**, de l'Université de Batna, pour l'encadrement.*

*A **M. MOHCEN** pour m'avoir guidé, encouragé et conseillé. Je tiens à mentionner le plaisir que j'ai eu à travailler avec lui.*

*Je remercie tous ceux sans qui ce mémoire ne serait pas ce qu'elle est. Je pense ici en particulier à **KADRI LAMINE**.*

Je tiens également à remercier mon mari, tous mes frères et amis qui ont cru en moi, m'ont encouragé et m'on donné la force d'aller jusqu'au bout.

Je pense enfin fortement et à tous ceux qui ont contribué de près ou de loin à la réalisation de ce travail.

Introduction générale

Pour ses besoins et sa survie, l'homme utilise depuis longtemps les richesses de son environnement. Cependant, depuis quelques années une prise de conscience collective de la nécessité de protéger cet environnement est apparue. Elle s'illustre notamment par différents protocoles qui voient le jour ou le durcissement des normes de rejets des industries et des particuliers dans l'environnement. Enfin, l'épuisement à terme des richesses naturelles fossiles (pétrole, gaz...) conduit à les économiser en améliorant des solutions existantes, mais aussi en recherchant de nouvelles solutions alternatives à la production d'énergie pour la satisfaction de nos besoins.

Les piles à combustible produisent de l'énergie électrique par un processus électrochimique. L'énergie électrochimique issue de la réaction par laquelle l'hydrogène et l'oxygène se combinent pour former l'eau peut être convertie en énergie électrique et en chaleur par la pile à combustible. Cette réaction peut se produire dans un domaine de température très large (80-1000°C). Les piles SOFC travaillent à haute température, de l'ordre de 600 à 1000°C actuellement. Ces hautes températures peuvent, dans une certaine mesure, être avantageuses car la chaleur dégagée peut être mise à profit pour d'autres systèmes (ex: couplage aux turbines). Cependant, les contraintes résultantes sur le choix des matériaux (aspects mécaniques, chimiques, ...etc) ont limité les développements technologiques et entraînent des coûts élevés. Deux développements ont cependant rendu la pile à combustible à nouveau intéressante d'une part son rendement élevé, surtout apprécié pour les petites installations d'autre part la conversion électrochimique de combustible en courant continu qui ne produit pratiquement pas de polluants. Cela est valable pour tous les types de piles à combustible. L'existence de plusieurs types de piles à combustible est un avantage important. Certaines peuvent utiliser les combustibles classiques pour une conversion plus ou moins efficace en courant continu, d'autres nécessitent pour leur fonctionnement de l'hydrogène pur qui doit être produit artificiellement. L'énergie nécessaire pour la production d'hydrogène peut dans les meilleurs des cas être à nouveau récupérée. L'hydrogène n'est qu'un moyen de transport de l'énergie, qui doit d'abord être disponible; La diffusion des piles à combustible à basse température est donc limitée pour des raisons physiques dues à l'hydrogène. Les piles à combustible à haute température peuvent convertir directement les hydrocarbures. Elles sont déjà adaptées à l'utilisation du gaz naturel, à l'avenir, elles pourront aussi utiliser du biogaz. L'intérêt pour les piles à électrolyte solide ou à carbonates fondus croît régulièrement alors qu'un certain désenchantement est observé pour les piles à basses températures. Les recherches actuelles sont orientées sur la diminution de température de fonctionnement de

SOFC tout en conservant des propriétés optimales.

D'où, le but de notre travail est de faire apparaître l'effet de mode de transfert de chaleur par rayonnement comme une source en chaque élément de la pile et 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 de connaître les notions élémentaires de base sur ces piles. Le mémoire est structuré de la façon suivante:

Au cours du premier chapitre, après un bref rappel historique, une étude est présentée sur le principe de fonctionnement des piles à combustible ainsi que sur les différentes technologies existantes et les applications industrielles des piles. La modélisation thermodynamique et électrochimique des piles à combustible se trouvent dans ce chapitre. Le second chapitre est relatif à une étude bibliographique. Le troisième chapitre est consacré à la modélisation et discrétisation numérique des équations régissant le phénomène de transfert de chaleur et de masse dans le cœur de la cellule. Le quatrième chapitre regroupe les résultats de la simulation unidimensionnelle et bidimensionnelle. Enfin on termine par une conclusion générale et des recommandations pour les travaux futurs sur ce domaine.

I.1 Historique

Le principe de la pile à combustible fut mis en évidence en 1839 par Sir William Grove, Juriste à la Royal Institution de Londres. Il étudia ce qui se révélera être un précurseur de ce type de générateur électrochimique en plaçant du platine dans des tubes remplis d'hydrogène et d'oxygène et en plongeant le tout dans de l'acide sulfurique. Evidemment, il constata une faible tension aux bornes de la cellule, mais il avait aussi saisi l'importance du contact à trois phases (gaz, électrolyte et platine) nécessaire à la production d'énergie. Il consacra ainsi son temps à la recherche d'un électrolyte permettant la production d'un courant électrique stable et fit remarquer, dès le départ, l'intérêt commercial que pouvait présenter un tel système si l'hydrogène venait à remplacer le bois et le charbon en tant que source énergétique.

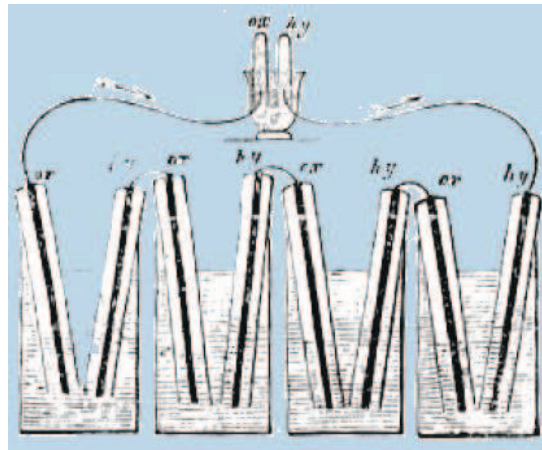


Figure I.1 : Expérience de Sir William Grove en 1839[1].

Une étape clé dans le développement des piles à combustible intervint en 1932. Francis Bacon mit au point une pile efficace en portant ses efforts sur les catalyseurs à base de nickel, moins coûteux que le platine. Sa pile fonctionnait avec de l'hydrogène et de l'oxygène, et il utilisa un électrolyte alcalin moins corrosif que ceux de ses prédécesseurs. Francis Bacon réussit, 27 ans plus tard, à surmonter des problèmes d'ordre technique en présentant une pile d'une puissance de 5 kilowatts, capable d'alimenter un poste de soudure. Cette même année, Harry Karl Ihrig (travaillant pour l'Allis Chalmers Manufacturing Company) présenta un tracteur équipé d'une pile alimentant un moteur d'une puissance de 20 chevaux.

Les plus grandes avancées sur le développement des piles à combustible provinrent certainement de la NASA dès la fin des années 1950. L'agence spatiale américaine cherchait alors à mettre au point un générateur électrique capable de fournir de l'énergie à bord des futures missions spatiales. Après avoir écarté les sources nucléaires, trop risquées, les batteries, trop lourdes et à durée de vie trop limitée, et l'énergie solaire, la NASA se tourna

vers les piles à combustible. Plus de 200 contrats de recherche furent alors signés, destinés à couvrir tous les aspects du fonctionnement des piles à combustible. Nous savons maintenant l'importance du rôle des piles dans le succès des missions Gemini et Apollo.

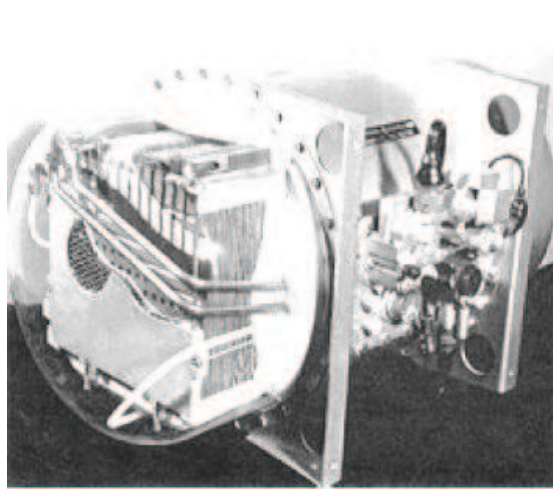


Figure I. 2 : pile à combustible du programme Gemini [1].

Le succès de ces piles laissa augurer les perspectives les plus optimistes dès la fin des années 1960 : les piles pourraient constituer une réponse aux problèmes énergétiques du monde entier. Ce qui fit le succès des piles à bord des missions spatiales américaines (faible encombrement, hautes performances, peu ou pas d'émissions toxiques, production d'eau réutilisable) pourrait permettre de réaliser des centrales électriques stationnaires.

Malheureusement, ces piles, utilisant des électrolytes alcalins, nécessitaient un apport d'hydrogène pur, ce qui n'était techniquement pas compatible avec l'utilisation de combustibles ordinaires (gaz naturel, charbon) et peu coûteux comme source d'hydrogène. L'hydrogène ainsi produit contenait en effet des impuretés dommageables pour la pile (monoxyde de carbone, dioxyde de carbone), ce qui écourtait considérablement la durée de vie des composants électrochimiques tels qu'ils avaient été conçus par la NASA.

A ce jour et malgré les avancées technologiques réalisées au cours des trente dernières années, la commercialisation des piles à combustible reste marginale.

Depuis 160 ans, les chercheurs ont donc tenté d'améliorer les performances des piles d'un point de vue électrique, chimique et physique. De ces nombreuses recherches ont émergé cinq grandes familles de piles à combustible, classées selon le type d'électrolyte utilisé : les piles alcalines (AFC pour Alkaline Fuel Cells), les piles à membrane échangeuse de protons (PEMFC pour Proton Exchange Membrane Fuel Cell), les piles à acide phosphorique (PAFC pour Phosphoric Acid Fuel Cell), les piles à oxyde solide (SOFC pour Solid Oxide Fuel Cell)

et les piles à carbonate fondu (MCFC pour Molten Carbonate Fuel Cell). Ces distinctions dans le mode de fonctionnement des différentes piles conditionnent leur champ d'application [1].

I. 2. Les différents types des piles à combustible

Une distinction des différents types de piles à combustible peut être faite par plusieurs critères :

- La valeur du pH de l'électrolyte. On distingue des électrolytes acides et alcalins. Les ions mobiles dans l'électrolyte sont donc des cations ou des anions.
- La température : généralement, une pile basse température fonctionne à des températures inférieures à 200°C. Au delà, la pile est dite haute température.
- Le combustible : la plupart des piles à combustible convertissent de l'hydrogène. Il y en a qui font un reformage interne, c'est-à-dire que dans les conditions de température interne et en présence d'un catalyseur, d'autres gaz combustibles sont convertis en hydrogène.

I. 2 .1.Piles à membrane électrolyte polymérique (PEMFC)

Ces piles (PEMFC) sont actuellement les favorites pour la traction automobile. Développées dans les années 1960, elles ont été conçues pour des missions de la NASA. C'est la difficulté de la gestion de l'eau dans ces piles qui a alors conduit au choix des piles (AFC) pour les applications spatiales. Leur particularité est la membrane en polymère permettant un échange des ions H Elle fonctionne comme une solution acide, tout en ayant l'avantage d'être solide. La membrane standard est produite depuis 1967 par la société Dupont et vendue sous le nom de "Nafion". A l'heure actuelle, d'autres entreprises produisent également des membranes pour piles à combustible, notamment la société W. L. Gore & Associates qui les vend sous le nom de "Primer" [2].

I. 2 .2. La pile à acide phosphorique (PAFC)

Les piles à acide phosphorique (PAFC) ressemblent beaucoup aux piles PEM. La différence majeure est l'électrolyte qui est l'acide phosphorique (H_3PO_4). Cet acide supporte la présence de dioxyde de carbone et a donc été choisi dans les années 1970 pour des applications terrestres. Aujourd'hui, des systèmes de cogénération à base d'une pile à combustible du type PAFC sont disponibles avec des puissances comprises entre 250 kW et 1 MW. Des surfaces actives jusqu'à $1m^2$ ont été réalisées [2].

I. 2 .3. La pile alcaline (AFC)

Les piles alcalines (AFC) sont utilisées depuis les années 1960 dans des applications diverses dont le vaisseau Apollo de la NASA les piles (AFC) sont relativement peu coûteuses. D'une part les catalyseurs peuvent être des métaux peu précieux, et d'autre part l'électrolyte, une

solution alcaline, n'est pas difficile à trouver. Dans la plupart des cas, l'hydroxyde de potasse (KOH) est utilisé [2].

I. 2 .4. La pile à carbonates fondus (MCFC)

Dans les piles à carbonate fondu (MCFC), l'électrolyte est généralement un mélange de carbonates de lithium et potasse ou lithium et sodium. Celui-ci est tenu par une matrice en LiAlO_2 . A hautes températures, une conduction ionique des ions CO apparaît. Ces ions étant transportés de la cathode à l'anode, il est nécessaire d'alimenter la cathode en dioxyde de carbone (CO_2) qui est restitué à l'anode. Un circuit de récupération permet de ramener le CO_2 à la cathode. La haute température permet également d'utiliser du monoxyde de carbone (CO) comme combustible. Un autre avantage de la haute température est le fait que des catalyseurs non nobles peuvent être utilisés. Pour les MCFC, on utilise à l'anode du Ni-Cr ou du Ni-Al et à la cathode du NiO lithié. A l'heure actuelle, plusieurs piles de démonstration sont en service, entre autres une installation de 2 MW produite par Fuel Cell Energy et le produit Hot Module de MTU avec une puissance de 250 kW [2].

I. 2 .5. La pile à méthanol direct (DMFC)

Les piles à méthanol direct (DMFC) sont construites comme des piles du type (PEM). Il est possible de transformer à l'anode du méthanol (CH_3OH) directement en dioxyde de carbone, protons et électrons. Cette procédure est dite directe contrairement au fonctionnement indirect où le méthanol est transformé en hydrogène et dioxyde de carbone à l'extérieur de la pile à l'aide d'un reformeur [2].

I. 2. 6-Pile à oxyde solide(SOFC)

Les piles à oxyde solide (SOFC) sont très prometteuses dans les applications qui demandent une énergie constante variant peu avec le temps. Leur très haute température ne permet ni de démarrage rapide ni des changements brusques de charge. Le matériau de l'électrode est un matériau céramique conducteur d'ions O_2 , La haute température permet à la fois un fonctionnement avec des catalyseurs non nobles et avec du monoxyde de carbone (CO) comme combustible [2].

Les différents types de piles à combustible sont rappelés dans le tableau I.1.

Tableau I.1 Comparaison des Différents Types de piles à combustible [3]

Type de pile	AFC	PEMFC	DMFC	PAFC	MCFC	SOFC
Nom	Alcalin Fuel Cell	Proton Exchange Membrane Fuel Cell	Direct Methanol Fuel Cell	Phosphoric Acid Fuel Cell	Phosphoric Acid Fuel Cell	Solid oxide Fuel Cell
Type de charge transféré	Solution de KOH	Membrane conductrice de protons	Membrane conductrice de protons	Acide phosphorique	Li ₂ CO ₃ et KCO ₃ fondu dans une matrice LiAlO ₂	ZrO ₂ et Y ₂ O ₃
Ions dans l'électrolyte	OH ⁻	H ⁺	H ⁺	H ⁺	CO ₃ ²⁻	O ²⁻
Température de fonctionnement (en °C)	60-80	60-100	60-100	180-220	600-660	700-1000
Combustible	H ₂	H ₂ (pur ou reformé)	Méthanol	H ₂ (pur ou reformé)	H ₂ (pur ou reformé)	H ₂ (pur ou reformé)
Oxydants	O ₂ pur	Air	Air	Air	Air	Air
Domaines d'application	Spatial	Automobile, maritime, applications portables, cogénération	Applications portables	Cogénération	Cogénération, production centralisée d'électricité	Cogénération, production centralisée d'électricité, automobile, maritime

I.3.Pile à oxyde solide(SOFC)

I.3.1. 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, ou le monoxyde de carbone, pour former de l'eau et libérer des électrons.

Les réactions mises en jeu sont les suivantes:

À l'anode, avec un catalyseur au cermet de zirconium et nickel on a la réaction:



Où:



et à la cathode, dans les deux cas, à l'aide d'un catalyseur au manganite de luthane dopé au strontium, on a la réaction:



Le principe de fonctionnement de la pile SOFC (voire la figure I. 3) [4].

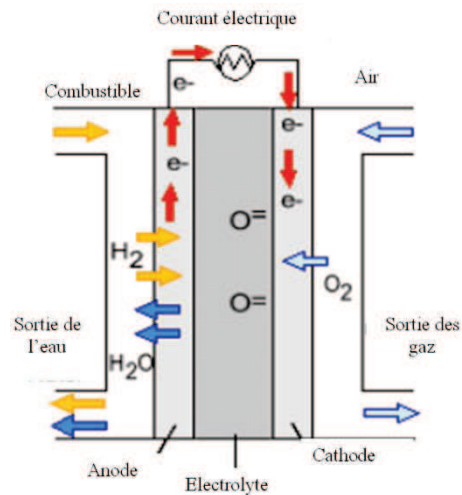


Figure I. 3: Schéma de principe de fonctionnement de la pile SOFC[5]

I. 3. 2. Les éléments de la pile (SOFC)

Les caractéristiques et propriétés des différents éléments constitutifs de la pile sont décrites ci-dessous.

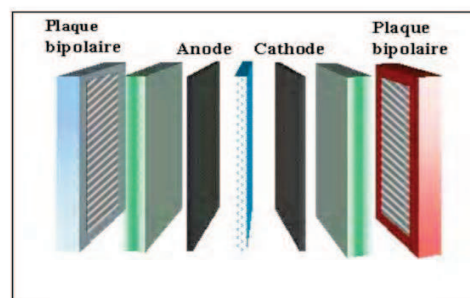


Figure I.4: Composition d'une cellule élémentaire d'une pile à combustible [6].

✚ L'électrolyte

Il doit être dense afin de séparer les compartiments de l'oxygène et du combustible et donc chimiquement stable vis-à-vis de ces deux atmosphères, c'est-à-dire dans une large gamme de pressions partielles d'oxygène ($0,21 < p_{\text{O}_2} < 10^{-21}$ atm). Son rôle est d'acheminer les ions O^{2-} de la cathode vers l'anode et de bloquer le passage des électrons afin d'empêcher tout court-circuit. Le matériau d'électrolyte doit donc être un bon conducteur ionique et un isolant

électronique. De plus, de bonnes propriétés thermiques et mécaniques sont indispensables pour résister aux chocs thermiques et au fluage. Les matériaux d'électrolyte les plus utilisés sont brièvement décrits ci-dessous.

- YSZ :

La zircone stabilisée à l'oxyde d'yttrium notée YSZ (ZrO_2 ; 4-10%mol Y_2O_3) est classiquement utilisée. Sa conductivité à $1000^\circ C$ est de $10^{-1} S.cm^{-1}$ mais diminue fortement à $700^\circ C$ [19]. Pour remédier à ce problème, deux solutions ont été envisagées : trouver un nouveau matériau meilleur conducteur à $700^\circ C$ ou bien diminuer fortement son épaisseur afin de limiter la chute ohmique.

Les matériaux envisageables issus de la recherche sont principalement les suivants : la cérine gadolinée CGO ($Ce_{1-x}Gd_xO_{2-TM}$) ou yttriée YDC ($Ce_{1-x}Y_xO_{2-TM}$) qui possède une structure fluorine, le gallate de lanthane LSGM ($La_{0.9}Sr_{0.1}Ga_{0.8}Mg_{0.2}O_{3-TM}$) qui appartient à la famille des perovskites, et les phases de structure apatite ($Me_{10-x}(XO_4)_6O_{2-x}$ avec $Me = La, Nd, Sm, Gd\dots, Sr, Ca, Ba\dots$; $X = Si, Ge, P$).

- CGO et YDC :

Ces matériaux sont conçus pour travailler à des températures inférieures à $600^\circ C$.

Dans ces conditions, ils possèdent une meilleure conductivité ionique que YSZ (gain d'un ordre de grandeur à $600^\circ C$). Au-delà de $600^\circ C$, la réduction partielle du cérium Ce^{4+} en Ce^{3+} engendre une conductivité électronique à travers l'électrolyte et provoque le court-circuit de la cellule. À l'opposé, pour des températures inférieures à $500^\circ C$, la conductivité ionique est trop faible et la chute ohmique devient alors trop importante. La température de fonctionnement d'une cellule à base de CGO ou YDC doit donc être de $500-550^\circ C$ permettant de réduire les phénomènes de réactivité d'une part et les coûts d'autre part.

- LSGM :

Le gallate de lanthane possède également une meilleure conductivité ionique que la zircone yttriée, mais son utilisation est rendue difficile pour deux raisons principales :

- la faible disponibilité et donc le coût de production du gallium,
- la température de synthèse élevée de ce matériau.

- les apatites :

De nombreuses études ont été entreprises afin d'utiliser les oxy-apatites comme électrolyte. Leur structure hexagonale laisse en effet apparaître des tunnels de conduction ionique. Après optimisation de la composition chimique, les premiers résultats sont prometteurs (conductivité

identique à celle de YSZ), les compositions les plus étudiées sont $\text{La}_{9,33}\text{Si}_6\text{O}_{26}$ et $\text{La}_9\text{Sr}_1\text{Si}_6\text{O}_{26,5}$. L'inconvénient majeur réside dans leur température de synthèse élevée ($>1500^\circ\text{C}$).

L'anode

Elle est le siège de l'oxydation de l'hydrogène. Des métaux non nobles tels que le nickel ou le fer sont utilisés comme catalyseurs de cette réaction. La solution la plus répandue aujourd'hui est la réalisation d'un cermet nickel-matériau d'électrolyte. Une proportion supérieure à 30% volumique de nickel est nécessaire à la percolation électrique des grains métalliques. La réaction électrochimique se produit généralement au voisinage des points de contact entre l'électrolyte, le catalyseur et le gaz, appelé point triple (ou TPB pour Triple Phase Boundary). Ceci nécessite une mise en forme soignée pour multiplier ces points triples.

Cependant, le cermet à base de zircone yttrée connaît certaines limites : lors de l'utilisation de combustibles autres que l'hydrogène, la formation et dépôt de carbone ou l'empoisonnement par le soufre lui sont très néfastes. Les cermets à base de cobalt ou de Ruthénium ont également été envisagés. Le cobalt présente une plus grande tolérance que le nickel aux sulfures mais est très peu utilisé en raison de son coût trop important. Les cermets Ru-YSZ ont montré de bonnes propriétés catalytiques et des résistances inter faciales faibles, mais leur coût est largement pénalisant comme dans le cas du cobalt.

Lors de l'utilisation de cérite dopée comme électrolyte, des cermets CGO-métal sont employés. La température de fonctionnement de ces systèmes est plus faible que dans le cas de YSZ.

A côté de ces cermets, mélange d'un conducteur électronique et d'un conducteur ionique, d'autres voies ont été envisagées comme par exemple les solutions solides $\text{ZrO}_2\text{-Y}_2\text{O}_3\text{-TiO}_2$, des pérovskites dopées par un métal noble ou encore de nouveaux titanates. Ils appartiennent à la classe de matériaux à conduction mixte. Leurs performances semblent aujourd'hui prometteuses.

Les inter-connecteurs

Ils ont plusieurs rôles : ils permettent d'assembler les cellules élémentaires, d'assurer le bon écoulement des charges électriques et leur géométrie doit permettre la distribution des gaz. Ils doivent être stables en milieu réducteur et oxydant et posséder une bonne conductivité électronique. Ils doivent par ailleurs posséder un coefficient de conduction thermique élevé afin d'évacuer la chaleur.

Les matériaux classiquement utilisés à haute température sont des chromites de lanthane LaCrO_3 diversement substitués (Ca, Sr sur le site du lanthanide et Mg, Ti, Ga, Fe... sur le site du chrome) ou des aciers réfractaires.

De nombreuses recherches sont actuellement engagées pour optimiser les matériaux d'interconnecteurs; à plus basse températures (700 - 800 °C), des aciers plus classiques (ferritiques) et donc moins onéreux peuvent être avantageusement utilisés [7].

La cathode

À ce jour, la plus forte chute ohmique au sein du cœur de pile est due au matériau de cathode, siège de la réduction de l'oxygène. Le matériau le plus usité est LSM ($\text{La}_{0.8}\text{Sr}_{0.2}\text{MnO}_3$), oxyde de structure pérovskite, conducteur électronique. Tout comme pour l'anode, la réaction a lieu au point triple, contact entre l'électrolyte, la cathode et le gaz. Cependant, les matériaux de cathode aujourd'hui étudiés sont généralement des conducteurs mixtes (conducteurs des électrons et des ions oxygène) pour lesquels une délocalisation de la réduction de l'oxygène sur toute la surface de l'électrode est espérée [7].

I. 3.3. Les différentes configurations des SOFC

Les SOFC se trouvent principalement sous trois géométries: tubulaire, planaire et monolithique. Il existe d'autres mises en forme qui découlent des configurations majeures.

I. 3.3.1. Configuration tubulaire :

La forme tubulaire, développée par Siemens-Westinghouse (figure I.8), présente certainement la technologie la plus avancée de nos jours. La mono cellule est un tube de 22 mm de diamètre avec une longueur utile de 150 cm. L'intérieur du tuyau est la cathode en manganite de lanthane. L'électrolyte est déposé sur l'ensemble de la cathode à l'exception d'une bande de 9mm de large sur la totalité de la longueur. Le matériau d'interconnecteur est déposé sur cette bande, puis il est recouvert de nickel. L'électrolyte est recouvert par l'anode. Un feutre de nickel est utilisé pour relier les mono cellules entre elles. Une association en série de deux tubes se réalise en reliant, à l'aide du feutre, l'anode d'un tube avec l'interconnecteur recouvert de nickel d'un autre tube. Un montage en parallèle s'effectue en raccordant les anodes de cellules voisines entre elles avec le feutre. Le flux d'oxygène (ou d'air) est injecté à l'intérieur des tubes, reliés entre eux par une extrémité. L'hydrogène circule à l'extérieur du tube. [8]

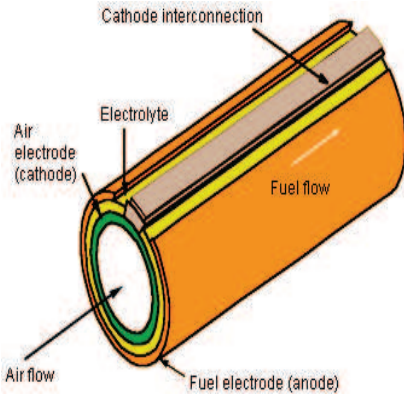


Figure I.5 : géométrie tubulaire de Simens-westinghouse [8].

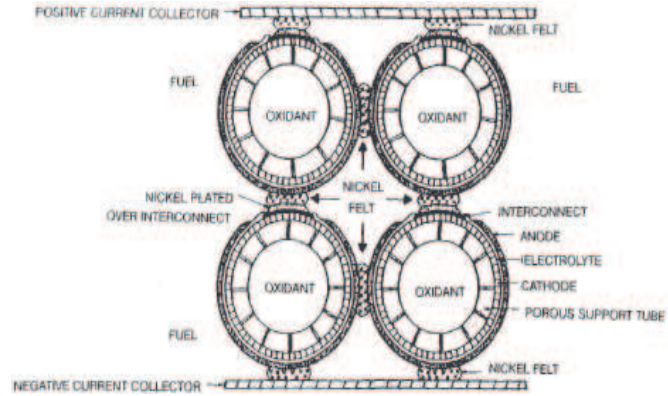


Figure I.6 : connexion

électrique de cellule tubulaire [8].

Cette configuration présente l'avantage de bien supporter les différences de coefficients linéaires d'expansion thermique. Le feutre de nickel absorbe les distorsions générées par la haute température. L'étanchéité est plus simple à assurer que dans le cas de la configuration plane. Cependant, il apparaît deux inconvénients majeurs: Une faible densité de puissance ($0,25-0,3 \text{ W/cm}^2$) est obtenue pour cette technologie en comparaison avec celle obtenue dans les configurations planes (2 W/cm^2). La mise en forme des composants nécessite l'utilisation de techniques relativement onéreuses. Cette géométrie est utilisée pour la fabrication d'énergie stationnaire développant des puissances de plusieurs centaines de kilowatts [8].

I. 3. 3.2. Configuration plane:

La géométrie plane peut être mise en forme sous diverses configurations. Chaque élément composant le cœur de pile est de forme plate et de faible épaisseur. La différenciation des géométries se fait par l'élément support. Une des électrodes ou l'électrolyte peut être le support et les autres éléments sont élaborés en couches minces

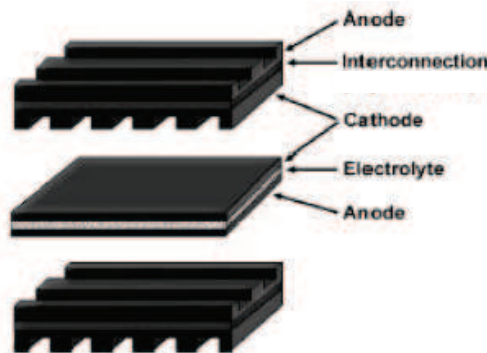


Figure I.7 : configuration plane (cross flow) d'une SOFC [8]

Le sens des flux gazeux permet également de différencier les deux configurations : cross-flow ou co-flow. Dans le cas d'une configuration cross-flow, les flux gazeux forment un angle de 90° entre eux et pour la co-flow, ils sont dans le même sens. Cette technologie permet l'obtention de fortes densités de puissance; contrairement au cas de la technologie tubulaire, la conduction et les pertes résistives sont indépendantes de la surface. Les caractéristiques électriques obtenues offrent un large domaine d'applications (mobile et/ou stationnaire). La mise en forme utilise des techniques qui sont peu onéreuses. Néanmoins, l'étanchéité de ces cellules est plus complexe à assurer que pour la configuration tubulaire. De plus, à cette température, les contraintes thermiques générées par la différence des coefficients de dilatation linéaire des différents éléments limitent la hauteur des "stacks". Un exemple de configuration planaire industrialisée de nos jours est présenté avec la figure I.8. Il s'agit de la configuration développée par Sulzer-Hexis qui fait appel à la technologie planaire avec une mise en forme circulaire. L'hydrogène arrive par le centre de la pile alors que l'air provient de l'extérieur. Le "stack" est réalisé avec 50 mono cellules montées en série. Cette SOFC permet d'atteindre des rendements d'environ 85 % lorsqu'elle est utilisée en cogénération, avec une puissance électrique maximale de 1 kW [8].

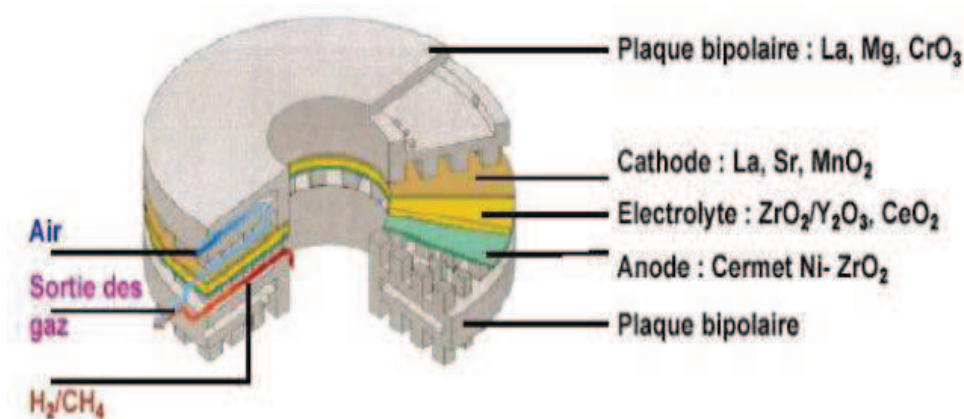


Figure I.8 : cellule unitaire de chez Sulzer-Hexis [8].

I. 3. 3.3. Configuration monolithique :

La structure monolithique est formée d'une partie plane et d'une partie ondulée. Dans le cas où les flux de gaz sont dans le même sens, la partie plane est un empilement anode, interconnecteurs, cathode et la partie ondulée est composée de l'ensemble cathode, électrolyte. La composition des différentes parties est inversée quand la configuration est en flux croisés (figure I.9). L'épaisseur des cellules est d'environ $100\ \mu\text{m}$ et la distance qui les sépare est de 1-2 mm. La géométrie monolithique présente de faibles dimensions et offre une

forte densité de puissance, rendue possible par une grande surface active, une forte densité de courant et une faible masse. Dans cette mise en forme, le gain de masse s'est fait en éliminant les éléments porteurs inactifs. Cet ensemble de propriétés, faible masse et faible encombrement pour une puissance maximale, permet d'envisager son utilisation dans le domaine spatial et comme source d'énergie mobile. Un des inconvénients majeurs de cette géométrie réside dans la mise en forme qui nécessite l'utilisation de techniques onéreuses et relativement complexes. De plus, cet assemblage supporte mal les contraintes provoquées par la différence de coefficients d'expansion linéaire [8].

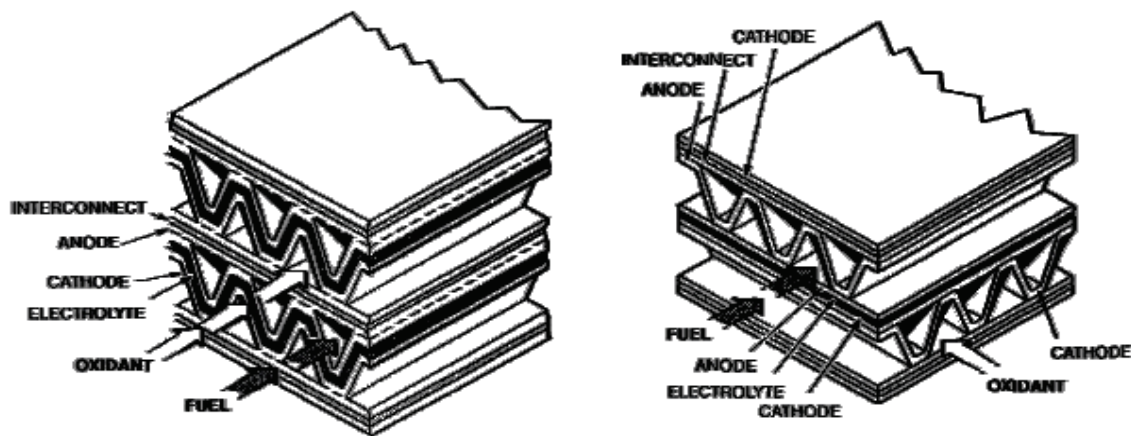


Figure I. 9 : géométrie monolithique avec flux gazeux dans le même sens et dans le sens croisé [8].

I. 4. Les applications des piles à combustibles

Les marchés potentiels des piles à combustibles apparaissent aujourd'hui de façon multiples, ils sont généralement classés en trois grandes familles d'application: portables, stationnaires et transport.

I. 4.1. Les applications portables

Pour des applications portables, les piles à combustible sont en concurrence avec les batteries. On espère gagner en temps d'autonomie et pouvoir recharger plus vite des réserves d'énergie épuisées. Les piles utilisées dans ce domaine doivent être extrêmement robustes et peu sensibles aux conditions extérieures. De plus, de fortes contraintes d'encombrement et de poids sont imposées. Il est important de noter que les applications portables sont la seule application où l'utilisateur peut attendre des gains importants en terme de confort et pour lesquels il est prêt à payer le prix. Un grand nombre de prototypes a été réalisé, Le méthanol est le combustible préféré pour les petites applications car il est liquide et peut être facilement transporté. L'autorisation pour le transport aérien de cartouches de méthanol vient d'être

obtenu par Smart Fuel Cell. A côté des applications civiles, l'armée américaine travaille sur des systèmes d'une puissance d'environ 50 W pour équiper des soldats [2].

I. 4.2. Les applications stationnaires

Dans les applications stationnaires, la pile à combustible délivre de l'énergie électrique à des endroits où un réseau n'est pas disponible ou quand la production simultanée de chaleur et de l'électricité (cogénération) permet un rendement élevé. Un autre concept de production décentralisée voit aujourd'hui le jour. Il s'agit des centrales de production électriques virtuelles construites à l'aide d'un grand nombre de piles à combustibles dispersées dans la zone alimentée. Dans le premier cas, un apport de combustible (généralement de l'hydrogène sous pression) est moins cher que l'établissement d'une alimentation continue par câble. La pile à combustible remplace le générateur diesel utilisé habituellement. Le gain en rendement est souvent moins important que la diminution du bruit et de la maintenance. L'hydrogène peut également être produit sur place par des éoliennes ou des panneaux photovoltaïques. La cogénération permet une production d'énergie avec un rendement très élevé, car les pertes sont valorisées sous forme de chaleur. La pile à combustible peut remplacer une chaudière à gaz dans un immeuble. Dans ce cas, elle sera alimentée en gaz naturel de ville. Un grand nombre d'installations de démonstration avec une puissance entre 1 kW pour des maisons individuelles et quelques centaines de kW pour des résidences ont été installés dans différents pays. Un ensemble de petites centrales domestiques mises en réseau et commandées à partir d'un centre de contrôle, peut rapprocher la production d'énergie du lieu de consommation et donc réduire les pertes dans le réseau tout en profitant des avantages de la cogénération [2].

I. 4.3. Les applications transport

Utilisées dans des véhicules, les piles à combustible peuvent contribuer à une baisse de pollution et à un comportement plus agréable lors de la conduite. Le rendement plus élevé par rapport à un moteur à explosion permet de diminuer le besoin d'énergie du véhicule. De plus, en fonction du combustible utilisé (hydrogène, gaz naturel), il peut être localement peu polluant ou même non polluant. Un déplacement des rejets vers la zone de production du combustible peut présenter un intérêt notamment pour les véhicules utilisés dans les zones urbaines. Finalement, l'hydrogène constitue un vecteur de stockage d'énergie électrique permettant de remplacer une batterie [2].

I. 5. La modélisation thermodynamique et électrochimique des piles à combustible

I. 5.1. L'énergie libre de Gibbs

Dans une pile à combustible, la variation d'énergie totale du système ΔH (variation d'enthalpie) est la somme de la variation d'énergie libre ΔG (dite de Gibbs) transformée en énergie électrique et de la variation d'énergie dissipée sous forme de chaleur $T\Delta S$ (pour un processus à température constante et une réaction réversible).

L'énergie libre de Gibbs dépend de la température et cette dépendance est exprimée par la relation :

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S \quad (\text{I.4})$$

Pour la réaction :



Les valeurs de l'énergie libre de Gibbs sont aussi données dans les tables des propriétés thermodynamiques (en joules par mole) pour les conditions normales, soit :

$$\Delta G^0 = -237,2 \text{ KJ/mole} \text{ Pour l'eau formée à l'état liquide}$$

Et

$$\Delta G^0 = -228,6 \text{ KJ/mole} \text{ Pour l'eau formée à l'état gazeux (vapeur)}$$

I. 5.2. Les caractéristiques d'une pile à combustible

I. 5.2.1 Tension théorique

Dans un système électrochimique, la tension à l'équilibre ΔE^0 (dans les conditions normales de température et de pression) est la différence des potentiels à chaque électrode.

L'énergie maximale qui peut être fournie par une pile à combustible à température et pression constantes est l'énergie libre de Gibbs ΔG^0 (enthalpie libre de réaction).

L'équation de Faraday relie cette énergie libre au potentiel de l'électrode (à l'équilibre) :

$$\Delta G^0 = -nF\Delta E^0 \quad (\text{I.6})$$

Où n est le nombre d'électrons échangés, et F la constante de Faraday ($\sim 9.6485 \cdot 10^4 \text{ J/V.mol}$).

$$\Delta E^0 = -\frac{\Delta G^0}{nF} \quad (\text{I.7})$$

La Tension théorique d'une pile à combustible hydrogène-oxygène en circuit ouvert, dans les conditions normales de température et de pression, est donc de :

$$\Delta E^0 = -\frac{\Delta G^0}{nF} = \frac{-237,3 \times 10^{-3}}{2 \times 9,06485 \times 10^4} = 1,129 \text{ V}$$

(L'eau formée sous forme liquide).

Si l'eau formée se trouve sous forme de vapeur, la tension fournie est de :

$$\Delta E^0 = -\frac{\Delta G^0}{nF} = \frac{-228,6 \times 10^{-3}}{2 \times 9,06485 \times 10^4} = 1,185 \text{ V}$$

La différence est due au changement d'énergie libre de Gibbs lors de la vaporisation de l'eau.

✚ L'influence de la pression : équation de Nernst

L'équation de Nernst permet de calculer la tension développée en fonction de la pression partielle des réactifs (hydrogène et oxygène) et des produits (eau) hors des conditions normales de température et de pression.

Pour une réaction de type :



L'équation de Nernst s'écrit :

$$E = E^0 - \frac{RT}{nF} \ln Q \quad (\text{I.9})$$

Le facteur Q représente les activités A des différents composants :

$$Q = \frac{(A_C)^c (A_D)^d}{(A_A)^a (A_B)^b} \quad (\text{I.10})$$

Pour les espèces gazeuses, si l'on pose que les gaz se comportent comme des gaz parfaits, on peut remplacer l'activité par la pression partielle de chaque gaz :

$$Q = \frac{(P_C)^c (P_D)^d}{(P_A)^a (P_B)^b} \quad (\text{I.11})$$

P_A, P_B, P_C et P_D sont les pressions partielles respectives des produits et réactifs sous forme gazeuse.

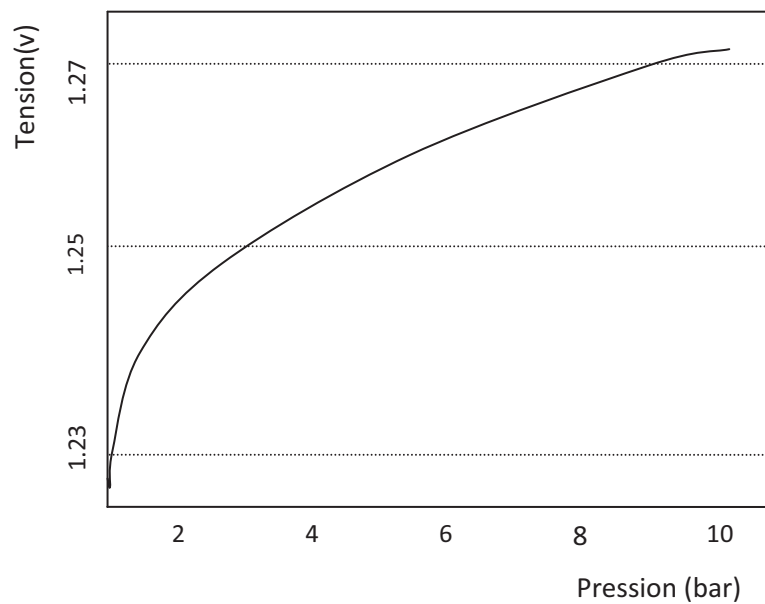


Figure I.10 : influence de la pression sur la tension

✚ Influence de la température

Une augmentation de la température entraîne une augmentation de l'entropie, donc une diminution de la tension (figure I. 11 et tableau I. 2).

La variation de tension en fonction de la température (à pression constante et dans des conditions de réversibilité) $\frac{dE}{dT}$ peut être déterminée à partir des équations :

$$\Delta G = -nFE \text{ et } S = -\left(\frac{dG}{dT}\right)_p \quad (\text{I.12})$$

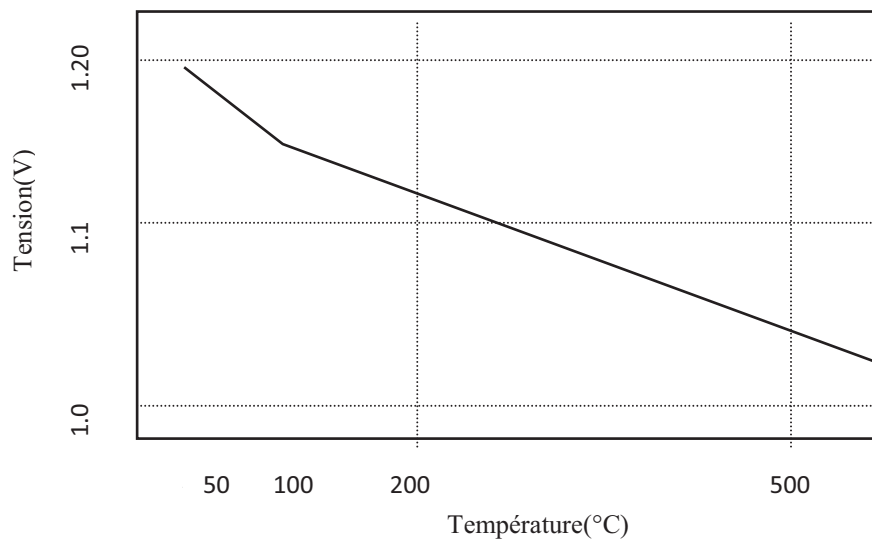
En combinant ces deux équations, on aboutit à :

$$\left(\frac{dE}{dT}\right)_p = \frac{\Delta S}{nF} \quad (\text{I.13})$$

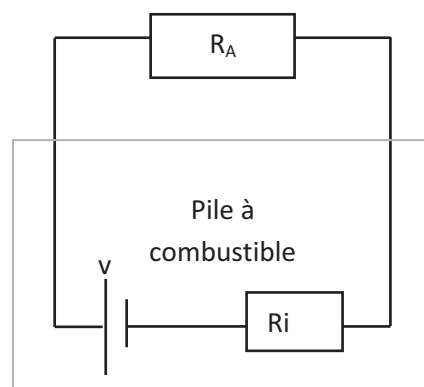
La variation de tension calculée est de -0,85mV/k pour la formation d'eau liquide et de -0,23mV/k si l'eau est sous forme de vapeur.

Tableau I. 2 Influence de la température sur la tension.

Température (°C)	eau	ΔG (kJ/mol)	E (V)
25	liquide	-237,2	1,23
100	vapeur	-225,3	1,17
200	vapeur	-220,4	1,14
600	vapeur	-199,6	1,04
1000	vapeur	-177,4	0,92

**Figure I. 11** : influence de la température sur la tension (exemple)**I. 5.2.2. La tension réelle**

La pile à combustible peut être représentée schématiquement par un circuit électrique (figure I. 12)

**Figure I. 12** : équivalent électrique d'une pile à combustible

La tension théorique est celle d'une pile à combustible en circuit ouvert ne débitant pas. Lorsque l'on relie les bornes de la pile à combustible à la charge, traversée par un courant d'intensité i , La tension aux bornes de la pile diminue par rapport à La tension théorique suite aux phénomènes de polarisation dont on distingue trois formes :

- polarisation d'activation qui concerne la diffusion des ions à l'interface électrode/électrolyte (transfert de charges).
- polarisation de résistance qui est la résultante de la résistance électrique des différents éléments de la pile et surtout de l'électrolyte.
- polarisation de concentration qui dépend de la concentration de l'électrolyte autour des électrodes.

Ces polarisations entraînent une diminution non négligeable de la tension développée. Si l'on représente la tension aux bornes d'une pile à combustible en fonction de la densité de courant compte des phénomènes de polarisation, on obtient la courbe caractéristique figure I. 13.

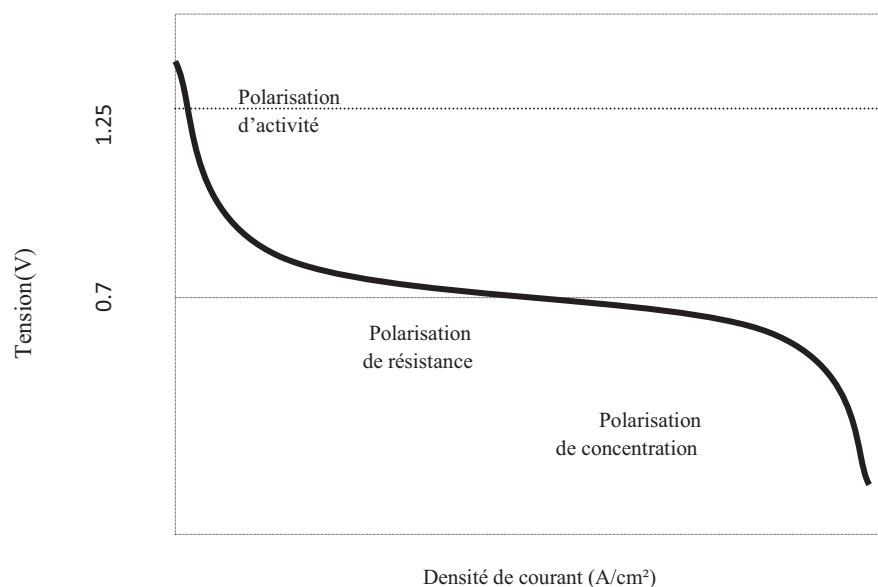


Figure I. 13 : Influence de la polarisation sur la tension.

Polarisation d'activation

La polarisation d'activation est plus importante à la cathode, par suite de la cinétique de réduction de l'oxygène, plus lente que la réduction de l'hydrogène à l'anode. Cette polarisation est due à l'énergie d'activation des réactions aux électrodes. La cinétique chimique aux électrodes est le résultat d'étapes réactionnelles complexes avec chacune ayant

sa propre cinétique. Cette polarisation d'activation peut être estimée en utilisant l'équation empirique dite de Tafel.

✚ polarisation de résistance

Avec l'augmentation du débit de combustible, la densité de courant augmente, mais la résistance interne de l'électrolyte entraîne une diminution de la tension aux bornes des électrodes. On observe une chute de tension η_{res} (perte ohmique), fonction principalement de la résistance électrique R_e de l'électrolyte, dont on peut calculer la valeur par analogie avec la loi d'Ohm, soit :

$$\eta_{res} = R_e i \quad (I.14)$$

Les pertes dues à la polarisation de résistance peuvent être minimisées :

- en réduisant la résistance de l'électrolyte (réduction de la section par diminution de l'épaisseur, par exemple) ;
- en augmentant la conductivité ionique de l'électrolyte (nature de matériau, augmentation de température, etc.).

Pour des comparaisons, on peut normaliser la résistance de l'électrolyte en la ramenant à la surface de l'électrode (ASR, area specific resistance en ohm par centimètre). Dans ce cas, la diminution de tension ramenée à une unité de surface est :

$$\eta_{res} = ASR \cdot i \quad (I.15)$$

✚ Polarisation de concentration

-Transport et diffusion aux électrodes

Les électrodes étant le siège de réactions chimiques mettant en jeu des réactifs (hydrogène ou oxygène, par exemple) qui sont consommés au fur et à mesure qu'ils diffusent dans l'électrode, on observe un gradient de concentration d'une face à l'autre de l'électrode. Le transport d'une espèce et son déplacement sont dû à ce gradient de concentration. Cette diffusion est fonction de la pression, de la température, des molécules en jeu et de leur concentration, de la nature de l'électrode (porosité, etc.).

- Gradient de concentration aux électrodes

Le réactif étant consommé au fur et à mesure qu'il avance dans l'électrode, sa concentration va donc en diminuant. En revanche, la concentration des produits ou sous-produits formés augmente (figure I. 1

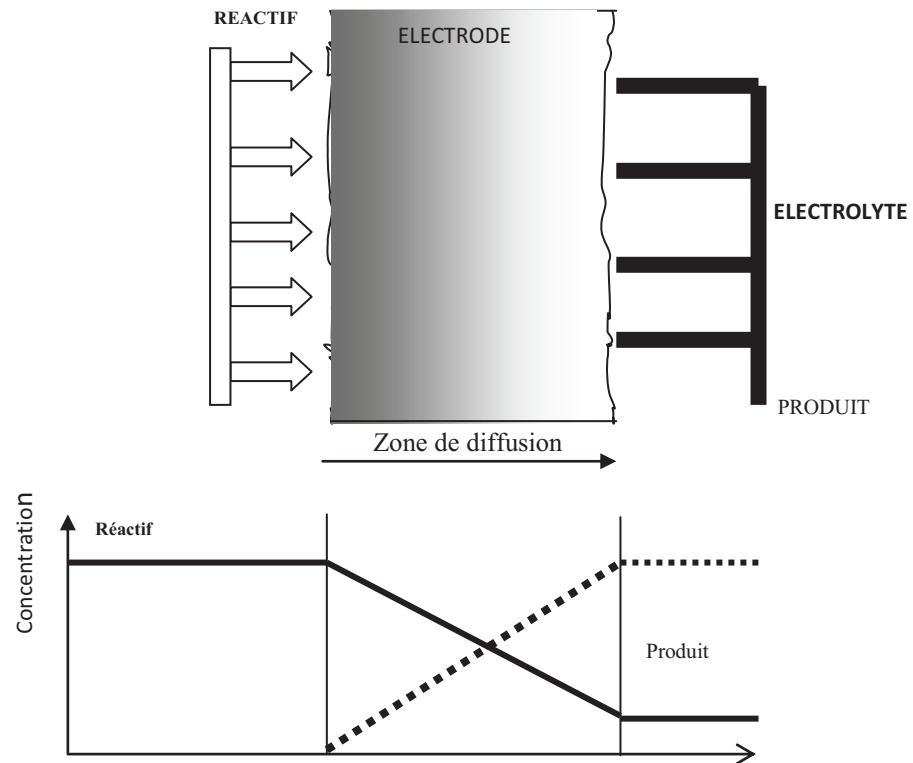


Figure I. 14 : Gradient de concentration à l'électrode

✚ Polarisation de concentration

Cette variation de concentration se traduit par une diminution des performances de la pile à combustible :

- diminution de tension fournie.
- diminution de la vitesse de réaction.

Ces pertes ou surtension de concentration η_{conc} peuvent être calculées à partir des équations de Nernst (pour la diminution de tension) et de Butler-Volmer (diminution de la vitesse de réaction).

La forme générale de l'équation de Nernst est :

$$E = E^0 - \frac{RT}{nF} \ln Q \quad (I.16)$$

avec :

$$Q = \frac{\sum a_{\text{produit}}^{v_{\text{produit}}}}{\sum a_{\text{réactifs}}^{v_{\text{réactifs}}}}, \quad Q = \frac{\sum (\text{activité produits})^{\text{coefficient stoechiométrique produit}}}{\sum (\text{activité réactifs})^{\text{coefficient stoechiométrique réactifs}}} \quad (\text{I.17})$$

Où $a_{\text{réactif/produit}}$: est l'activité d'un réactif ou d'un produit et $v_{\text{réactif/produit}}$ le coefficient stoechiométrique du réactif ou du produit.

L'équation de Nernst permet de calculer la perte de tension si l'on passe d'une concentration initiale $c_{\text{réactif}}^0$ (arrivé du réactif) à une concentration finale $c_{\text{réactif}}^*$ (concentration en réactif à l'interface électrode/électrolyte), le cas extrême étant celui où la concentration finale est égale à zéro ; dans ce cas, on définit une densité de courant limite i_l et la surtension de concentration est :

$$\eta_{\text{conc}} = \frac{RT}{nF} \ln \left(\frac{i_l}{i_l - i} \right) \quad (\text{I.18})$$

L'utilisation de l'équation de Butler-Volmer (cinétique de réaction) conduit à un résultat similaire avec une équation générale de la forme :

$$\eta_{\text{conc}} = c \ln \left(\frac{i_l}{i_l - i} \right) \quad (\text{I.19})$$

Où c est une constante obtenue empiriquement.

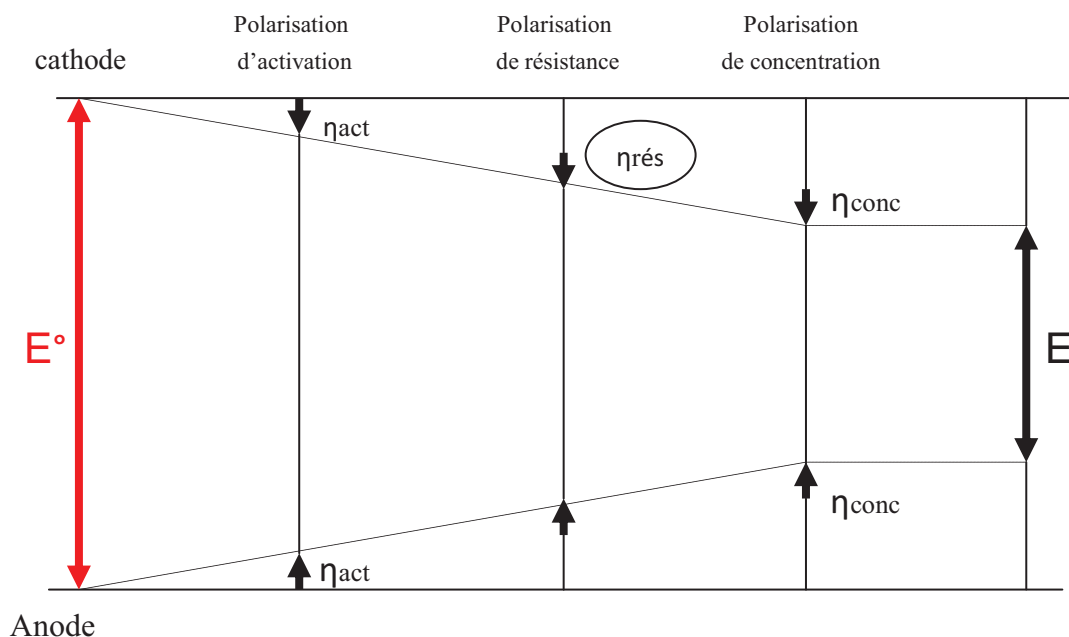
-Phénomènes à l'anode et à la cathode

La densité du courant limite i_l peut être calculée pour chaque réactif. Dans une pile à combustible de type H_2/O_2 , l'oxygène se diffuse beaucoup plus lentement que l'hydrogène et sa contribution est prépondérante dans les pertes de tension dues à la variation de concentration. La Polarisation de concentration η_{conc} est un facteur important aux fortes densités de courant. Elle peut être réduite par une optimisation de la distribution du réactif à la surface de l'électrode et de l'électrolyte (matériau, structure) en plus des conditions opérationnelles (température, pression).

Bilan des polarisations

La tension réelle aux bornes d'une pile à combustible est la résultante des différentes Polarisation (figure I. 15):

$$E = E^0 - \eta_{\text{act}} - \eta_{\text{rés}} - \eta_{\text{conc}} \quad (\text{I.20})$$



La polarisation de résistance est due principalement à l'électrolyte

Figure I. 15 : Effet des différentes polarisations (représentation simplifiée).

I. 5.3. Rendement d'une pile à combustible

Le rendement est le rapport entre la quantité d'énergie électrique effective et l'énergie totale libérée lors de la réaction. Il est exprimé par la relation :

$$\eta_{\%} = 100 \times [\text{énergie électrique produite}] / [\text{énergie libérée par la réaction}] \quad (\text{I.21})$$

$$\eta_{\%} = 100 \times \frac{\Delta G}{\Delta H} \quad (\text{I.22})$$

$$\eta_{\%} = 100 \times \frac{(\Delta H - T\Delta S)}{\Delta H} \quad (\text{I.23})$$

$$\eta_{\%} = 100 \times \left[1 - T \left(\frac{\Delta S}{\Delta H} \right) \right] \quad (\text{I.24})$$

Si l'eau est formée à l'état liquide :



L'enthalpie libre de Gibbs ΔG est de 237,2 kJ/mol (298,15 k et 101325 Pa).

L'enthalpie de réaction ΔH est égale à 285,8 kJ/mol (298,15 k et 101325 Pa).

Si l'eau est formée à l'état vapeur :



L'enthalpie libre de Gibbs ΔG est de 228,6 kJ/mol (298,15 k et 101325 Pa).

L'enthalpie de réaction ΔH est égale à 241,8 kJ/mol (298,15 k et 101325 Pa).

Les rendements théoriques respectifs sont donc :

$$\eta_{\%} = 100 \times \frac{\Delta G}{\Delta H}$$

soit :

$$\eta_{théorique} = 100 \times \frac{237,2}{285,8} = 83\% \quad \text{pour l'eau est formée à l'état liquide}$$

et

$$\eta_{théorique} = 100 \times \frac{228,6}{241,8} = 94,5\% \quad \text{pour l'eau est formée à l'état vapeur}$$

Pour un moteur thermique, le rendement est déterminé par le théorème de Carnot qui fait intervenir la différence de température entre source chaude (T_{max}) et source froide (T_{min}). Donc plus cette différence de température est élevée, plus le rendement l'est aussi, alors que pour la pile à combustible, ce rendement diminue lorsque la température augmente (figure I. 16). Pour un moteur thermique, le rendement est [9] :

$$\eta_{\%} = \frac{(T_{max} - T_{min})}{T_{min}} \quad (I.27)$$

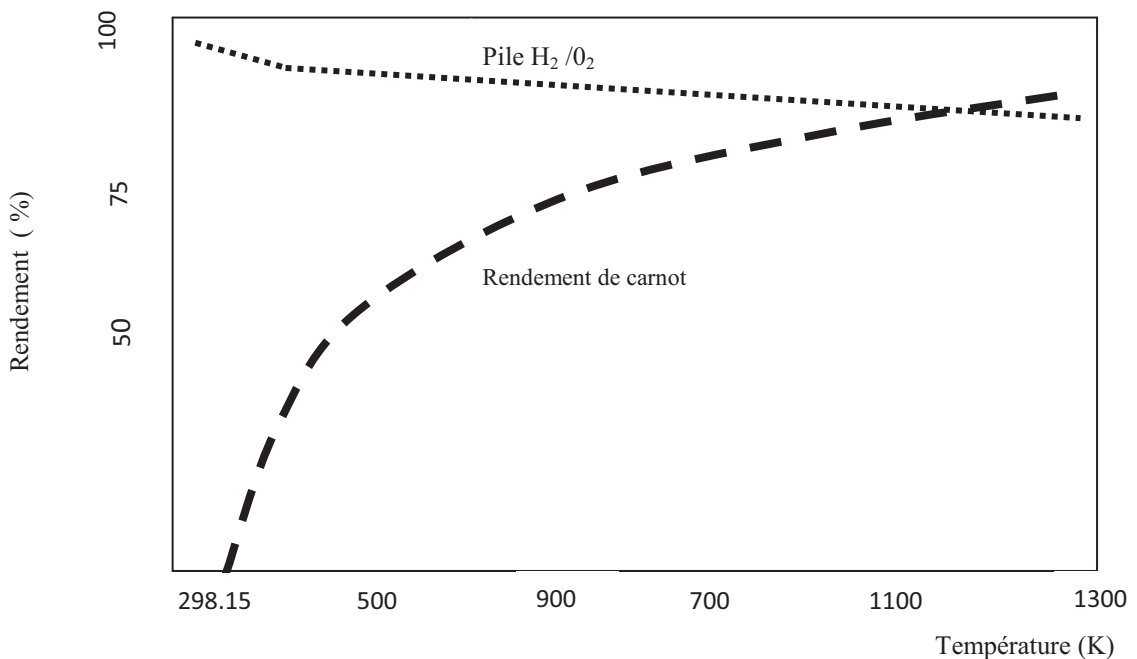


Figure I. 16 : Rendements comparés d'une pile à combustible et d'un moteur thermique (cycle de Carnot avec $T_{min} = 298.15$ K).

Introduction :

Plusieurs travaux de recherche ont été faits sur les piles à combustibles avec différentes géométries (tubulaire, planaire et monolithique) et selon les modes de transfert chaleur par conduction et par convection.

Le mode de transfert de chaleur par rayonnement était négligé dans la plupart des cas. Dans cette bibliographie, on a essayé de rassembler les études disponibles où le rayonnement est pris comme terme source dans l'équation de l'énergie.

Les travaux de recherches (articles et thèses) sont résumés et classés dans les tableaux selon trois groupes :

- Synthèse des travaux utilisant le modèle de rayonnement de Schuster–Schwarzchild.
- Synthèse des travaux utilisant la même méthode numérique.
- Synthèse des travaux étudiant le rayonnement dans la même région et la même géométrie.

Tableau 1:

Auteurs	Sunil Murthy, Andrei G. Fedorov. Radiation heat transfer analysis of the monolith type solid oxide fuel cell. <i>Journal of Power Sources</i> 124 (2003) [10]
Le type de la pile	monolithique
La méthode et le code	La méthode de discrétisation ordinaire (DO). simulation (2D)
Le combustible	H ₂
La région	électrolyte et électrodes
Les hypothèses	<ul style="list-style-type: none"> • L'écoulement de combustible est co-courant • Le débit massique du combustible et l'air à la cathode est 0.0045 mg/s et 0.32 mg/s à 750K. • La fraction massique des compositions 78% H₂ et 28% H₂O. • La pression constante pour le combustible et l'air. • La masse d'air et du combustible entrant sont constantes
Les équations essentielles	<ul style="list-style-type: none"> • La loi de Planck pour l'émissivité du corps noir $E_{b\lambda} = \frac{2\pi hc_0^2}{n^2 \lambda^5 [e^{hc_0/n\lambda kI} - 1]}$ • Le modèle de deux-flux $qR(z) = C_1 e^{2kz} + C_2 e^{-2kz}$ $C_1 = -\sigma(T_{sup}^4 - T^4)e^{-2xL}, \quad C_2 = \sigma(T_{inf}^4 - T^4)$

	<ul style="list-style-type: none"> La conductivité thermique de Rosseland $qR = -K_R \nabla T, \quad K_R = \frac{16n^2 \sigma T^3}{3\beta_R}$ L'énergie libre de Gibb $\Delta G = \Delta H - T\Delta S$ L'équation de la conservation d'énergie totale
La conclusion	<ul style="list-style-type: none"> L'effet de transfert de chaleur par rayonnement est significatif et doit être pris en compte dans le profil de température et de la tension de sortie de la pile. Le model simplifié de rayonnement qui est basé sur l'approximation de la diffusion de Rosseland pour l'épaisseur optique des électrodes et la méthode de deux-flux de Schuster-Schwartzchild pour l'épaisseur optique de l'électrolyte peuvent remplacer la méthode de la discrétisation ordinaire (DO). La programmation qui utilise le modèle de Rosseland/ deux-flux de rayonnement permet de gagner un temps significatif sans pertes dans les prévisions de température/tension en comparaison avec la méthode de la discrétisation ordinaire (DO).

Tableau 2:

Auteurs	T. Tanaka, Y. Inui, A. Urata, T. Kanno Three dimensional analysis of planar solid oxide fuel cell stack considering radiation Energy Conversion and Management 48 (2007) [13]
Le type de la pile	planaire
La méthode et le code	la méthode des volumes finies. simulation (03D)
Le combustible	gas Naturel (méthane)
La région	Les canaux
	la surface inférieure et extérieure du stack est equipotentielle L.l.H= 200mm · 200 mm · 3.2 mm.

Les hypothèses	<ul style="list-style-type: none"> • L'écoulement de combustible est co-courant • L'écoulement de combustible et l'air dans la direction de x • On suppose une symétrie dans les distributions dans les moitiés supérieure et inférieure du stack selon la direction z (la hauteur) • L'émissivité des surfaces est 0.8. • Le combustible et l'air consommés sont respectivement à 80% et 10%. • La température d'entrée du combustible et de l'air est 1173 K. • La pression du fonctionnement est 1 MPa. • La moyenne de densité de courant est 0.25 A/cm².
Les équations essentielles	<ul style="list-style-type: none"> • La conservation de masse dans le canal du combustible $\frac{dn_m}{dx} = -\Delta n_r$ $\frac{dn_h}{dx} = 3\Delta n_r + \Delta n_s - w \frac{J}{2F}$ $\frac{dn_v}{dx} = -\Delta n_r - \Delta n_s - w \frac{J}{2F}$ $\frac{dn_{cm}}{dx} = \Delta n_r - \Delta n_s$ $\frac{dn_{cd}}{dx} = \Delta n_s$ <ul style="list-style-type: none"> • La conservation de masse dans le canal d'air $\frac{dn_0}{dx} = w \frac{J}{4F}$ $\frac{dn_n}{dx} = 0$ <ul style="list-style-type: none"> • La conservation d'énergie dans le canal du combustible $\begin{aligned} \frac{d}{dx} (n_m h_m + n_h h_h + n_{cm} h_{cm} + n_{cd} h_{cd}) \\ = -\Delta n_r q_r + \Delta n_s q_s - w \frac{J}{2F} h_h + w \frac{J}{2F} \dot{h}_r \\ - w_{ch} \alpha_{fgc} (T_{fg} - T_c) \\ - (w_{ch} + 2l_{ch}) \alpha_{fgc} (T_{fg} - T_s) \end{aligned}$

	<ul style="list-style-type: none"> La conservation d'énergie dans le canal d'air $\frac{d}{dx}(n_0 h_0 + n_h h_h)$ $= w \frac{J}{4F} h_0 - w_{ch} \alpha_{fgc} (T_{fg} - T_c)$ $- (w_{ch} + 2l_{ch}) \alpha_{fgc} (T_{ag} - T_{ai})$ L'équation de la chaleur par conduction $\rho c \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial z} \right) + s$ L'équation de Nernst: $E = -\frac{\Delta G_r}{2F} + \frac{RT_e}{2F} \ln \left(\frac{P_h P_0^{0.5}}{P_v} \right)$ Les pertes d'activation aux électrodes $J = \frac{RT_e}{3F} \sigma_f \left\{ \exp \left(\frac{2FV_{af}}{RT_c} \right) - \exp \left(\frac{FV_{af}}{RT_c} \right) \right\}$ $J = \frac{RT_e}{4F} \sigma_a \left\{ \exp \left(\frac{2FV_{af}}{RT_c} \right) - \exp \left(\frac{2FV_{aa}}{RT_c} \right) \right\}$ La tension locale V de la cellule $V = E - V_{af} - V_{aa} - V_{re} - V_{rf} - V_{ra}$
La conclusion	<ul style="list-style-type: none"> Les codes conventionnels sont suffisamment exacts par contre le nouveau code développé (whole cell stackcode) ne permet pas de prédire la température maximale de la pile. C'est pour ça que la conductivité thermique des matériaux céramiques de la pile est très petite et la partie centrale du stack est presque libre de l'influence de transfert de la chaleur par radiation. On a besoin de la simulation selon le modèle (whole cell stackcode) pour calculer la tension de la pile correctement parce que le transfert de chaleur par radiation réduit cette dernière dans le cas où la température ambiante est basse. La mauvaise influence d'une basse température ambiante sur la tension est faible et une tension relativement élevée obtenue même quand la température ambiante est très basse.

Tableau 3:

Auteurs	David L. Damm, Andrei G. Fedorov Radiation heat transfer in SOFC materials and components <i>Journal of Power Sources</i> 143 (2005) [11]
Le type de la pile	(planaire et tubulaire)
La méthode et le code	Rosseland approximation, Schuster–Schwarzchild Simulation (2D)
Le combustible	H ₂
La région	Toute la cellule.
Les hypothèses	<ul style="list-style-type: none"> • L'écoulement co-courant et contre courant • Les murs sont opaques, gris, émetteurs diffus, et réflecteurs de radiation thermique • Toutes les ouvertures sont fermées par surfaces noires virtuelles maintenues à 0 K • Les canaux d'écoulement dans la pile de type planaire possède un rapport élevé (L/d~30). • Les coefficients moyens de l'absorption sont approximativement: 0.1 cm⁻¹ bar⁻¹ pour H₂O; 0.3 cm⁻¹ bar⁻¹ pour CO₂ et CO; 0.4 cm⁻¹ bar⁻¹ pour CH₄ à 600 °C. • Les parois des canaux peuvent être traitées comme des surfaces noires avec émissivité égale à 1
	<ul style="list-style-type: none"> • La conductivité de Rosseland $K_r = \frac{16n^2\sigma T^3}{3\beta}$ • Le couplage de radiation avec la conservation d'énergie totale pour les électrodes $q_{total}(z) = q_{cond}(z) + q_{rad}(z) = -k \frac{dT}{dz} - k_r \frac{dT}{dz} = - \underbrace{k + \frac{16n^2\sigma T^3}{3\beta_r}}_{\text{la conductivité thermique effective}} \frac{dT}{dz}$ • Le flux de chaleur radiatif en tout point dans l'électrolyte $q_r = n^2 \sigma (T_1^4 - T_2^4)$

Les équations essentielles	<ul style="list-style-type: none"> Le flux de chaleur par conduction $q_c = k \frac{T_1 - T_2}{L}$ Le flux de chaleur radiatif en tout point sur la surface du canal : $\frac{q(r)}{\epsilon(r)} - \int_A \left(\frac{1}{\epsilon(\hat{r})} - 1 \right) q(\hat{r}) dF_{dA-d\hat{A}} + H_0(r) = E_b(r) - \int_A E_b(\hat{r}) dF_{dA-d\hat{A}}$ L'émissivité du corps noir $E_b = \sigma T^4$ Le couplage de radiation et l'équation d'énergie pour le type tubulaire $q_{conv} + q_{rad} = q_{cond} \rightarrow h(T_b - T_\infty) + q_{rad} = -k \frac{\partial T}{\partial n} \Big _{limite}$
La conclusion	<p>Il a été démontré que seulement un traitement des régimes radiatifs permettrait une prédiction exacte des champs de température et les conditions de fonctionnement. Bien que nos analyses indiquent certains régimes radiatifs peuvent être négligés dans l'analyse du transfert de chaleur du SOFC, nous espérons que le lecteur a aussi développé une compréhension claire des hypothèses qui ont mené à ces conclusions les quels peuvent être validés ou non dans chaque cas spécifique trouvé dans une famille de nouvelles configurations de la pile SOFC.</p>

Tableau 4

Auteurs	K.J. Daun, S.B. Beale, F. Liu, G.J. Smallwood Radiation heat transfer in planar SOFC electrolytes <i>Journal of Power Sources</i> 157 (2006) [12]
Le type de la pile	planaire
La méthode et le code	Schwarzschild two-flux, Monte Carlo simulation (2D)
Le combustible	H ₂
La région	L'électrolyte
	<ul style="list-style-type: none"> La longueur de la cellule est 0.1m

Les hypothèses	<ul style="list-style-type: none"> • La largeur des canaux du combustible et de l'air est 1mm, les épaisseurs de l'anode, électrolyte, et la cathode sont 500, 15, and 50 um • La température d'entrée de L'air et le combustible sont égaux à 950K et une densité de courant constante de 4000Am^{-2} • Le taux d'utilisation de l'oxygène et l'hydrogène est 20 et 80%. • La surtension anodique et cathodique est 1V et 1.5V • La resistivité ionique de l'électrolyte $\rho_e = 0.8901 \Omega \text{um}$ • L'émissivité des surfaces latérales est égale à 0.5 • l'émissivité des interfaces anode/électrolyte et cathode/électrolyte est 0.9 • Le changement de l'entropie total est calculé supposant une température des produits et des réactifs de 1000 K • Les pressions partielles de l'O_2, H_2, et H_2O sont respectivement : 0.21, 0.75, et 0.25 atm • Les coefficients de l'absorption moyenne de Planck et la diffusion à 1000K sont $\alpha_p = 260 \text{m}^{-1}$ et $\sigma_{sp} = 1 \times 10^4 \text{m}^{-1}$
Les équations essentielles	<ul style="list-style-type: none"> • Source chimique (reversible) cathodique et anodique : $q''_{rev,c} = T(2S_{\text{O}^{2-}} - S_{\text{O}_2} - 4S_{e-}) \frac{i''}{4F}$ $q''_{rev,a} = T(2S_{\text{O}^{2-}} - S_{\text{H}_2} - 4S_{e-}) \frac{i''}{4F}$ • Source irréversible cathodique et anodique $q''_{iff,c} = i'' \eta_c \quad q''_{iff,a} = i'' \eta_a$ • Source Ohmique dans l'électrolyte $q'''_{ohm} = \rho_e i''^2$ • Le débit massique de l'air $\dot{m}'_{air} = \frac{i''}{4F u_{\text{O}_2}} L \frac{n_{air}}{n_{\text{O}_2}} M_{air}$ • Le débit massique du combustible $\dot{m}'_{fuel} = \frac{i''}{2F u_{\text{H}_2}} L \frac{n_{fuel}}{n_{\text{H}_2}} M_{fuel}$

La conclusion	<p>L'importance et la nature des radiations thermiques sont déterminées en comparant les distributions de température obtenues par couplage des modèles Schuster-Schwarzchild/conduction et Monte Carlo /conduction dans le calcul supposant que la conduction est le seul mode de transfert de chaleur.</p> <p>Les résultats montrent que la radiation thermique a un effet négligeable sur le champ de température dans les couches électrodes et l'électrolyte. donc le rayonnement thermique peut être exclu sans risque d'une analyse CFD détaillée d'un SOFC planaire anode-supporté.</p>
---------------	---

Tableau 5:

Auteurs	Andrew C. Burt refinement of numerical models and parametric study of sofc stack performance (2005) [15]
Le type de la pile	planaire
La méthode et le code	volumes finis simulation (3D)
Le combustible	H ₂
La région	entre les parties solides de la pile
Les hypothèses	<ul style="list-style-type: none"> • L'écoulement du combustible est co-courant, contre-courant, et courant croisé • La variation dans la direction x sont petites par conséquent les termes de la diffusion sont négligés. • La pression est la même dans les canaux d'écoulement côté anode et côté cathode. • Nu = 4, k_{air} = 0.0672 W/m-K, et k_{fuel} = 0.255 W/m-K, et D_h = 0.001m • Les coefficients du transfert de chaleur par convection pour l'air et le combustible sont respectivement 268.8 et 1020 W/m²-K • Les conductivités thermiques, k_{H₂} = 0.423 W/m-K k_{H₂O} = 0.088 W/m-K • On considère que le gaz entre les surfaces ne participe pas aux

	<p>échanges radiatifs.</p> <ul style="list-style-type: none"> • Le PEN et les surfaces de séparation sont considérés comme des surfaces noires (avoir une émissivité d'unité, $\epsilon=1$). • Pour le 1-D modèle, le facteur de forme, F, est supposé égale à 1
Les équations et essentielles	<ul style="list-style-type: none"> • L'équation de masse $\forall \frac{\partial \rho}{\partial t} + (\rho u A_{xs})_w - (\rho u A_{xs})_0 = \dot{m}_{wrf}$ $m_{surf} = (m'' \Delta x l_w)_s - (m'' \Delta x l_w)_n$ • La conservation de masse des espèces $\frac{\forall \partial (\rho Y_k)}{\partial t} + (\rho Y_k u A_{xs})_w - (\rho Y_k u A_{xs})_0 = w_k \Delta x l_w$ • l'équation de mouvement $\frac{\forall \partial (u \rho)}{\partial t} + (u \rho u A_{xs})_w - (u \rho u A_{xs})_0 = \sum F_x$ • L'équation de l'énergie $\frac{\forall \partial (e \rho)}{\partial t} + (e \rho u A_{xs})_w - (e \rho u A_{xs})_0 = Q_{conv}$ • Le flux molaire pour l'espèce donné k est obtenu à partir de la densité de courant: $\omega_k = \frac{-i_{den}}{n_k F}$ • Le flux de chaleur généré $Q_{gén} = (i_{den})^2 R + T \Delta s \omega_{H_2}$ • La variation d'entropie totale par mole $\Delta s = \Delta s^0 + R_n \ln \frac{r_R}{r_p}$ • La loi du gaz parfait: $P = \rho R_u T$ • L'équation de Nernst $E = E^0 + \frac{R_u T}{2F} \ln \left[\frac{[X_{H_2}][X_{O_2}]^{1/2}}{[X_{H_2O}]} \right] + \frac{R_u T}{4F} \ln \frac{P}{P^0}, \quad E^0 = -\frac{\Delta G^0}{nF}$ • Les pertes ohmiques $\eta_{ohm} = i_{den} R_{net}$

	<ul style="list-style-type: none"> • Les pertes de concentration $\eta_{cooc} = \frac{R_u T}{nF} \ln \left(1 - \frac{i_{den}}{i_L} \right)$ • Les pertes d'activation $\eta_{act} = \frac{R_u T}{n\alpha F} \ln \left(\frac{i_{den}}{i_0} \right)$ • Le flux de chaleur net à travers les surfaces supérieures et inférieures du volume de contrôle $\dot{Q}_{net} = (\dot{Q}_{conv} + \dot{Q}_{rad} + \dot{Q}_{mass})_s - (\dot{Q}_{conv} + \dot{Q}_{rad} + \dot{Q}_{mass})_n$ • Le transfert de chaleur par convection $\dot{Q}_{conv} = h_c A_l (T_{siof} - T_{env})$ • Le nombre de Nusselt $Nu = 0.022 Re^{0.8} Pr^{0.6}$ • Le transfert de chaleur par rayonnement entre deux surfaces 1 et 2 $\dot{Q}_{rad} = A_1 F_{12} (\varepsilon_1 \sigma T_1^4 - \varepsilon_2 \sigma T_2^4)$ • Le facteur de forme F_{12} $F_{12} = F_{21} = [1 + H^2]^{1/2} - H$ • Le flux de chaleur radiatif net de la surface supérieure du $i^{ème}$ volume de contrôle à la surface inférieure du $j^{ème}$ volume du contrôle de l'interconnecteur $\dot{Q}_y = A_i F_y \sigma (T_i^4 - T_j^4)$ • Le flux de chaleur radiatif total de la surface supérieure du $i^{ème}$ volume du contrôle de PEN $\dot{Q}_i = \sum_{j=0}^n \dot{Q}_{ij} + \dot{Q}_{i.inter} + \dot{Q}_{i.outer}$
La conclusion	<ul style="list-style-type: none"> • Les résultats du modèle l'ordre réduit 3-D a montré que le plus grand gradient thermique peut être observé dans la géométrie du courant croisé que dans la géométrie co-courant. • Il a été observé que quand la dimension du stack augmente le gradient de température change d'un profil linéaire à non-linéaire. • On a trouvé que pour les distributions uniformes d'écoulement, les cellules du centre du stack tendent à fonctionner à la même

	<p>température.</p> <ul style="list-style-type: none"> • Aucune littérature n'existe dans le cas des distributions non-uniformes des écoulements. • La plus haute variation de tension de cellule-à-cellule observée quand il ya une redistribué du combustible entre la cellule inférieure et les cellules avoisinantes. • On a trouvé que le gradient de la température entre le bas et le haut de la cellule est réduit quand les effets du rayonnement sont pris en compte.
--	--

Tableau 6:

Auteurs	Vinod M. Janardhanan, Olaf Deutschmann Numerical study of mass and heat transport in solid-oxide fuel cells running on humidified methane <i>Chemical Engineering Science</i> 62 (2007) 5473 – 5486 [14]
Le type de la pile	planaire
La méthode et le code	Volumes Finis Simulation (2D)
Le combustible	méthane humidifié
La région	entre les électrodes et les interconnecteurs
Les hypothèses	<ul style="list-style-type: none"> • L'écoulement du combustible et de l'air à travers les canaux est unidimensionnel et co-courant. • Le transport des espèces à travers le milieu poreux est unidimensionnel dans toute l'épaisseur de la structure poreuse • La chaleur de la réaction est libérée à travers la surface solide • Les parois des interconnecteurs sont adiabatiques.
	<ul style="list-style-type: none"> • L'équation de conservation des espèces dans les canaux: $\frac{\partial(\rho_f Y_k)}{\partial t} = -\frac{\partial(\rho_f v Y_k)}{\partial z} + \frac{P_e}{A_c} J_k W_k, \quad k = 1, \dots, K_g$ • L'équation de conservation de masse $\frac{\partial \dot{m}}{\partial t} = -\frac{\partial(\dot{m} v)}{\partial z} + v \sum_{k=1}^{K_g} \frac{P_e}{A_c} J_k W_k$ • L'équation du gaz parfait

Les équations essentielles	$p\bar{M} = \rho_f RT$ <ul style="list-style-type: none"> L'équation de l'énergie $\frac{\partial(\rho_f C_{pf} T_f)}{\partial t} = -\frac{\partial(v\rho_f C_{pf} T_f)}{\partial z} - \frac{h}{H_c}(T_f - T_e) + \frac{h}{H_c}(T_1 - T_f)$ Le coefficient de transfert de chaleur h de Nusselt $Nu = \frac{hD_h}{k}$ $Nu = 3.095 + 8.933 \left(\frac{1000}{Gz}\right)^{-0.5386} \exp\left(-\frac{6.7275}{Gz}\right), Gz = \frac{D_h}{z} RePr$ Le transport des espèces à travers le milieu poreux $\frac{\partial(\phi\rho_f Y_k)}{\partial t} = -\frac{\partial(J_k W_k)}{\partial y} + \dot{s}_k W_k A_s$ La densité totale dans la structure poreuse $\frac{\partial(\phi\rho_f)}{\partial t} = -\sum_{k=1}^{K_g} \frac{\partial(J_k W_k)}{\partial y} + \sum_{k=1}^{K_g} \dot{s}_k W_k A_s$ Le flux molaire net des espèces $J_k = -\left[\sum_{k=1}^{K_g} D_{kl}^{DGM} \nabla[X_l] + \left(\sum_{k=1}^{K_g} \frac{D_{kl}^{DGM} [X_l]}{D_{l,kn}^e} \right) \frac{B_g}{\mu} \nabla p \right]$ L'équation de chaleur dans la structure poreuse $\frac{\partial(\rho C_p T)}{\partial t} = \nabla \cdot (K_{eff} \nabla T) + \frac{h}{\delta y} (T_f - T) - \sum_{k=1}^{K_g} \dot{s}_k W_k A_s h_k + Q_r + Q_e$ <ul style="list-style-type: none"> Le terme source de rayonnement $Q_r = \frac{1}{\delta y} \left[\frac{\sigma(T_1^4 - T^4)}{1/\varepsilon_l + 1/\varepsilon - 1} \right]$ Le bilan d'énergie dans l'électrolyte : $\frac{\partial(\rho C_p T)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(k \frac{\partial T}{\partial z} \right) + \frac{i^2}{\sigma_e}$ Le bilan d'énergie pour l'interconneceur : $\frac{\partial(\rho C_p T)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(k \frac{\partial T_l}{\partial z} \right) + \frac{h}{H_1} (T_f - T_l) - \frac{1}{H_1} \left[\frac{\sigma(T_l^4 - T^4)}{1/\varepsilon_l + 1/\varepsilon - 1} \right]$
----------------------------	---

	<ul style="list-style-type: none"> • La tension de fonctionnement de la pile $E_{oell} = E_{rev} - \eta_a(i) - \eta_c(i) - \eta_{ohm}(i) - \eta_{\infty nc}(i)$ • L'équation de Nernst $E_{rev} = E^0 + \frac{RT}{2F} \ln \left(\frac{PH_2, aPO_{2,c}^{1/2}}{PH_2O, a} \right)$ • Les pertes ohmiques $\eta_{ohm} = R_{tot} i$ • La résistance de l'électrolyte. $R_e = \frac{l_e}{\sigma_e} \quad \sigma_e = 3.34 \times 10^4 \exp \left(-\frac{10300}{T} \right)$ • La formule de Butler-Volmer. $i = i_0 \left[\exp \frac{(1 + \beta_a)F\eta_a}{RT} \right] - \exp \frac{\beta_c F\eta_a}{RT}$ • La densité de courant pour l'oxydation de l'hydrogène $I_0 = i_{H_2}^* \frac{\left(\frac{PH_2}{PH_2^*} \right)^{1/4} (PH_2O)^{3/4}}{1 + \left(\frac{PH_2}{PH_2^*} \right)^{1/2}}$ • La densité de courant pour la réduction de l'oxygène $I_0 = i_{O_2}^* \frac{\left(\frac{PH_2}{PH_2^*} \right)^{1/4}}{1 + \left(\frac{PH_2}{PH_2^*} \right)^{1/2}} \quad i_i^* = k_i \exp \left(-\frac{E_i}{RT} \right)$
La conclusion	<p>le réformage interne direct entraîne une chute de température près de l'entrée et l'utilisation de la chaleur produite par la cellule pour la réaction de réformage n'est pas possible dans le cas de co-courant parce que la cellule génère une quantité de chaleur en bas du canal.</p> <p>la configuration contre courant est plus appropriée pour réformage interne. Les effets des conditions d'entrée d'air ont été étudiés en gardant les conditions d'entrée du combustible constant. On a trouvé qu'une importante entrée d'air peut entraîner une grande densité de courant et une perte de chaleur élevée. La composition du combustible considérée ici résulte un gaz riche en hydrogène pour un canal long de 5cm.</p>

Tableau 7:

Auteurs	R. Suwanwarangkul, E. Croiset, M.D. Pritzker, M.W. Fowler, P.L. Douglas, E. Entchev Mechanistic modelling of a cathode-supported tubular solid oxide fuel cell <i>Journal of Power Sources</i> 154 (2006) [16]
Le type de la pile	tubulaire
La méthode et le code	les éléments finies simulation (2D)
Le combustible	Hydrogène humidifié H ₂
La région	entre la cellule et le tube de préchauffage d'air
Les hypothèses	<ul style="list-style-type: none"> • Le régime permanent, non-isotherme • L'écoulement du gaz dans les canaux est laminaire. • La pile à combustible fonctionne à 100% d'efficacité de courant. • Il n'y a pas de variation dans la température et la concentration des espèces dans la direction azimutale de la cellule. • Le transfert de la chaleur dans la cathode poreuse seulement par conduction, c.-à-d., l'enthalpie portée par l'oxygène dans l'espace du pore est négligeable. • Le transfert de la chaleur par radiation se produit seulement entre le tube de préchauffage d'air et la cellule. la distribution de la température le long d'une cellule est la même d'une cellule à une cellule adjacente. • La résistance du transfert de masse à travers l'anode poreuse est ignorée à cause de sa petite épaisseur et la diffusivité élevée de l'H₂. • La chute ohmique dans la cellule est due aux résistances ioniques de l'électrolyte et résistances électroniques des électrodes poreuses. • La densité de courant de la cathode est égale à celle de l'anode.

<p>Les équations essentielles</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Les résistances de la cathode et l'anode : $R_{An} = \frac{L_{pat h, An}}{v_{An} A_{An}} \quad R_{cat} = \frac{L_{pat h, cat}}{v_{cat} A_{cat}}$ • L'équation de courant pour la région anodique $\frac{\phi_{a,j} - \phi_{a,j-1}}{R_{An}} - \frac{\phi_{a,j+1} - \phi_{a,j}}{R_{An}} - I_E A_E = 0$ • La distribution de potentiel, ϕ_E, dans l'électrolyte $\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{r \sigma E \partial \phi_E}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{r \sigma E \partial \phi_E}{\partial z} \right) = 0$ • La densité de courant anodique et cathodique $J_{An} = \frac{10\,000RT}{3F} s_{An} \left\{ \exp\left(\frac{2F\eta_{An}}{RT}\right) - \exp\left(\frac{-F\eta_{An}}{RT}\right) \right\}$ $J_{cat} = \frac{10\,000RT}{4F} s_{cat} \left\{ \exp\left(\frac{-2F\eta_{cat}}{RT}\right) - \exp\left(\frac{-F\eta_{cat}}{RT}\right) \right\}$ • Les surtensions anodiques et cathodiques $\eta_{An} = \phi_{An} - \phi_E - E_{An}^0$ $\eta_{cat} = \phi_{cat} - \phi_E - E_{cat}^0$ • L'équation de conservation de masse: $\frac{\partial(\rho_i v_i)}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial(r \rho_i u_i)}{\partial r} = 0$ • La quantité de mouvement dans la direction z: $\frac{\partial(\rho_i v_i v_i)}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial(r \rho_i u_i v_i)}{\partial r}$ $= -\frac{\partial p_i}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_i \frac{\partial v_i}{\partial z} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu_i \frac{\partial v_i}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_i \frac{\partial v_i}{\partial z} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu_i \frac{\partial v_i}{\partial z} \right)$ • La quantité de mouvement dans la direction r: $\frac{\partial(\rho_i v_i v_i)}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial(r \rho_i u_i v_i)}{\partial r}$ $= -\frac{\partial p_i}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_i \frac{\partial u_i}{\partial z} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu_i \frac{\partial u_i}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_i \frac{\partial u_i}{\partial z} \right)$ $+ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu_i \frac{\partial u_i}{\partial z} \right) - \frac{2\mu_i u_i}{r^2}$
-----------------------------------	--

	<ul style="list-style-type: none"> • L'équation de l'énergie: $\frac{\partial(\rho_i C_{p_i} v_i T)}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial(r \rho_i C_{p_i} u_i T)}{\partial r} = \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda_i \frac{\partial T}{\partial z} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \lambda_i \frac{\partial T}{\partial r} \right) + Q$ • le transport des espèces: $\frac{\partial(C_j M_j v_i)}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial(r C_j M_j u_i)}{\partial r} = \frac{\partial}{\partial z} \left(D_i \frac{\partial C_j}{\partial z} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r D_i \frac{\partial C_j}{\partial r} \right) + S_j$ • Le flux molaire du gaz est donné par: $\frac{-p}{RT} \nabla y_l = \frac{\vec{N}_l}{D_{l,k}^{eff}} + \sum_{l=1, m \neq 1}^n \frac{y_m \vec{N}_l - y_l \vec{N}_m}{D_{l,m}^{eff}} + \frac{y_l}{RT} \left(1 + \frac{B_0 p}{D_{l,k}^{eff} \mu} \right) \nabla p$ • Le flux massique d'O₂ $\dot{m}_{O_2} = - \frac{D_{O_2,k}^{eff} D_{O_2-N_2}^{eff}}{\left[D_{O_2-N_2}^{eff} + \left(1 - \frac{CO_2}{C_{tot}} \right) D_{O_2,k}^{eff} + \left(\frac{CO_2}{C_{tot}} \right) D_{O_2,k}^{eff} \right]} M O_2 \nabla c_{O_2}$ • Le facteur de correction pour la chaleur radiative $F_r = \frac{\varepsilon_{air} \varepsilon_{APT} (1 - \varepsilon_{air})}{\left[1 - \left\{ 1 + \frac{r_{APT}}{r_{AC}} \varepsilon_{Cat} \varepsilon_{air} - \varepsilon_{air} - \varepsilon_{Cat} \right\} (1 - \varepsilon_{air}) (1 - \varepsilon_{APT}) \right]}$
<p>La conclusion</p>	<p>Le modèle montre une bonne concordance avec les courbes de courant-potentiel et les données expérimentales de la littérature. Les distributions de courant, la température, densité de courant et concentration des espèces contribuent à une meilleure compréhension du phénomène de transport dans la cellule. Les résultats du modèle montrent que la diffusion de l'O₂ à travers la cathode poreuse (épaisse) limite la performance de la cellule SOFC de type tubulaire.</p>

Tableau 8:

<p>Auteurs</p>	<p>D. Sánchez, R. Chacartegui, A. Muñoz, T. Sánchez Thermal and electrochemical model of internal reforming solid oxide fuel cells with tubular geometry <i>Journal of Power Sources</i> 160 (2006) [17]</p>
<p>Le type de la pile</p>	<p>tubulaire</p>
<p>La méthode et le code</p>	<p>la méthode de volumes finis simulation (02D)</p>

Le combustible	Méthane
La région	entre le tube de l'injection d'air et la surface de la cathode entre combustible et la surface de l'anode
Les hypothèses	<ul style="list-style-type: none"> • La cellule Siemens-Westinghouse, est formée de 24 cellules tubulaires. • Les coefficients de transfert de charge sont considérés symétriques et égales à 0.5 • Le transfert de chaleur par conduction axiale se produit à l'intérieur de la structure solide de la cellule. • Le transfert de chaleur par convection radiale au surface libre qui incluent les parois internes et externes de la cellule et l'air. • Le nombre de Prandtl est près d'unité (0.7). • Le nombre de Reynolds critique est de 2300 • La variation de la masse molaire est due à l'écoulement de gaz à l'intérieur de la conduite. • La chaleur libérée et/ou consommée est due au réformage, (changement) et/ou réaction de l'oxydation. • La Chaleur par effet de Joule est due aux conducteurs (cathode, anode et électrolyte).
	<ul style="list-style-type: none"> • L'équation de Nernst $E = E_0 + \frac{RT}{n_0 F} \ln \left(\frac{P_{H_2} P_{O_2}^{1/2}}{P_{H_2O}} \right)$ $E_0 = 1.26485 - 2.4725 \times 10^{-4} T - 1.875 \times 10^{-8} T^2$ • L'équation de Butler–Volmer $i = i_0 \left\{ \exp \left(\alpha_a \frac{n_e F \Delta V_{act}}{RT} \right) - \exp \left(\alpha_c \frac{n_e F \Delta V_{act}}{RT} \right) \right\}$ $i = 2i_0 \sinh \left(\frac{n_e F \Delta V_{act}}{RT} \right)$ • Les pertes d'activation : $\Delta V_{act} = a + b \ln i$ $\Delta V_{act} = \frac{RT}{n_e F i_0}$

Les équations
essentiels

- La densité du courant pour l'anode et la cathode:

$$i_{o,a} = \gamma_a \left(\frac{PH_2}{P_{ref}} \right)^a \left(\frac{PH_2}{P_{ref}} \right)^b \exp \left(-\frac{E_{act,a}}{RT} \right)$$

$$i_{o,a} = \gamma_a \left(\frac{PO_2}{P_{ref}} \right)^c \exp \left(-\frac{E_{act,a}}{RT} \right)$$

- Les pertes Ohmique:

$$\Delta V_{ohm} = iR_{ef}$$

- Les pertes de concentration :

$$\Delta V_{\infty n} = \frac{RT}{n_e F} \ln \left(\frac{P_{H_2}^* P_{H_2O}^0}{P_{H_2}^0 P_{H_2O}^*} \right) + \frac{RT}{n_e F} \ln \frac{P_{O_2}^*}{P_{O_2}^0}$$

- Les pertes de concentration dans la cathode et l'anode

$$V_{\infty n} = \frac{RT}{n_e F} \ln \left(\frac{1}{x_{O_2}^0} - \left(\frac{1}{x_{O_2}^0} - 1 \right) \exp \left(\frac{iRT_{tc}}{2n_e F D_{ef,cp}} \right) \right)$$

$$V_{\infty n} = \frac{RT}{n_e F} \ln \left(\frac{1 - \frac{iRT_{tc}}{2FD_{ef,a}x_{H_2}^0 P}}{1 + \frac{iRT_{tc}}{2FD_{ef,a}x_{H_2O}^0 P}} \right)$$

- La tension de fonctionnement dans la cellule

$$V = E - \Delta V_{act} - \Delta V_{ohm} - V_{\infty n}$$

- La loi de Faraday

$$\Delta \dot{n}_{H_2} = -\frac{iS}{n_e F} = -\Delta \dot{n}_{H_2O} = 2\Delta \dot{n}_{O_2}$$

- Le flux de chaleur par conduction (la loi de Fourier)

$$q_{cond} = -k_{cd} \frac{\partial T}{\partial x} = -k_{cd} \frac{\Delta T}{\Delta x}$$

- La conductivité moyenne

$$\bar{k}_{cd} = \frac{k_{cd,ctc} + k_{cd,ete} + k_{cd,ata}}{t_a + t_e + t_c}$$

- Le flux de chaleur par convection (la loi de Newton)

$$q_{cond} = h_{cv} (T_{sup} - T_{gas})$$

- Le flux de chaleur total échangé par radiation entre la cathode et tube de l'alimentation de l'air à chaque partie

	$Q_{rad} = \frac{\sigma(T_{cathode}^4 - T_{injector}^4)}{\frac{1}{\varepsilon_{cathode}} + \frac{D_{cathode}}{D_{injector}} \left(\frac{1}{\varepsilon_{injector}} - 1 \right)}$ <ul style="list-style-type: none"> L'émissivité du gaz anodique $\varepsilon_{gas} = \varepsilon_{CO_2} + \varepsilon_{H_2O} - \varepsilon_{CO_2} \varepsilon_{H_2O}$ L'émissivité de chaque gaz $\varepsilon_i = \sum_{i=1}^3 C_i (1 - \exp(-k_i p_i L))$ L'absorptivité du gaz $\alpha_{gas} = \varepsilon_{CO_2} \left(\frac{T_{gas}}{T_{surface}} \right)^{0.65} + \varepsilon_{H_2O} \left(\frac{T_{gas}}{T_{surface}} \right)^{0.45} - \varepsilon_{CO_2} \varepsilon_{H_2O}$ Le flux de chaleur radiative échangé entre le gaz anodique et la surface $q_{rad} = \frac{\varepsilon_{surface} \sigma}{1 - (1 - \alpha_{gas})(1 - \varepsilon_{surface})} (\varepsilon_{gas} T_{gas}^4 - \alpha_{gas} T_{surface}^4)$
La conclusion	<ul style="list-style-type: none"> L'effet de radiation du gaz anodique peut être négligé sous conditions de fonctionnement normal. Cependant, les résultats devraient être diminués de 1% si le débit du combustible augmente considérablement, cette situation reflète une haute densité de courant et de pression. La réaction de réformage n'est pas uniforme le long de la cellule. il devrait être pris en considération si l'équilibre est atteint ou pas, spécialement quand la concentration du méthane baisse et la température augmente. Ces conditions se trouvent dans la deuxième partie de la cellule.

Tableau 9:

Auteurs	Christoph Stiller, Bjørn Thorud, Steinar Seljebø, Øistein Mathisen, Havard Karoliussen, Olav Bolland Finite-volume modeling and hybrid-cycle performance of planar and tubular solid oxide fuel cells <i>Journal of Power Sources</i> 141 (2005) 227–240 [18]
Le type de la pile	Tubulaire et planaire

La méthode et le code	Volumes finies simulation (2D)
Le combustible	méthane
La région	radiation entre le tube d'injecteur et la cathode
Les hypothèses	<ul style="list-style-type: none"> • La pile SOFC de type planaire à électrolyte supporté et courant croisé • La géométrie tubulaire est basée sur la technologie du Siemens-Westinghouse à cathode supportée • L'écoulement est laminaire. • Réformage interne au niveau de l'anode. • Les limites sont adiabatiques. • La cinétique électrochimique est limitée à la surtension d'activation, c.-à-d. aucune surtension de la diffusion n'est calculée. • Dans le modèle planaire, chaque C.V possède une seule température noeudale pour le solide, air et le combustible. • Le modèle tubulaire possède en plus une température modale de l'air injecté et le tube d'injecteur. • Le transfert de chaleur par conduction est calculé dans deux dimensions dans le modèle planaire. pour le modèle tubulaire le transfert de chaleur par conduction est calculé dans la direction axiale aussi bien que radiation entre les tubes concentriques. • Le rayonnement à l'intérieur de la cellule planaire n'est pas inclu. Dans la cellule tubulaire, radiation entre le solide et le tube de l'injection modélisé.

Les équations essentielles

- L'expression analytique pour la résistance ohmique de C.V

$$R_{\Omega}(\Omega) = L_{CV} \left(\frac{\left(\frac{\rho_a}{d_a}\right)^2 + \left(\frac{\rho_0}{d_0}\right)^2 \cosh(Je) + \frac{\rho_a \rho_0}{d_a d_0} (2 + Je \sinh(Je))}{2 \left(\frac{1}{\rho_c d_c}\right)^{1/2} \left(\frac{\rho_a}{d_a} + \frac{\rho_0}{d_0}\right)^{3/2} \sinh(Je)} + \frac{\sqrt{\rho_{ic} \delta_{ic} \left(\frac{\rho_0}{d}\right)}}{2 \tanh(J_{ic})} \right)$$

- Le potentiel de la cellule

$$U = E^{rev} - R_{\Omega} I - \eta$$

- Le bilan de chaleur de l'air dans le modèle planaire

$$\alpha_{air} A_c (T_{air}^{i,j} - T_s^{i,j}) = \sum_{CO}^{CO_{air}} (C_{p.CO} (T_{air}^{i,j-1}) n_{CO}^{i,j-1} T_{air}^{i,j-1} - C_{p.CO} (T_{air}^{i,j}) n_{CO}^{i,j} T_{air}^{i,j})$$

- le bilan de chaleur du combustible dans le modèle planaire

$$\alpha_f A_c (T_f^{i,j} - T_s^{i,j}) = \sum_{CO}^{CO_f} (C_{p.CO} (T_f^{i,j-1}) n_{CO}^{i,j-1} T_f^{i,j-1} - C_{p.CO} (T_f^{i,j}) n_{CO}^{i,j} T_f^{i,j})$$

- Le bilan de chaleur dans le solide est donné par:

$$\frac{T_f^i - T_s^i}{R_{t1}} = \sum_{CO}^{CO_f} (C_{p.CO} (T_f^{i-1}) n_{CO}^{i-1} T_f^{i-1} - C_{p.CO} (T_f^i) n_{CO}^i T_f^i) \frac{2T_s^{i,j} - T_s^{i+1,j} - T_s^{i-1,j}}{R_{p,i}} + \frac{2T_s^{i,j} - T_s^{i+1,j} - T_s^{i-1,j}}{R_{p,j}} + \alpha_{air} A_c (T_s^{i,j} - T_{air}^{i,j}) + \alpha_f A_c (T_s^{i,j} - T_f^{i,j}) = -rCH_4 \Delta H_{ref} - rCO \Delta H_{shift} - r_{H_2} (\Delta H_{electro} + 2UF) - Q_{p.peref}^{i,j}$$

- Le bilan de chaleur du combustible dans le modèle tubulaire

$$\frac{T_f^i - T_s^i}{R_{t1}} = \sum_{CO}^{CO_f} (C_{p.CO} (T_f^i) n_{CO}^{i-1} T_f^{i-1} - C_{p.CO} (T_f^i) n_{CO}^i T_f^i)$$

	<ul style="list-style-type: none"> Le bilan de chaleur de tube solide: $\frac{2T_s^i - T_s^{i+1} - T_s^{i-1}}{R_{t,ax}} + \frac{T_s^i - T_f^i}{R_{t1} + \frac{1}{2}R_{t2}} + \frac{T_s^i - T_a^i}{R_{t3} + \frac{1}{2}R_{t2}} + \dot{Q}_{s,rad}^i - \dot{Q}_{s,irrad}^i$ $= -rCH_4\Delta H_{ref} - rCO\Delta H_{shift} - r_{H_2}(\Delta H_{electro} + 2UF)$ $- \dot{Q}_{t.peref}$ Le terme radiatif exprimé comme suite: $\dot{Q}_{s,rad}^i = (0.3 + 2 \times 0.1 + 2 \times 0.08)\varepsilon\sigma A_s (T_s^i)^4 = 0.64\varepsilon\sigma A_s (T_s^i)^4$ Le bilan de chaleur de l'air cathodique entre l'injecteur et la cathode $\frac{T_a^i - T_a^i}{R_{t3} + \frac{1}{2}R_{t2}} + \frac{T_{a1}^i - T_{inj}^i}{R_{t4}}$ $= \sum_{CO}^{CO_{a1}} (C_{p.CO}(T_{a1}^{i-1})n_{CO}^{i-1}T_{a1}^{i-1} - C_{p.CO}(T_{a1}^i)n_{CO}^i T_{a1}^i)$ Le bilan de chaleur du tube d'injection $\frac{T_{inj}^i - T_{a1}^i}{R_{t4}} + \frac{T_{inj}^i - T_{a2}^i}{R_{t5} + R_{t6}} + \dot{Q}_{inj,rad}^i - \dot{Q}_{inj,irrad}^i = 0$ $\dot{Q}_{inj,rad}^i = (0.64 + 2 \times 0.18)\varepsilon\sigma A_{inj} (T_{inj}^i)^4 = \varepsilon\sigma A_{inj} (T_{inj}^i)^4$ Le bilan de chaleur du gaz dans l'injecteur $\frac{T_{a2}^i - T_{inj}^i}{R_{t5} + R_{t6}} = \sum_{CO}^{CO_{a2}} (C_{p.CO}(T_{a2}^{i+1})n_{CO}^{i+1}T_{a2}^{i+1} - C_{p.CO}(T_{a2}^i)n_{CO}^i T_{a2}^i)$
La conclusion	<ul style="list-style-type: none"> Il a été montré que les systèmes mixtes peuvent réaliser des efficacités au-dessus de 65% avec la géométrie plane aussi bien que tubulaire. La différence principale entre le système plane et tubulaire pour le cycle de la turbine à gaz est le pré-chauffage interne de l'air dans le système tubulaire, en autorisant une température de l'entrée de l'air basse. L'efficacité des deux systèmes à très hautes pressions peut être atteinte par cette méthode. Dans le cas du système plane, le

	supplément de la puissance du cycle GT peut être amélioré significativement. Cet effet pourrait jouer un rôle dans le contrôle de la puissance de sortie de système mixte.
--	--

II.1. synthèse des travaux utilisant le modèle de rayonnement de Schuster–Schwarzchild

✚ Murthy et Fedorov [10]

Ont étudié l'électrolyte-supporté à contre-courant d'une pile SOFC de type monolithique en deux dimensions, ils ont pris en considération le transfert de chaleur par rayonnement dans l'épaisseur optique des électrodes poreuses. La simulation par l'approximation de diffusion et l'épaisseur optique de l'électrolyte (YSZ) a été modélisée en utilisant la méthode des deux-flux de Schuster–Schwarzchild. Ils ont comparé la méthode des deux-flux de Schuster–Schwarzchild et la méthode de discrétisation ordinaire (DO). Ils ont conclu que la méthode de discrétisation ordinaire peut être remplacée par l'approximation de diffusion de Rosseland pour les épaisseurs optiques des électrodes et la méthode de Schuster-Schwarzchild des deux flux pour l'épaisseur optique de l'électrolyte et ont montré que la radiation thermique à travers l'électrolyte affecte la température de fonctionnement et la tension dans une cellule du type monolithique. L'épaisseur de l'électrolyte (500 μm) dans le type monolithique influence significativement sur la distribution de température (abaissement 180 K et augmente la tension de la cellule de 0.65 V à 0.74V). Dans le cas d'une cellule planaire à anode supportée avec électrolyte mince, l'effet du rayonnement est négligeable comparé à la conduction dans le solide (voir le tableau 1).

✚ Damm et Fedorov [11]

Ont traité le transfert de la chaleur par rayonnement dans les différents composants de la pile SOFC. Ils ont étudié la géométrie tubulaire et planaire à anode-supportée en deux dimensions à contre-courant. Ils ont mesuré et analysé le transfert de chaleur radiatif spectral à l'interface entre l'électrolyte, les électrodes, le coefficient d'absorption et l'indice de réfraction d'un électrolyte polycristallin YSZ. La méthode de Schuster-Schwarzchild a été utilisée pour modéliser le transfert de chaleur par rayonnement à travers l'électrolyte, mais dans ce traitement, ils ont supposé que les électrodes étaient opaques et ont pris en compte les effets des gaz dans les canaux. Ils ont trouvé que le transfert de chaleur par rayonnement dans l'électrolyte a un effet négligeable sur la température moyenne de fonctionnement et la

tension de la cellule. Mais il peut être utilisé dans l'analyse thermique du système SOFC (voir le tableau 3).

✚ K.J. Daun et al. [12]

ont étudié la radiation dans une pile SOFC de type planaire à anode-supportée en deux dimensions. Ils ont considéré le transfert de chaleur par rayonnement dans l'anode, électrolyte, et la cathode. Ils ont comparé les distributions de température en utilisant le couplage Schuster-Schwarzchild / conduction et Monte Carlo/conduction.

Ils ont supposé dans les calculs que la conduction est le seul mode de transfert de la chaleur. Il a été montré que cette radiation thermique a un effet négligeable sur le champ de température dans les couches des électrodes et l'électrolyte et peut être exclue sans risque d'une analyse CFD détaillée d'une SOFC planaire à anode-supportée (voir le tableau 4).

II.2. Synthèse des travaux utilisant la même méthode numérique

✚ T. Tanaka, Y. Inui *, A. Urata, T. Kanno [13]

Les auteurs ont développé un code de simulation en trois dimensions à co-courant d'une pile SOFC du type planaire, en utilisant la méthode du volume finie. Le transfert de chaleur de la radiation se produit entre les surfaces du stack et les parois intérieures. La quantité du transfert de chaleur par radiation est déterminée par la loi de Stefan-Boltzmann. Pour faire la distribution de la température, les stacks environnants et les parois devraient être arrangées extérieurement comme condition au limite parce que ces alentours ne sont pas inclus dans la région d'analyse. Les résultats indiquent que le transfert de la chaleur par radiation réduit la tension de la cellule quand la température ambiante est basse (voir le tableau 2).

✚ Vinod M. Janardhanan, Olaf Deutschmann [14]

L'étude théorique porte sur le mécanisme non isotherme et hétérogène d'une pile à combustible SOFC planaire à anode supportée à co-courant avec réformage interne de CH_4 humidifié. Le modèle électrochimique appliqué est celui de Butler-Volmer modifié, basé sur la cinétique de transfert de charge élémentaire. Les paramètres exigés par ce modèle électrochimique sont des données expérimentales. Dans cette étude, on a utilisé la méthode des volumes finis. Le transport à travers le milieu poreux est modélisé selon le modèle (DGM). Le transfert de chaleur radiative est considéré entre les électrodes et les interconnecteurs. Il n'y a aucune différence considérable dans la température entre le côté anode (interconnecteurs) et la température du combustible dans le canal. Cependant, il y a une différence de température considérable entre le courant d'air et la cathode côté interconnecteurs (voir le tableau 6).

✚ Andrew C. Burt 2005 [15]

A développé le modèle de deux ordres réduits (Two reduced order models) (ROMs), le modèle du Pseudo 2-D et le modèle de l'Ordre Réduit 3-D à co-courant, contre-courant et courant -croisé d'une pile SOFC de type planaire, utilisant la méthode numérique des volumes finis. L'auteur a étudié l'influence de la dimension du stack sur la performance de la cellule individuelle pour les stacks contenant plus de 40 cellules reliées en séries. C'était la première étude où on modélise un stack de 40 cellules dans une période de temps raisonnable (14 jours de calculs avec 40 processeurs). On a observé que si la dimension du stack augmente le gradient de la température dans le stack change d'un profil linéaire à non-linéaire. Ce profil non-linéaire a été publié en premier par l'auteur (Burt et al, 2004a et Burt et al. 2004b). Il a considéré le transfert de chaleur radiative entre la plaque séparatrice avoisinante et la structure du PEN. Il a trouvé que le gradient de température au surfaces supérieures et inférieures de la cellule ont été réduites quand les effets de la radiation ont été inclus (voir le tableau5).

II.3.Synthèse des travaux étudiant le rayonnement dans la même région et même géométrie

✚ R. Suwanwarangkul et al [16]

Un modèle à deux dimensions d'une pile à combustible de l'oxyde solide (SOFC) tubulaire a été développé avec la méthode des éléments finis. Ils ont utilisé les équations de conservation (quantité de mouvement, de masse, de l'énergie et le transport de charge). Les phénomènes du transport à l'intérieur de la cellule, y inclu le comportement du gaz, la température, la surtension, la densité de courant et la concentration de l'espèce sont analysées et discutées en détail. Le transfert de chaleur par rayonnement entre la cellule et le tube d'air-préchauffant est aussi inclu dans ce modèle. Les résultats du modèle suggèrent que la diffusion de l'O₂ à travers la cathode poreuse épaisse limite la performance de la cellule et montre l'importance de transfert de chaleur radiative dans un modèle SOFC tubulaire (voir le tableau7).

✚ D. S'anchez et al [17]

Les auteurs ont présenté un modèle axisymétrique à deux dimensions d'une pile à combustible du type (SOFC) tubulaire avec réformage du méthane. La simulation du phénomène du transfert de chaleur à l'intérieur de la cellule (Utilisant la méthode des volumes finis) a été faite d'une façon très prudente. Pour ce but, l'échange de chaleur radiative entre le gaz anodique et les surfaces de l'anode et la chaleur radiative radiale entre l'intérieure de la

cathode et les parois externes du tube d'alimentation de l'air sont inclus pour évaluer leurs effets sur la performance globale. Les résultats montrent que le comportement de la réaction de réformage n'est pas constant le long de la cellule. Il devrait être pris en considération si l'équilibre est atteint ou pas, spécialement quand la concentration du méthane baisse et la température augmente. Ces conditions se trouvent habituellement dans la seconde moitié de la cellule et l'effet de radiation du gaz de l'anode peut être négligé dans les conditions de fonctionnement normal. Cependant, les résultats devraient être diminués de 1% si le débit du combustible augmente considérablement, cette situation est reliée à la haute densité de courant et de la pression (voir le tableau 8).

✚ Christoph Stiller et al [18]

Les auteurs ont décrit un état stable pour une pile à combustible de l'oxyde solide (SOFC) avec les géométries planaires et tubulaires en deux dimensions (2D) avec le méthane comme combustible. Ils ont utilisé la méthode des volumes finis. Ils ont fait des suppositions simplificatrices pour calculer la résistance Ohmique, le transfert de chaleur par convection par conduction et par rayonnement. Le transfert de chaleur par rayonnement à l'intérieur de la cellule planaire n'est pas inclus, dans la cellule tubulaire. Le transfert de chaleur par rayonnement entre le tube de l'injection et la cathode est modélisé. La densité du courant d'air et de la pression sont les paramètres les plus importants de la performance du système planaire, mais pour le système tubulaire ces paramètres ont moins d'impact (voir le tableau 9).

Introduction

Dans ce chapitre nous présentons les différents modèles de sources rayonnement qui ont été utilisés par différents auteurs

En général, l'électrolyte et les électrodes poreux de SOFC sont des matériaux semi-transparents; c'est pour cela qu'ils peuvent absorber, diffuser, et émettre la radiation thermique.

III.1. Les différents modèles de source de rayonnement :

On choisit quelques modèles pour la géométrie plane

III.1.1. Modèle de Sunil Murthy, Andrei G. Fedorov et David L. Damm, Andrei G. Fedorov:

a-Dans la partie solide (l'électrolyte) :

Le transfert de chaleur par radiation peut être calculé par couplage avec l'équation d'énergie, en introduisant la divergence du flux de chaleur par rayonnement comme un terme source (négatif) dans l'équation d'énergie.

Pour un milieu gris, non-diffusif situé entre deux plaques noires parallèles isothermes, avec températures T_{sup} et T_{inf} et séparé par une distance L , le modèle de Schuster-Schwartzchild (two-flux approximation) donne le flux de chaleur par rayonnement comme suit :

$$q_R(y) = C_1 e^{2ky} + C_2 e^{-2ky} \quad (III.1)$$

$$C_1 = -\sigma(T_{sup}^4 - T^4)e^{-2kl} \quad , \quad C_2 = \sigma(T_{inf}^4 - T^4)$$

$\tau = k l$ est l'épaisseur optique de l'électrolyte

k : le coefficient de l'absorption

l : l'épaisseur de l'électrolyte

σ : constant de Boltzman

b-dans les milieux poreux (les électrodes)

La source radiative à partir du modèle de Rosland

$$S_R = -K_R \nabla T \quad (III.2)$$

$$K_R = \frac{16n^2\sigma T^3}{3B_R}$$

K_R : la conductivité radiative. B_R : le coefficient d'extinction de Rosseland

III.1.2. Modèle de Yakabe

Il suppose que le transfert de chaleur radiative dans les canaux et les surfaces soit des corps noirs, le flux de chaleur par rayonnement s'écrit [19] :

$$dq_{i-j} = \cos\phi_i \cos\phi_j \frac{dA_i dA_j}{\pi r^2} \varepsilon_i \varepsilon_j (E_i - E_j) \quad (\text{III.3})$$

$$dq_{i-j} = \cos\phi_i \cos\phi_j \frac{dA_i dA_j}{\pi r^2} \varepsilon_i \varepsilon_j \sigma (T_i^4 - T_j^4) \quad (\text{III.4})$$

III.1.3. Modèle d'Andrew C. Burt

L'échange de chaleur entre deux surfaces 1 et 2 peut être calculé comme suit :

$$Q_{rad} = A_1 F_{12} (\varepsilon_1 \sigma T_1^4 - \varepsilon_2 \sigma T_2^4) \quad (\text{III.5})$$

III.1.4. Modèle de Vinod M. Janardhanan

Le transfert de chaleur radiative entre les électrodes et les interconnecteurs.

$$Q_r = \frac{1}{\delta y} \left[\frac{\sigma(T_i^4 - T_j^4)}{1/\varepsilon_i + 1/\varepsilon_j - 1} \right] \quad (\text{III.6})$$

Dans notre étude on a choisi le modèle de (Schuster-Schwartzchild) (two-flux approximation) parce qu'il donne la solution plus simple pour la radiation dans un milieu plan parallèle, mince et unidimensionnel.

III.2. Modèle physique :

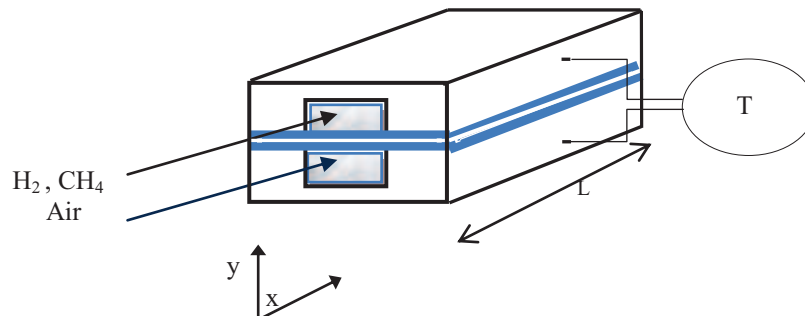


Figure III.1: Schéma d'une pile SOFC[20]

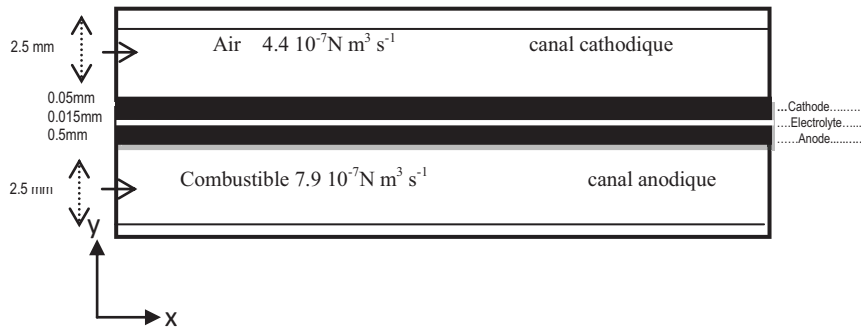


Figure III.2 Schéma d'une cellule élémentaire d'une pile SOFC à anode supportée [20].

III.3. Modélisation mathématique :

III.4. Les Hypothèses simplificatrices

- ✚ L'écoulement est permanent c.-à-d. : $\frac{\partial}{\partial t} = 0$.
- ✚ Les gaz réactants et produits sont assimilés comme des gaz parfaits donc : $P = \rho RT$
- ✚ Le transfert de chaleur radiative dans les canaux, l'interconnecteur et l'environnement est négligeable
- ✚ L'écoulement dans le milieu poreux (les électrodes) est laminaire Co-courant stratifié en 2D.
- ✚ Le milieu poreux est homogène isotrope c.-à-d. : $\lambda_x = \lambda_y = \lambda_z$

III.5. Equations régissant du phénomène :

a-Electrolyte

1-Equation d'énergie:

Le transfert de chaleur du aux diffusions dans la partie solide de la pile est plus dominant que le transfert du aux conduction donc l'équation s'écrit comme suit [21]:

$$\frac{\partial}{\partial X} \left(\lambda_{eff,éle} \frac{\partial T}{\partial X} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\lambda_{eff,éle} \frac{\partial T}{\partial y} \right) + S_{T,éle} = 0 \quad (III.7)$$

✚ Les termes de source

-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 :

$$S_{\text{ohm,éle}} = \frac{i^2}{\sigma_{\text{éle}}} \quad (\text{III.8})$$

-Source radiative

$$q_R(y) = C_1 e^{2ky} + C_2 e^{-2ky} \quad (\text{III.9})$$

$$C_1 = -\sigma(T_{\text{sup}}^4 - T^4)e^{-2kl} \quad (\text{III.10})$$

$$C_2 = \sigma(T_{\text{inf}}^4 - T^4) \quad (\text{III.11})$$

$\tau = kl$ c'est l'épaisseur optique de l'électrolyte

k : le coefficient de l'absorption

l : l'épaisseur de l'électrolyte

III.5.1. Equation de conservation des espèces

a-L'anode :

L'équation de conservation de la masse d'hydrogène dans l'anode de la pile, tient compte de deux flux, diffusif et convectif et prend la forme suivante :

$$\frac{\partial}{\partial x} \left((\rho u) X_{\text{H}_2} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left((\rho v) X_{\text{H}_2} \right) = \frac{\partial}{\partial x} \left[D_{\text{eff,H}_2} \cdot \frac{\partial X_{\text{H}_2}}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[D_{\text{eff,H}_2} \cdot \frac{\partial X_{\text{H}_2}}{\partial y} \right] + S_{\text{H}_2,\text{an}} \quad (\text{III.12})$$

On a une consommation d'hydrogène du côté anodique, l'expression du terme source et le coefficient de diffusion prend les formes suivantes :

$$D_{\text{eff,H}_2} = \left(\frac{\xi}{\zeta} \right) \cdot D_{\text{H}_2,\text{H}_2\text{O}} \quad (\text{III.13})$$

$$D_{\text{H}_2,\text{H}_2\text{O}} = \frac{(a_1 + a_2 T + a_3 T^2)}{(1 + b_1 T)} \quad (\text{III.14})$$

$$S_{\text{H}_2,\text{an}} = -\frac{M_{\text{H}_2} \cdot j}{2F} \quad (\text{III.15})$$

ξ ζ Sont respectivement la porosité et la tortuosité.

M_{H_2} : La masse molaire de l'hydrogène,

j : La densité du courant

F : le constant de Faraday

D_{eff,H_2} : Le coefficient de diffusion effective de $L'H_2$.

Le terme source de l'hydrogène désigné par le signe moins car c'est un taux de consommation, par contre la source de vapeur d'eau est un taux de production.

La masse de la vapeur d'eau est transportée par diffusion et convection dans l'anode, l'équation de la conservation de masse d'eau est donnée par:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left((\rho u) X_{H_2O} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left((\rho v) X_{H_2O} \right) = \frac{\partial}{\partial x} \left[D_{\text{eff},H_2O} \cdot \frac{\partial X_{H_2O}}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[D_{\text{eff},H_2O} \cdot \frac{\partial X_{H_2O}}{\partial y} \right] + S_{H_2O,\text{an}} \quad (\text{III.16})$$

Cette source massique de la vapeur d'eau est due à la réaction électrochimique, c'est une production d'eau dans l'anode [9]:

$$S_{H_2O,\text{an}} = \frac{M_{H_2O} j}{2F} \quad (\text{III.17})$$

b- La Cathode :

La masse de l'espèce oxygène est transportée par diffusion et convection dans la cathode de la pile. L'équation de conservation de masse d'oxygène est donnée par [9]:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left((\rho u) X_{O_2} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left((\rho v) X_{O_2} \right) = \frac{\partial}{\partial x} \left[D_{\text{eff},O_2} \cdot \frac{\partial X_{O_2}}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[D_{\text{eff},O_2} \cdot \frac{\partial X_{O_2}}{\partial y} \right] + S_{O_2,\text{cat}} \quad (\text{III.18})$$

$$D_{\text{eff},O_2}(T) = 0,181 \cdot \left(\frac{T}{T_0} \right)^{\frac{3}{2}} \quad (\text{III.19})$$

$$S_{O_2,\text{cat}} = -\frac{M_{O_2} j}{2F} \quad (\text{III.20})$$

III.5.2. Equation de conservation de mouvement

L'équation de conservation de mouvement est écrite dans le cas stationnaire et bidimensionnel :

Suivant l'axe x:

$$\rho_n u_n \cdot \frac{\partial u_n}{\partial x} + \rho_n v_n \cdot \frac{\partial u_n}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial x} \left(u_n \cdot \frac{\partial u_n}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(u_n \cdot \frac{\partial u_n}{\partial y} \right) + S_{un} \quad (\text{III.21})$$

$$S_{un} = -\varepsilon \cdot \frac{\mu_n}{K_m} \cdot u_n \quad (\text{III.22})$$

Suivant l'axe y :

$$\rho_n u_n \cdot \frac{\partial v_n}{\partial x} + \rho_n v_n \cdot \frac{\partial v_n}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial x} \left(u_n \cdot \frac{\partial v_n}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(u_n \cdot \frac{\partial v_n}{\partial y} \right) + S_{vn} \quad (\text{III.23})$$

$$S_{vn} = -\varepsilon \cdot \frac{\mu_n}{K_m} \cdot v_n \quad (\text{III.24})$$

n : désigne le H2, O2, H2O

m : désigne anode ou cathode

III.5.3 Equation de continuité

L'équation de conservation de masse dans les électrodes s'écrit :

$$\frac{\partial(\rho_k u_k)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho_k v_k)}{\partial y} = 0 \quad (\text{III.25})$$

III.5.4 Equation d'énergie :

Le transfert de chaleur du aux diffusions dans la partie solide de la pile est plus dominant que le transfert du aux conductions donc l'équation s'écrit comme suit [21]:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda_{\text{eff}} \cdot \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\lambda_{\text{eff}} \cdot \frac{\partial T}{\partial y} \right) + S_T = 0 \quad (\text{III.26})$$

Le terme source

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

$$S_T = S_{\text{Ohm}} + S_{\text{act}} + S_{\text{chi}} + S_R \quad (\text{III.27})$$

La source d'énergie due aux pertes ohmiques est la somme des pertes ohmique, anode, cathode et électrolyte .

$$S_{\text{Ohm}} = S_{\text{Ohm,an}} + S_{\text{Ohm,éle}} + S_{\text{Ohm,cat}} \quad (\text{III.28})$$

Ou :

$$S_{\text{Ohm,éle}} = \frac{i^2}{\sigma_{\text{éle}}}, S_{\text{Ohm,an}} = \frac{i^2}{\sigma_{\text{an}}}, S_{\text{Ohm,cat}} = \frac{i^2}{\sigma_{\text{cat}}} \quad (\text{III.29})$$

$$\sigma_{an} = \frac{95.10^6}{T} \exp\left[\frac{-1150}{T}\right] \quad (\text{III.30})$$

$$\sigma_{an} = \frac{42.10^6}{T} \exp\left[\frac{-1200}{T}\right] \quad (\text{III.31})$$

$$\sigma_{ele} = 3.34.10^4 \exp\left[\frac{-10300}{T}\right] \quad (\text{III.32})$$

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

$$S_{actcat} = \eta_{actcat} \cdot j \quad (\text{III.33})$$

La perte d'activation cathodique prend la forme suivante :

$$\eta_{actcat} = \frac{RT}{anF} \cdot \ln\left(\frac{i}{i_{o,cat}}\right) \quad (\text{III.34})$$

Avec $i_{o,cat}$ la densité du courant d'échange, qui a la forme :

$$i_{o,cat} = \frac{RT}{4F} K_{cat} \cdot \exp\left(\frac{-E_{cat}}{RT}\right) \quad (\text{III.35})$$

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

$$S_{actan} = \eta_{actan} \cdot j \quad (\text{III.36})$$

La perte d'activation anodique prend la forme suivante :

$$\eta_{act,an} = \frac{RT}{anF} \cdot \ln\left(\frac{i}{i_{o,an}}\right) \quad (\text{III.37})$$

Avec $i_{o,an}$: la densité du courant d'échange, s'exprime sous la forme :

$$i_{o,an} = \frac{RT}{2F} k_{an} \cdot \exp\left(\frac{-E_{an}}{RT}\right) \quad i_{o,an} = \frac{RT}{2F} K_{an} \cdot \exp\left(\frac{-E_{an}}{RT}\right) \quad (\text{III.38})$$

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

$$S_{chi} = T\Delta S \cdot \frac{j}{2F} = T \left(\Delta S^0 + \int_{r_0}^r \frac{\Delta C_{pr}(T)}{T} dT \right) \cdot \frac{j}{2F} \quad (\text{III.39})$$

$$\Delta C_{pr}(T) = C_{pH_2O}(T) - \frac{1}{2} C_{pO_2}(T) C_{pH_2}(T) \quad (\text{III.40})$$

$$C_{pH_2}(T) = 56.505 - 702,74 \cdot \left(\frac{T}{100}\right)^{-0.75} + 1165 \cdot \left(\frac{T}{100}\right)^{-1} - 560,7 \cdot \left(\frac{T}{100}\right)^{-1.5} \quad (\text{III.41})$$

$$C_{pO_2}(T) = 37,432 + 0,0201 \cdot \left(\frac{T}{100}\right)^{-1.5} - 178,57 \cdot \left(\frac{T}{100}\right)^{-1.5} + 236,88 \left(\frac{T}{100}\right)^{-2} \quad (\text{III.42})$$

$$C_{pHO_2}(T) = 143,05 - 183,54 \cdot \left(\frac{T}{100}\right)^{-0.25} + 82,751 \cdot \left(\frac{T}{100}\right)^{-0.5} - 3,6959 \cdot \left(\frac{T}{100}\right) \quad (\text{III.43})$$

III.6.Méthode numérique

III.6.1.Méthode des différences finies

Dans le domaine de l'analyse numérique, on peut être amené à rechercher la solution d'une équation aux dérivées partielles. Parmi les méthodes de résolution couramment pratiquées, la méthode des différences finies est la plus facile d'accès, puisqu'elle repose sur deux notions : la discrétisation des opérateurs de dérivation/différentiation (assez intuitive) d'une part, et la convergence du schéma numérique ainsi obtenu d'autre part. [22]

La discrétisation de l'équation de conservation de l'énergie par la méthode de différences finies

Dans la partie solide (l'électrolyte) pour 1D est développée ci-dessous :

III.6.1.1.Développement de TAYLOR :

Soit $T(x)$ une fonction continue dans le domaine $[0, a]$ et admet une dérivé d'ordre N .

Alors dans ce domaine on peut écrire $T(x)$ comme

$$T(x) = T(x_0) + (x - x_0) \cdot T^1(x_0) + \frac{(x-x_0)^2}{2!} \cdot T^2(x_0) + \dots + \frac{(x-x_0)^n}{N!} \cdot T^N(x) \quad (\text{III.44})$$

III.6.1.2.Approximation de dérivée:

Soit $T(x)$ une fonction continue dans le domaine $[0, a]$ et admet une dérivé d'ordre 3 .

Soit h un nombre très petit alors

$$T(x + h) = T(x) + h \cdot T^1(x) + \frac{h^2}{2!} T^2(x) + \frac{h^3}{3!} \cdot T^3(x) \quad (\text{III.45})$$

$$T(x - h) = T(x) - h \cdot T^1(x) + \frac{h^2}{2!} T^2(x) - \frac{h^3}{3!} \cdot T^3(x) \quad (\text{III.46})$$

$$T^1(x) = \frac{T(x+h)-T(x)}{h} - \frac{h}{2!}T^2(x) - \frac{h^2}{2!}T^3(C) \quad (\text{III.47})$$

Alors avec une approximation d'ordre h on prend la relation suivante :

$$T^1(x) \approx \frac{T(x+h)-T(x)}{h} \quad (\text{III.48})$$

De la même façon pour la drivé d'ordre 2 on obtient la relation :

$$T^2(x) \approx \frac{T(x+h)-2.T(x)+T(x-h)}{h^2} \quad (\text{III.49})$$

III.6.1.3.Résolution de l'équation différentielle

Dans le paragraphe précédent on 'a établi l'équation différentielle suivante :

$$K \frac{d^2T}{d^2x}(x) + \frac{J^2}{\sigma} + \frac{d}{dx} [C_1(T(x)).exp(-\tau.x) + C_2(T(x)).exp(\tau.x)] = 0 \quad (\text{III.50})$$

X un nombre dans l'intervalle [0,L]

T : fonction continue dans l'intervalle [0,L]

J : densité de courant

σ : conductivité électrique

$$\sigma = \sigma_0 exp\left(-\frac{\beta_0}{T_2}\right) \quad (\text{III.51})$$

$$\sigma_0 = 3,34.10^4, \quad \beta_0 = 10300$$

K : conductivité thermique

On discrétise l'intervalle [0, L] selon la figure III.3



Figure III.3

En utilisant l'approximation (III.48) et (III.49) avec les notations suivantes :

$$x_i = \frac{h}{2} + (i - 1).h \quad \text{pour } i = 1, n$$

$$T(x_i) = T_i$$

$$G(T(x_i)) = C_1(T(x_i)).(-\tau. x_i) + C_2(T(x_i)). \exp(\tau. x_i) = G_i(T_i) \quad (\text{III.51})$$

Pour n=1 on obtient la relation :

$$K \frac{(T_2 - 3T_2 + 2T_0)}{h^2} + \frac{G_2(T_2) - G_1(T_1)}{h} + \frac{j^2}{\sigma_0} \exp\left(\frac{\beta_0}{T_1}\right) = 0 \quad (\text{III.52})$$

Pour n=2, n-1 on' obtient la relation de récurrence suivante

Pour m=2 , n-1

$$K \frac{(T_{m+1} - 2T_m + T_{m-1})}{h^2} + \frac{G_{m+1}(T_{m+1}) - G_m(T_m)}{h} + \frac{j^2}{\sigma_0} \exp\left(\frac{\beta_0}{T_m}\right) = 0 \quad (\text{III.53})$$

Dans la même façon pour le point n on obtient la relation

$$K \frac{(2T_{n+1} - 3T_n + T_{n-1})}{h^2} + 2 \frac{G_{n+1}(T_{n+1}) - G_n(T_n)}{h} + \frac{j^2}{\sigma_0} \exp\left(\frac{\beta_0}{T_n}\right) = 0 \quad (\text{III.54})$$

Finalement on obtient un système d'équations non linéaire on choisi la méthode de Jacobi.

III.6.1.4. Conditions aux limites thermiques:

$$x = 0, \quad T = 9$$

$$X = L, \quad T = 1$$

III.6.2. Méthode de volume fini :

III. 6.2.1. Maillage et volume de contrôle :

Concernant l'analyse en deux dimensions on a utilisé la méthode des volumes finis, l'objectif est de calculer les valeurs des variables précédentes, en un certain nombre de points d'un maillage discret. Les équations de ces valeurs, (appelées équations de discrétisation) sont obtenues par intégration de l'équation régissant le phénomène sur un sous domaine autour de chaque point du maillage. Ces sous domaines sont appelés : volumes de contrôle.

La première étape dans cette méthode consiste à diviser le domaine de calcul en un nombre fini et discret de volume de contrôle, on dit qu'on génère un maillage. L'opération consiste à subdiviser le domaine de calcul en un certain nombre de segments (Volume de contrôle). Le centre de chaque volume est placé exactement au milieu du segment correspondant (FIG III.4) [23].

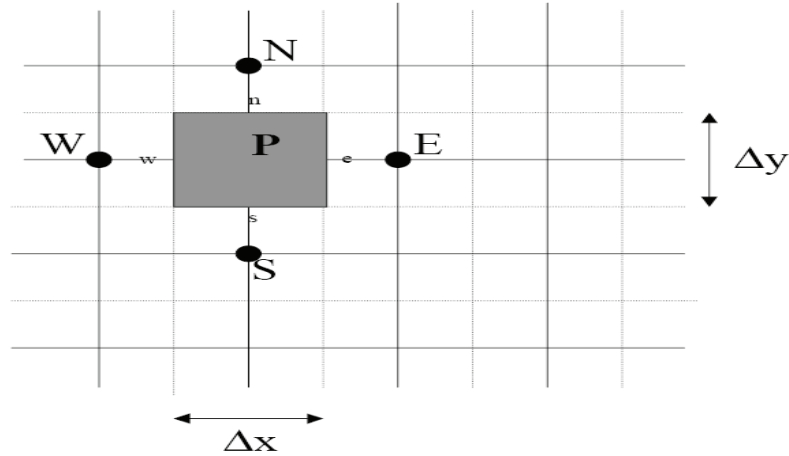


Figure III.4 Discretisation d'un élément de volume de contrôle [24]

III. 6.2.2. Discretisation

On pose la notation

$$\Delta x = x_e - x_w, \Delta y = y_n - y_s$$

$$\int_w^e \int_s^n \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} dx dy + \int_w^e \int_s^n \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} dx dy = \int_s^n \left[\frac{\partial T}{\partial x}(x_e, y) - \frac{\partial T}{\partial x}(x_w, y) \right] dy + \int_w^e \left[\frac{\partial T}{\partial y}(x, y_n) - \frac{\partial T}{\partial y}(x, y_s) \right] dx - \partial T \partial y x, y s dx = \partial T \partial x x e, y p - \partial T \partial x x w, y p \Delta y + \partial T \partial y x p, y n - \partial T \partial y x p, y s \Delta x$$

(III.54)

on utilise l'approximation pour estimer la dérivé partielle aux points w,e,n,s

$$\frac{\partial T}{\partial x}(x_e, y_p) \approx \frac{T_E - T_P}{\Delta x}$$

$$\frac{\partial T}{\partial x}(x_w, y_p) \approx \frac{T_P - T_N}{\Delta x}$$

$$\frac{\partial T}{\partial y}(x_p, y_n) \approx \frac{T_N - T_P}{\Delta y}$$

$$\frac{\partial T}{\partial y}(x_p, y_s) \approx \frac{T_P - T_S}{\Delta y}$$

On obtient :

$$\int_w^e \int_s^n \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} dx dy + \int_w^e \int_s^n \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} dx dy =$$

$$\frac{\Delta y}{\Delta x} \cdot [T_E - 2T_p + T_w] + \frac{\Delta x}{\Delta y} \cdot [T_N - 2T_p + T_S] \quad (\text{III.55})$$

*** Discrétisation du terme source**

$$\int_w^e \int_s^n S(T) dx dy = S(T_p) \cdot \Delta x \cdot \Delta y \quad (\text{III.56})$$

Finalemnt on regroupe l'équation (III.55)et (III.56)alors :

$$\frac{\Delta y}{\Delta x} \cdot [T_E - 2T_p + T_w] + \frac{\Delta x}{\Delta y} \cdot [T_N - 2T_p + T_S] + S(T_p)\Delta x\Delta y = 0 \quad (\text{III.57})$$

III. 6.2.3. Notation indicielle:

En notation indicielle de notre équation s'écrit :

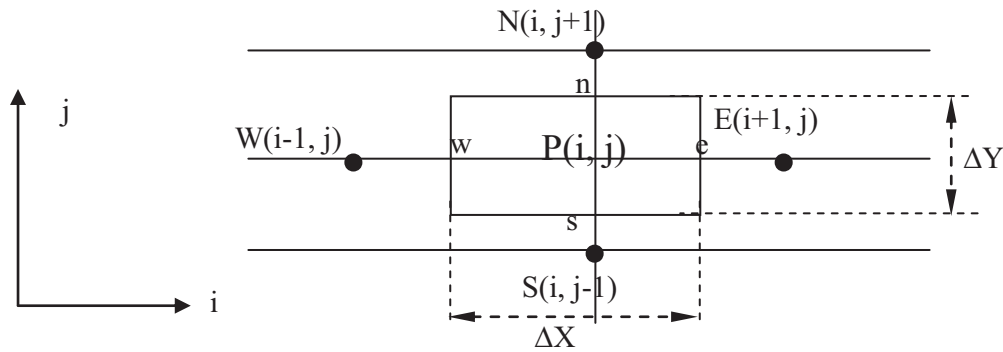


Figure III.5 Elément de volume de contrôle [24]

$$T_p = T(P(i, j)) = T(i, j)$$

$$T_w = T(w(i - 1, j)) = T(i - 1, j)$$

$$T_E = T(E(i + 1, j)) = T(i + 1, j)$$

$$T_S = T(S(i, j - 1)) = T(i, j - 1)$$

$$T_N = T(N(i, j + 1)) = T(i, j + 1)$$

Le vecteur A généré :

$$T(i, j) = A(i + (j - 1)nx)$$

Ou

nx : nombre de point suivant l'axe x

ny : nombre de point suivant l'axe y

Alors l'équation (III.57) devient :

$$\frac{\Delta y}{\Delta x} [A(k + 1) - 2.A(k) + A(k - 1)] + \frac{\Delta x}{\Delta y} [A(k + nx) - 2.A(k) + A(k - nx)] + S(A(k)).\Delta x \Delta y \tag{III.58}$$

Ou $k = i + (j - 1).nx$ et $k = 1, nx.ny$

On a remarqué que pour tous les points d'indices $p(i = 1, j), p(nx, j), p(i, ny), p(i, 1)$

On a remplacé $A(k - 1), A(k + 1), A(k + nx), A(k - nx), A(k - nx)$ de même ordre par valeur de $T_{condition}$ ou $limi$

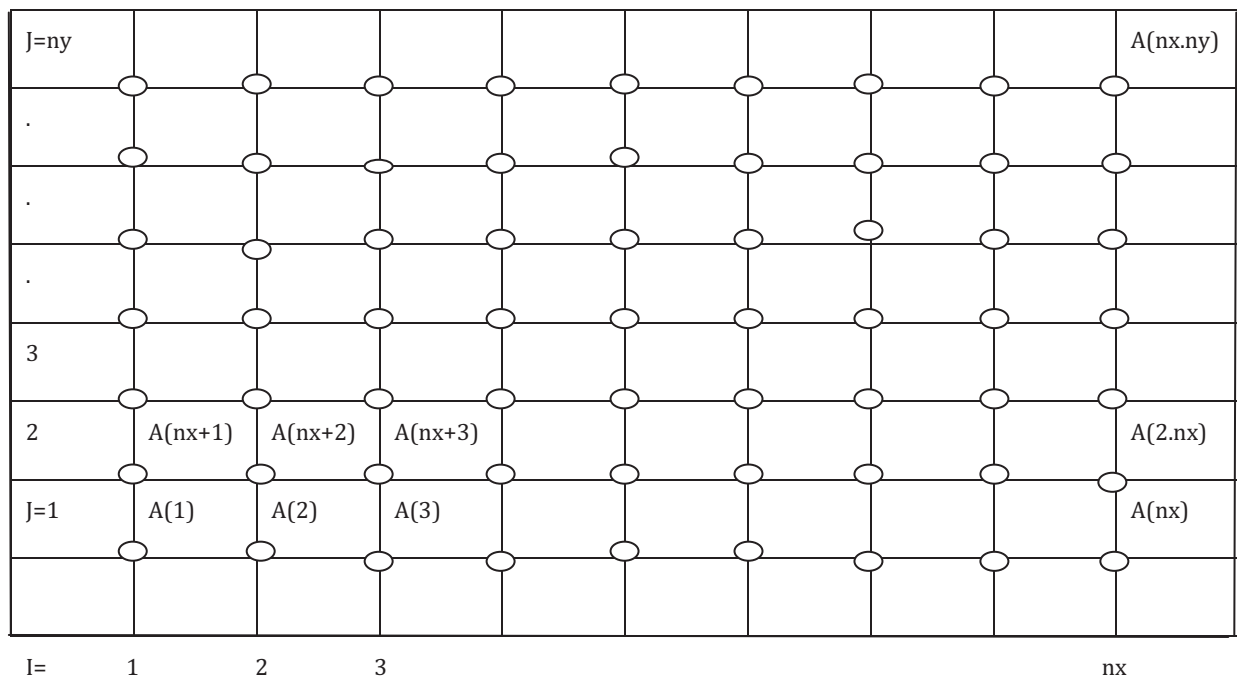


Figure III.5 : représentation du vecteur de température.

III. 6.2.4.RESOLUTION DU SYSTEME D'EQUATIONS NON LINEAIRES :

Dans la partie précédente on a obtenu un système d'équations non linéaires pour résoudre ce système on utilise la méthode du point fixe.

III.6.2.5. MÉTHODE DU POINT FIXE

***Principe.** Le principe de cette méthode consiste à transformer l'équation $f(x) = 0$ en une équation équivalente $g(x) = x$ où g est une fonction auxiliaire "bien" choisie. Le point α est alors un point fixe de g . Approcher les zéros de f revient à approcher les points fixes de g . Le

choix de la fonction g est motivé par les exigences du théorème du point fixe. En effet, elle doit être contractante dans un voisinage I de α . Dans ce cas, on construit une suite $(x_n)_{n \in \mathbb{N}}$ définie par :

x_n dans un voisinage I de α

$$\forall n \geq 0 \quad X_{n+1} = g(x_n) \quad [25]$$

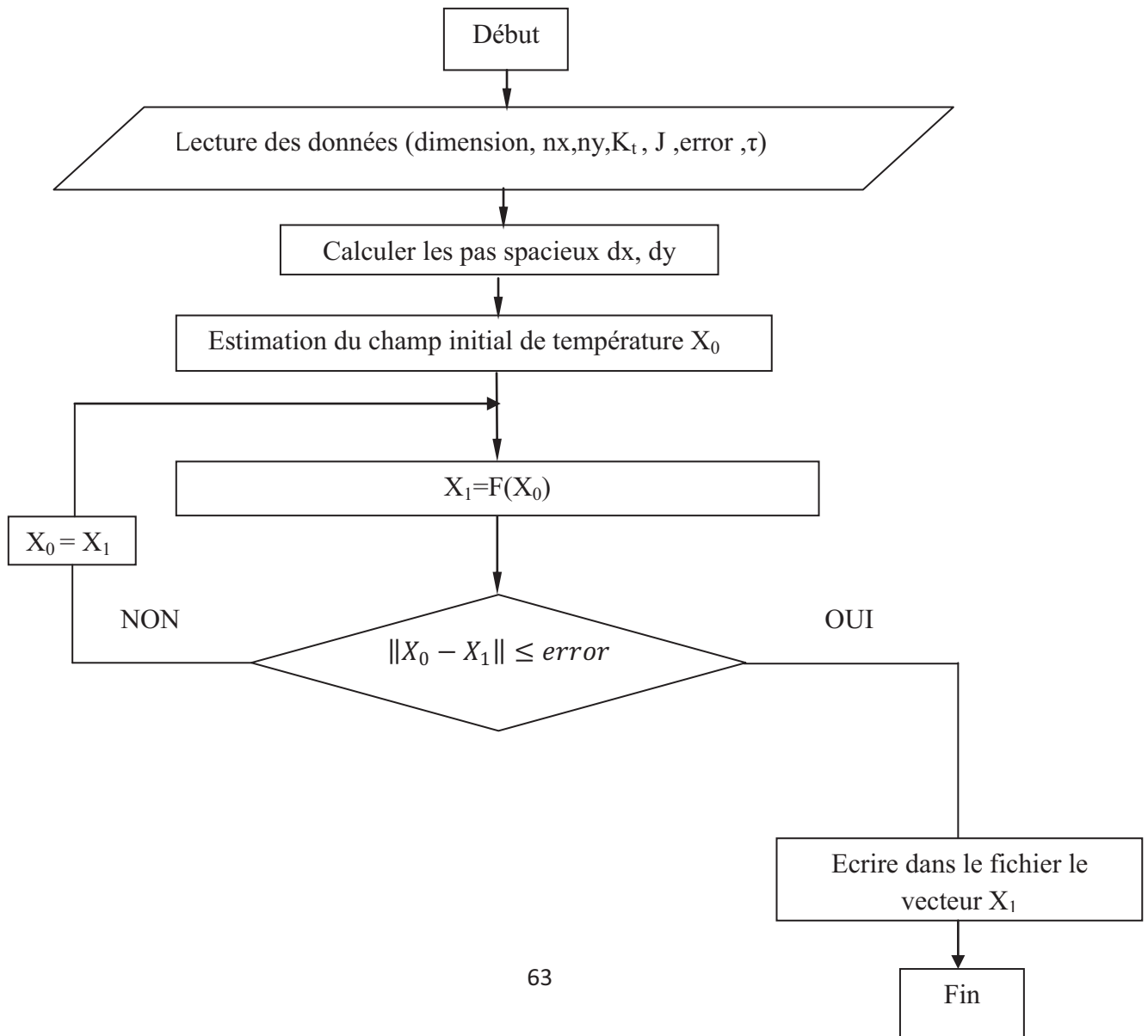
III.6.2.6 Conditions aux limites thermiques:

$$X = 0, \quad T = 800$$

$$X = 1, \quad T = 1200$$

$$Y = 0, \quad Y = e, \quad \frac{\partial T}{\partial y} = 0$$

III.9.8 Organigramme



Introduction

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 différents 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.

IV.1. Modélisation unidimensionnelle

IV.1.1. Influence de source de chaleur radiative sur le profil de température dans la partie solide (l'électrolyte)

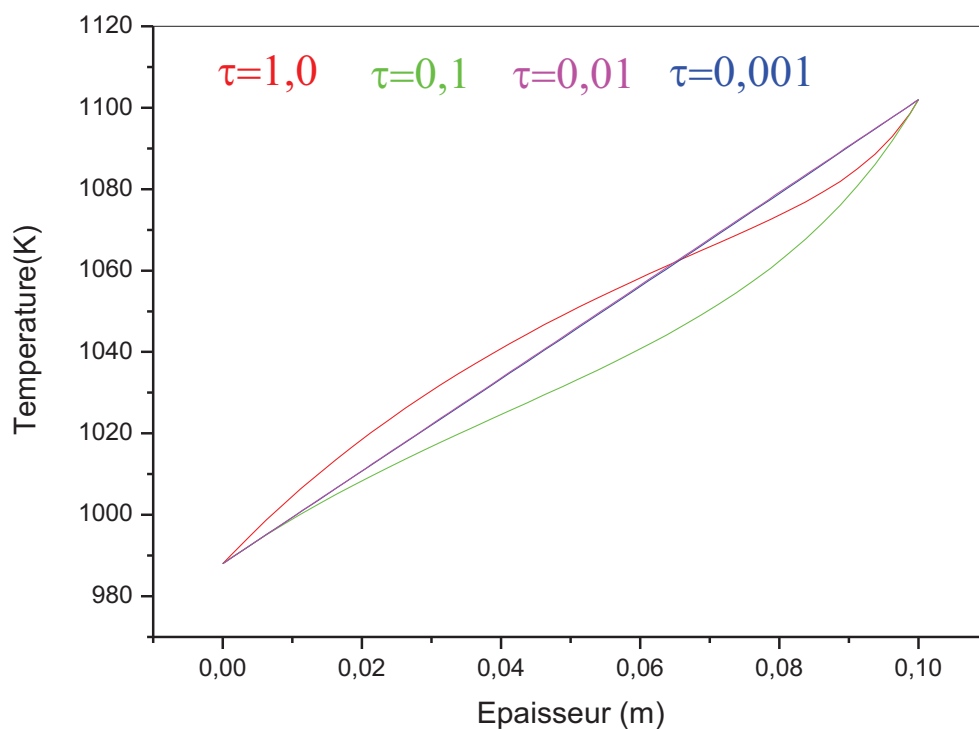


Figure IV.1: Profil de la température (conduction+rayonnement) pour différentes valeurs de τ

Par l'introduction du terme de l'épaisseur optique τ qui est proportionnelle au coefficient d'absorption et l'épaisseur de l'électrolyte (relation) dans l'équation du

transfert de chaleur par rayonnement, si τ augmente on remarque un changement dans le profil de la température (de linéaire à non linéaire). On peut dire que l'influence du rayonnement apparaît lorsque l'épaisseur devient plus grande (on augmente le coefficient de l'absorption ou bien l'épaisseur de l'électrolyte).

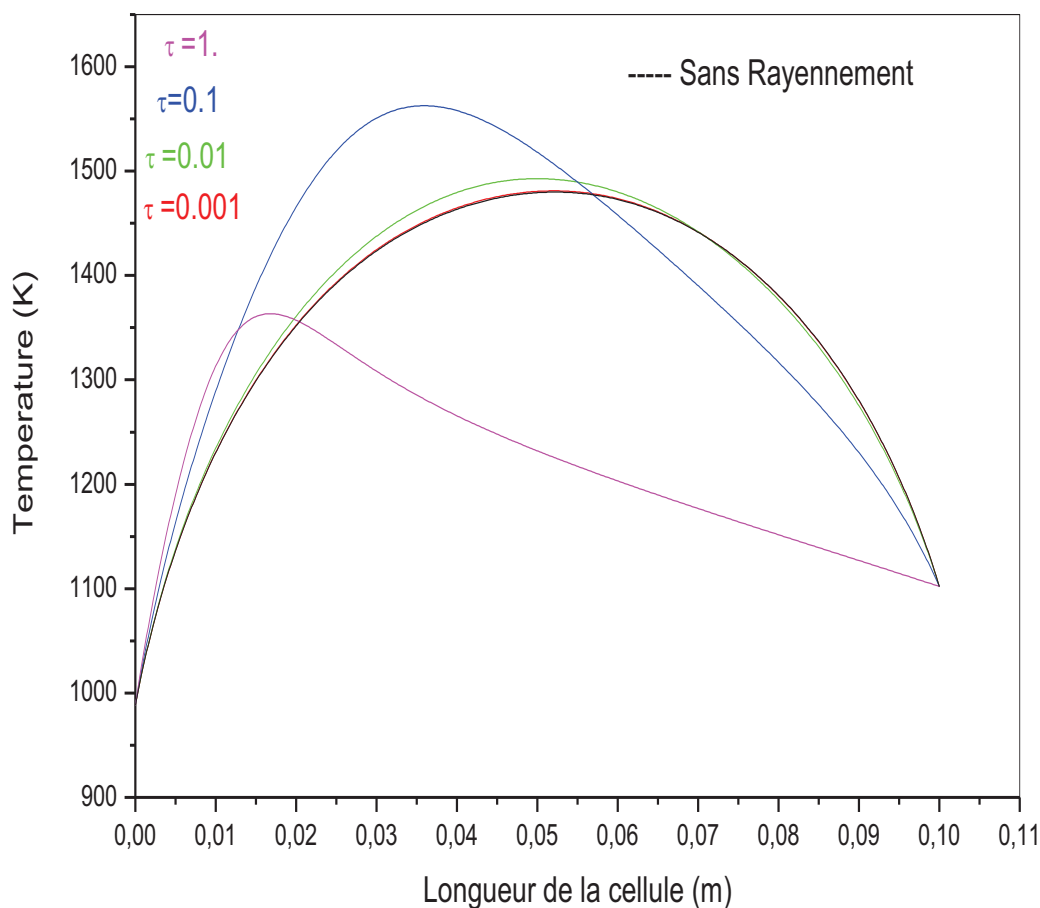


Figure IV.2: Profil de la température (conduction+rayonnement +effet joule) à l'électrolyte.

pour des valeurs très petites de l'épaisseur optique $\tau=0.001$ on ne voit aucune influence de la source radiative, la source ohmique est dominante. De même pour la valeur $\tau=0.01$, l'effet du rayonnement reste négligeable. Lorsque τ prend les valeurs de 0.1 à 1 l'effet de rayonnement devient considérable dans la partie de l'électrolyte.

Tableau IV.2: Les propriétés d'une cellule SOF [12].

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

IV.2. Modélisation bidimensionnelle

IV.2.1. Influence des sources de chaleur sur le Champ de température dans l'anode

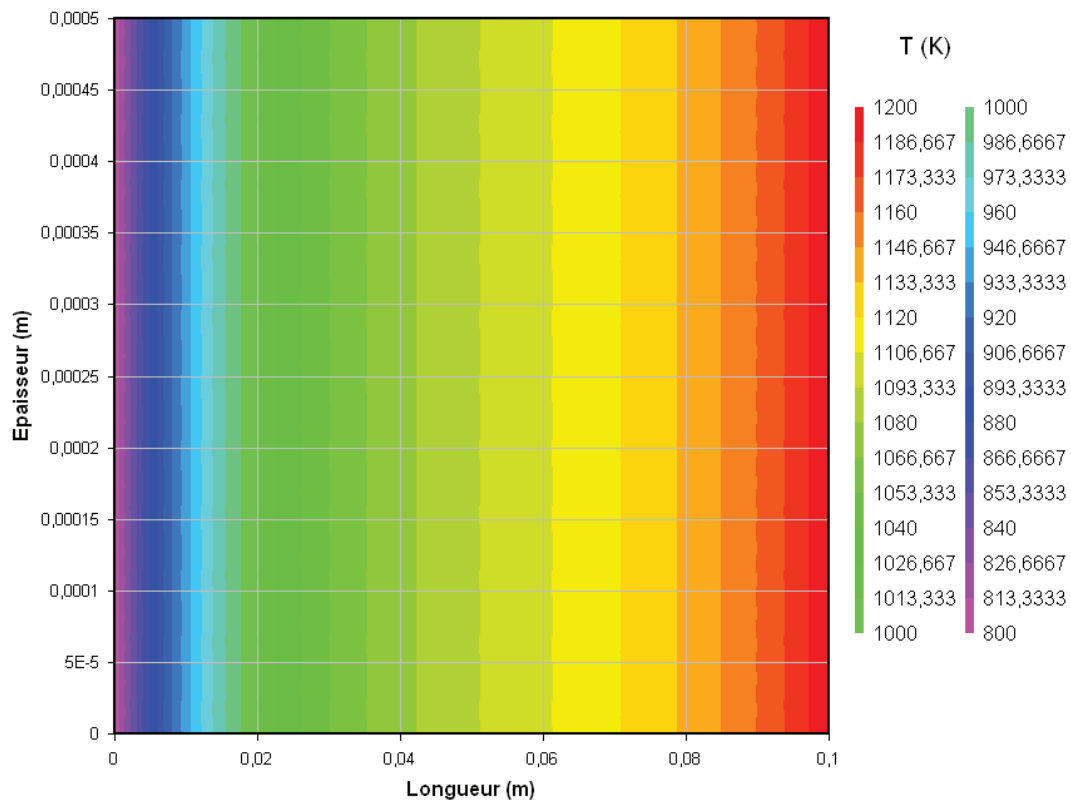


Figure IV.3 Champ de température sous l'effet d'activation à l'anode

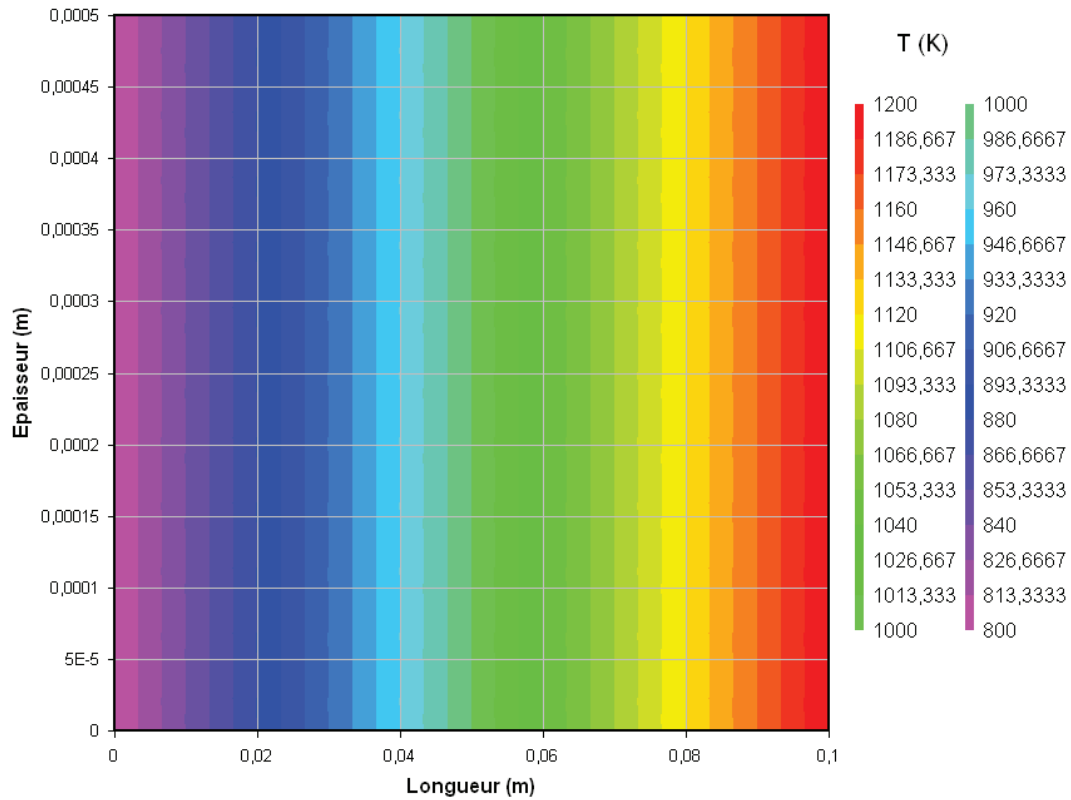


Figure IV.3 Champ de température sous l'effet de la source Chimique à l'anode

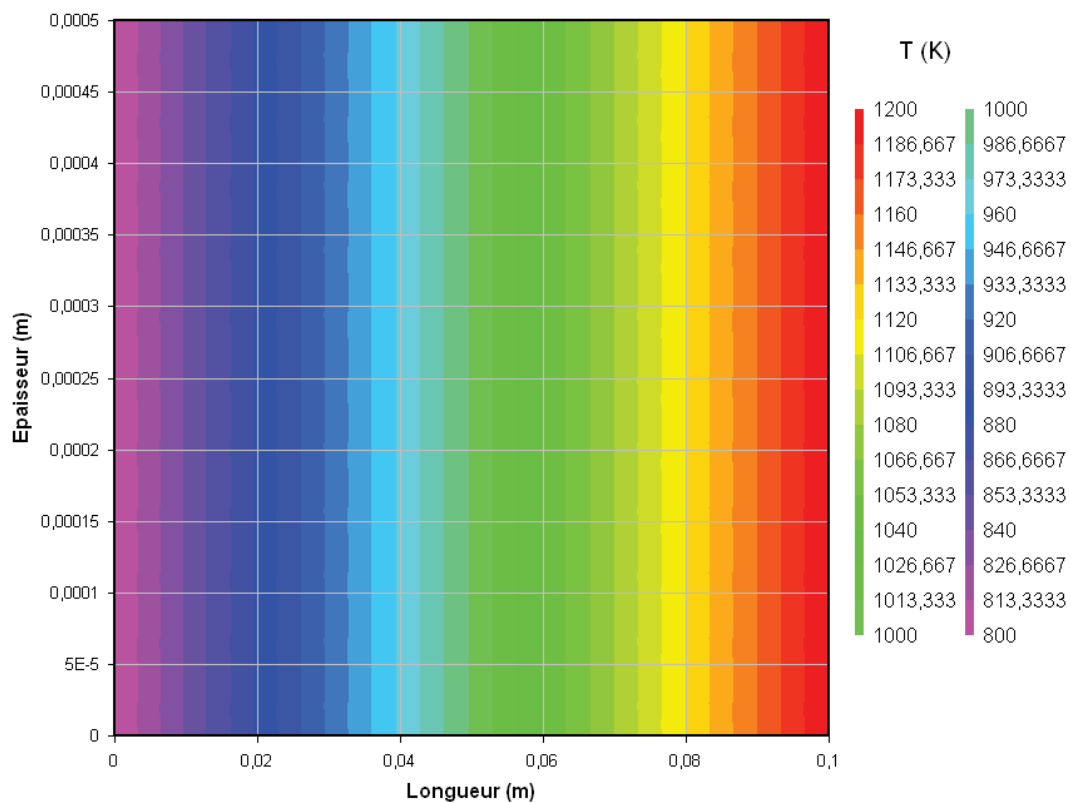


Figure IV.4 Champ de température sous l'effet de la source Ohmique à l'anode

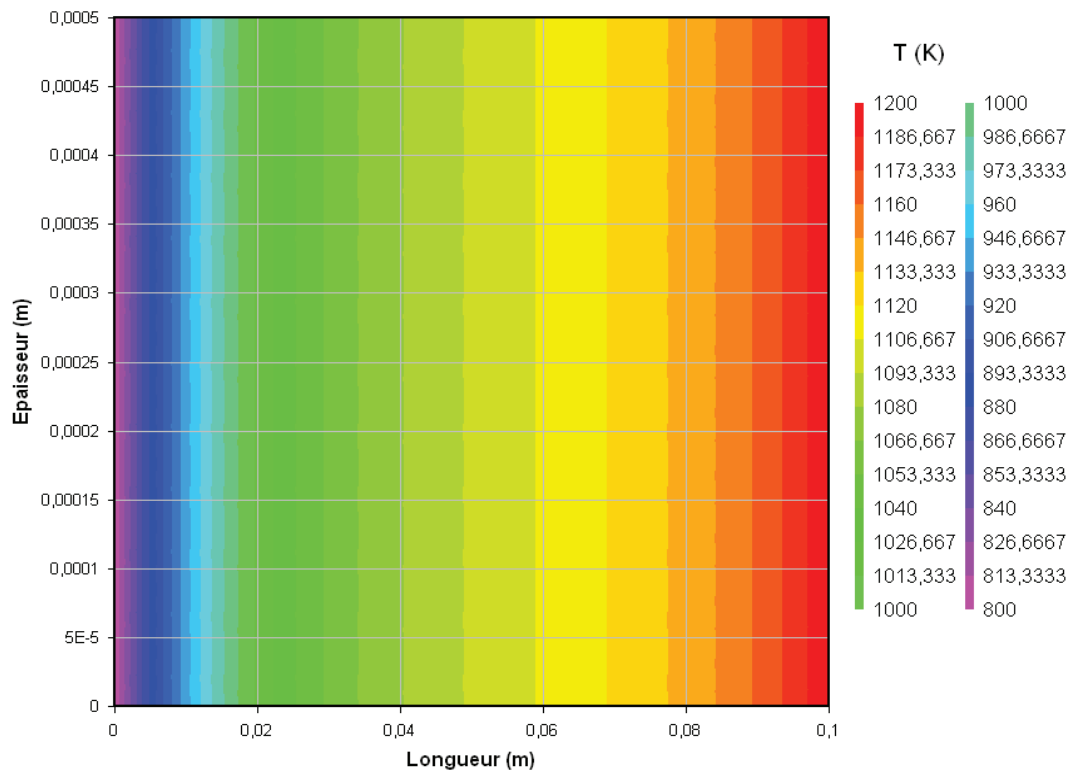


Figure IV.5 Champ de température sous l'effet de trois sources (Ohmique, Chimique et activation) à l'anode

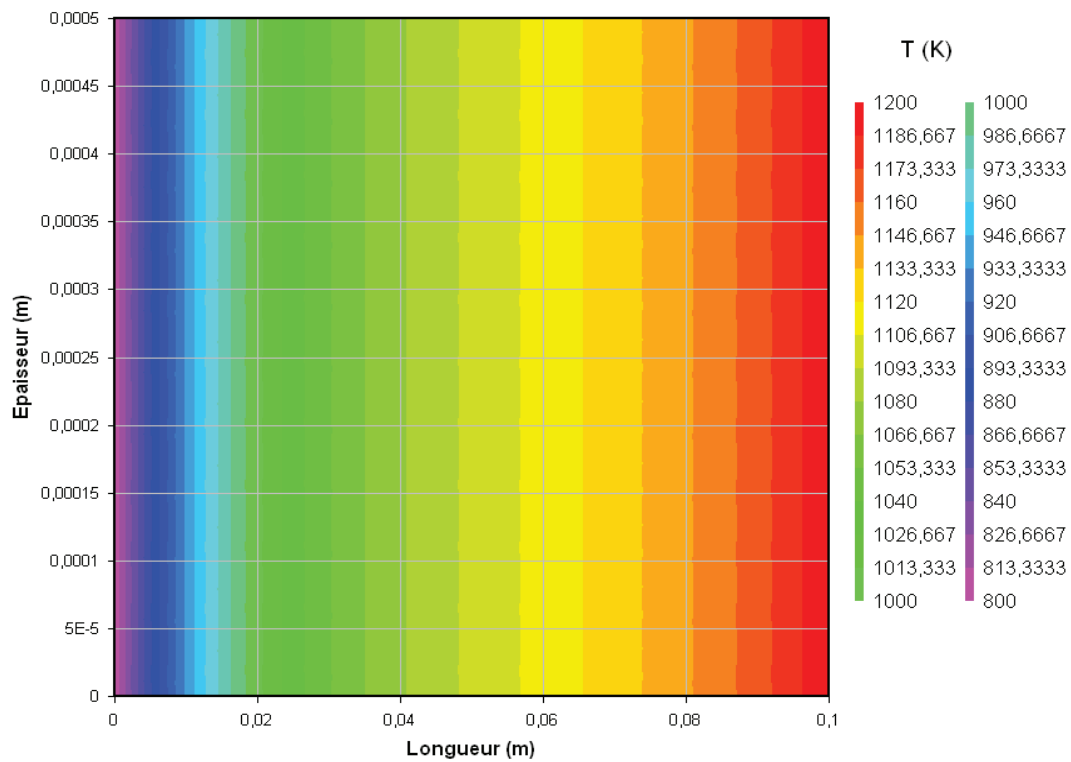


Figure IV.6 Champ de température sous l'effet de trois sources + source radiative avec $\tau=0.1$ à l'anode

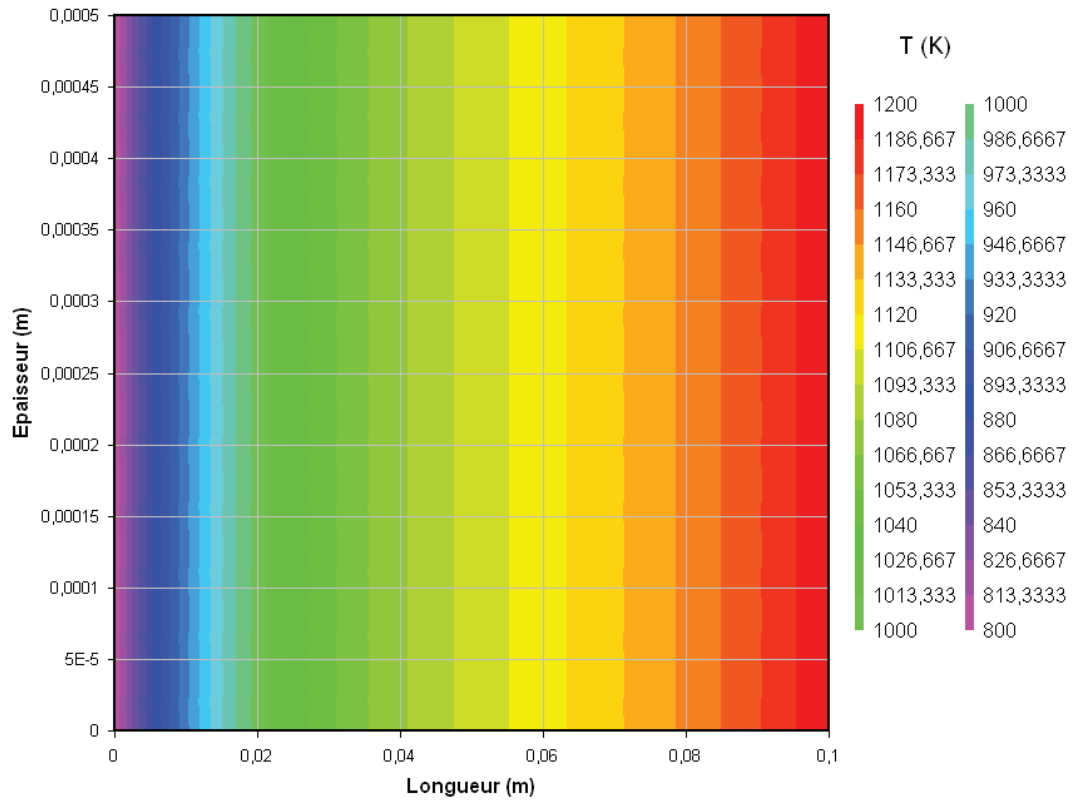


Figure IV.7 : Champ de température sous l'effet de trois sources + source radiative avec $\tau=0.2$ à l'anode

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 du terme source radiative avec les autres termes n'est pas important (la température maximale n'a pas changée), de la figure IV.1 jusqu'à la figure IV.7.

IV.2.2. Influence des sources de chaleur sur le Champ de température dans la partie solide (l'électrolyte)

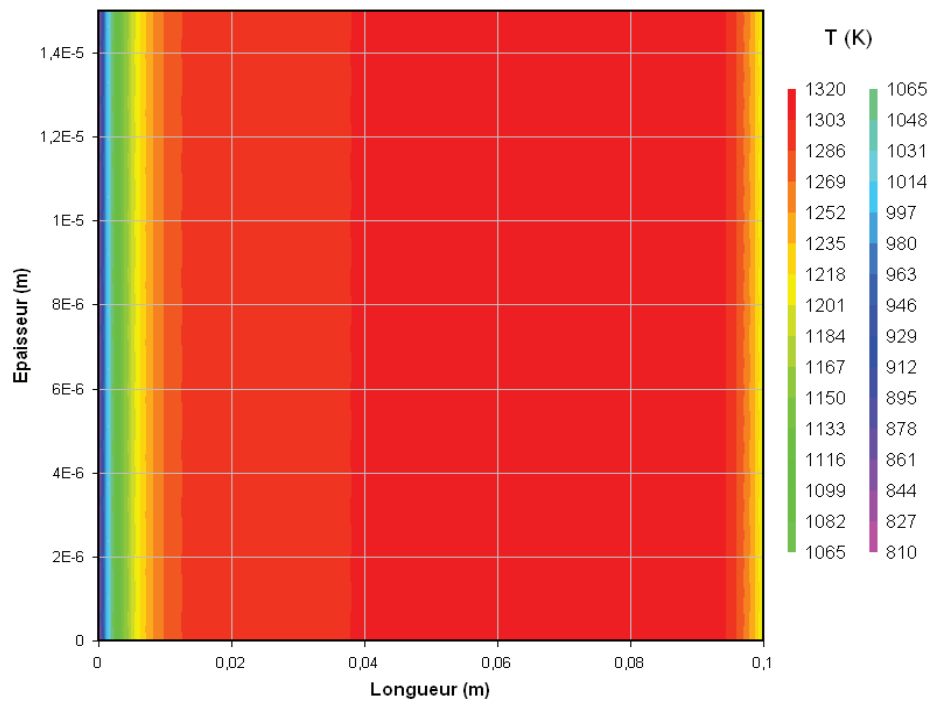


Figure IV.8 Champ de température sous l'effet de la source Ohmique à l'électrolyte

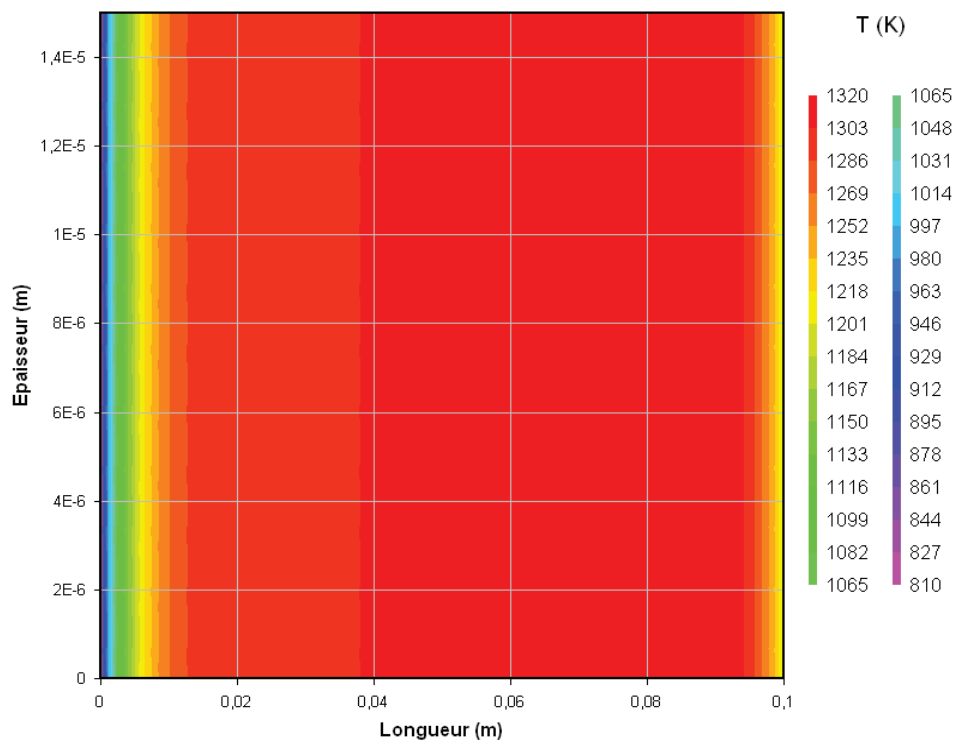


Figure IV.9 Champ de température sous l'effet de la source Ohmique et source radiative avec $\tau=0.1$ à l'électrolyte

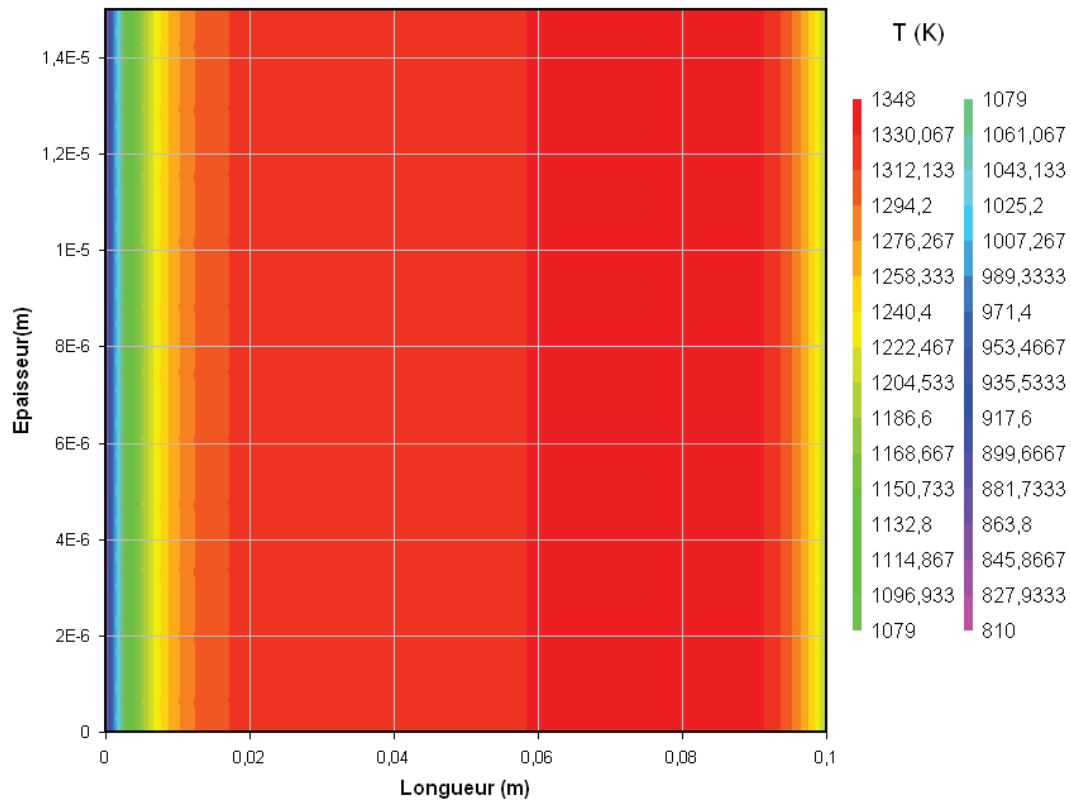


Figure IV.10 Champ de température sous l’effet de la source Ohmique et source radiative avec $\tau=0.2$ à l’électrolyte.

on remarque que l’ajout du terme source radiative concernant la partie solide (électrolyte) est considérable et la différence dans la température maximale $\Delta T=28K$, de la figure IV.8 jusqu’à la figure IV.10 et le tableau IV.2

Tableau IV.2: Température maximale dans l’électrolyte.

	Température maximale (K)
avec source ohmique	1320
avec source ohmique+ source radiative pour $\tau=0.1$	1320
avec source ohmique+ source radiative pour $\tau=0.2$	1348

IV.2.3. Influence des sources de chaleur sur le Champ de température dans la cathode

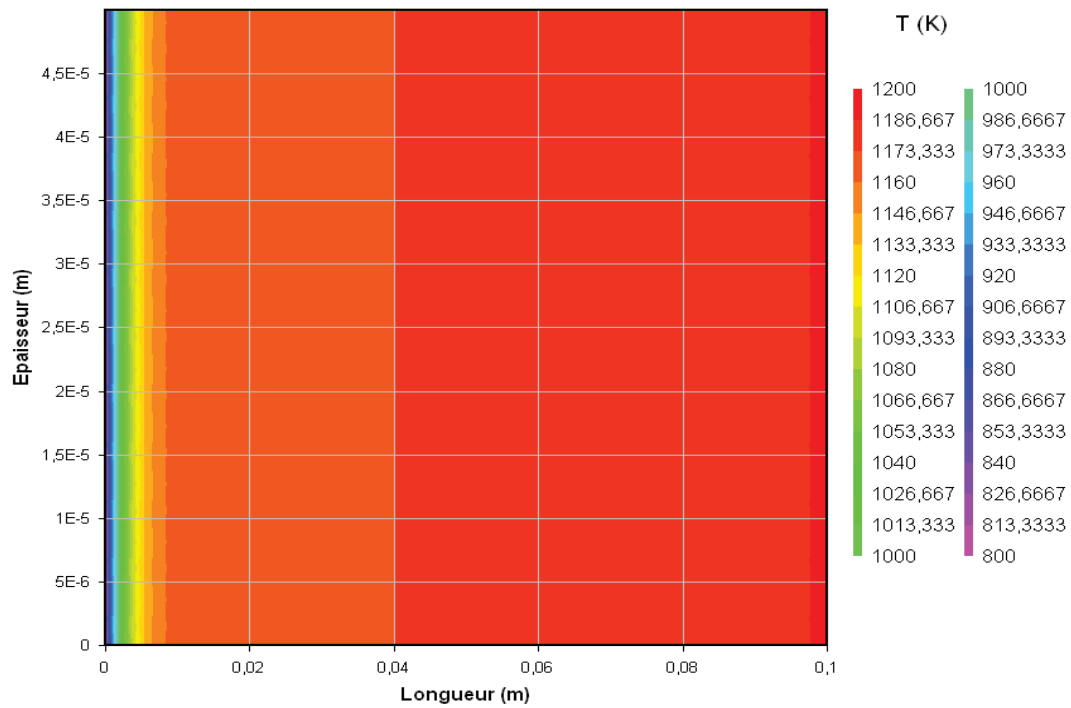


Figure IV.11 : Champ de température sous l'effet d'activation à la cathode

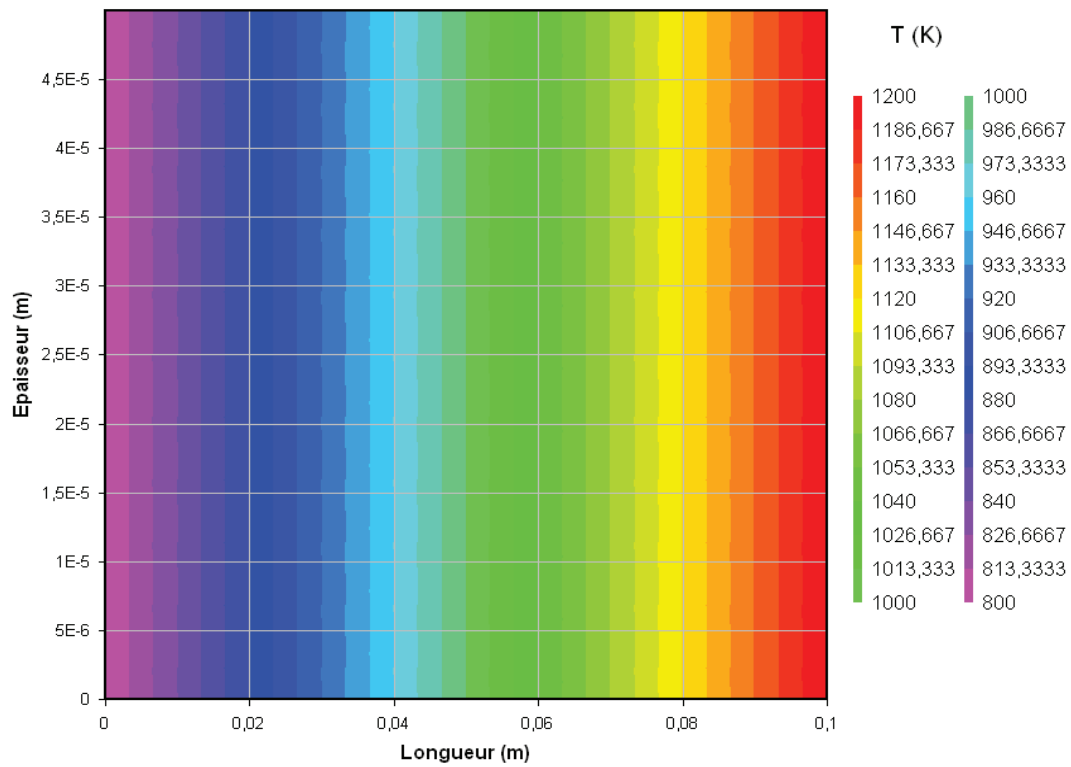


Figure IV.12 : Champ de température sous l'effet de la source Ohmique à la cathode

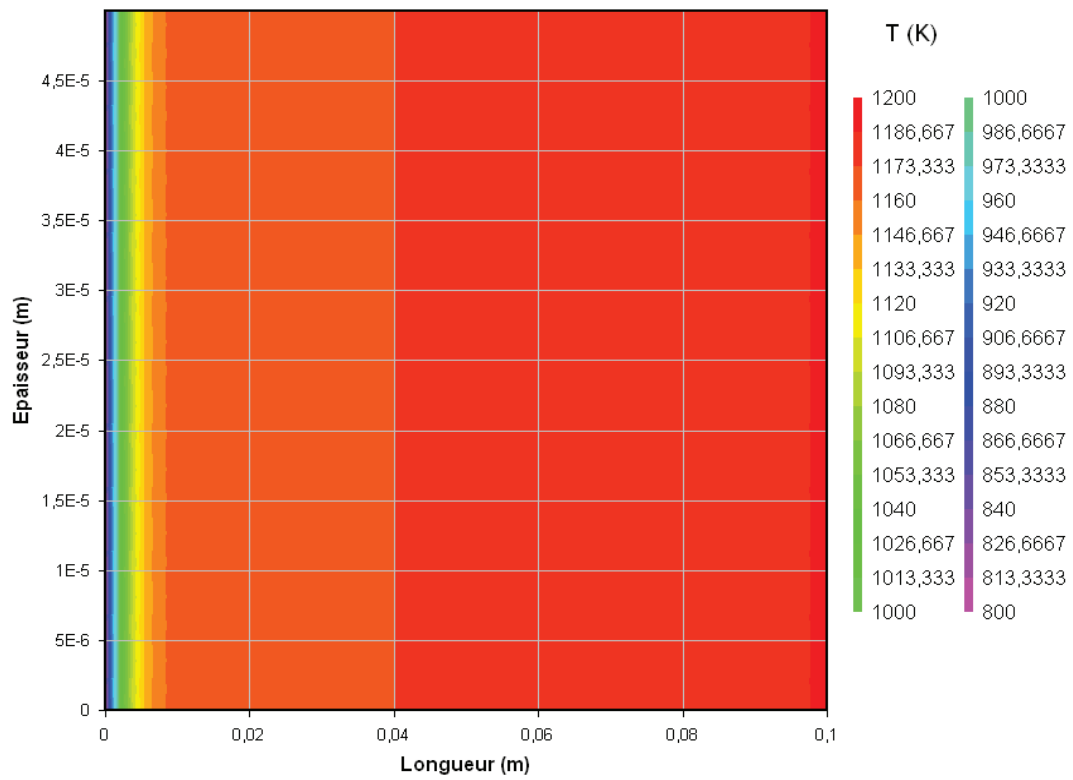


Figure IV.13 : Champ de température sous l’effet de la source Ohmique et activation à la cathode

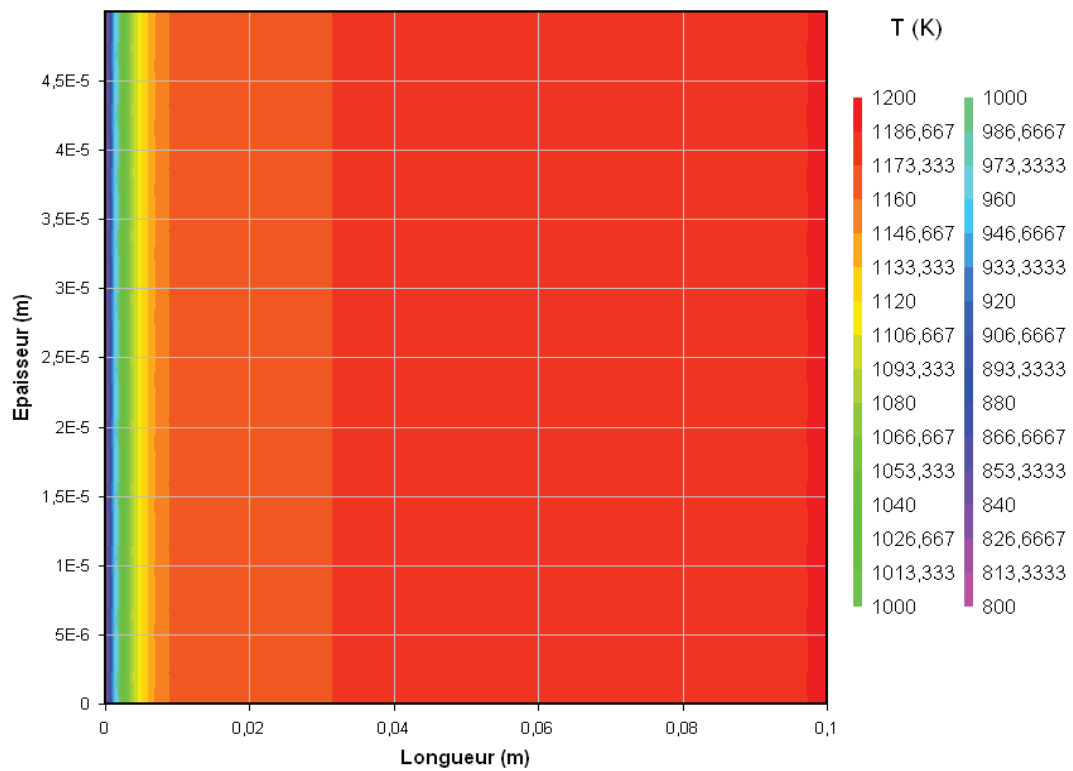


Figure IV.14 Champ de température sous l’effet de deux sources (Ohmique et activation) + source radiative avec $\tau=0.1$ à la cathode

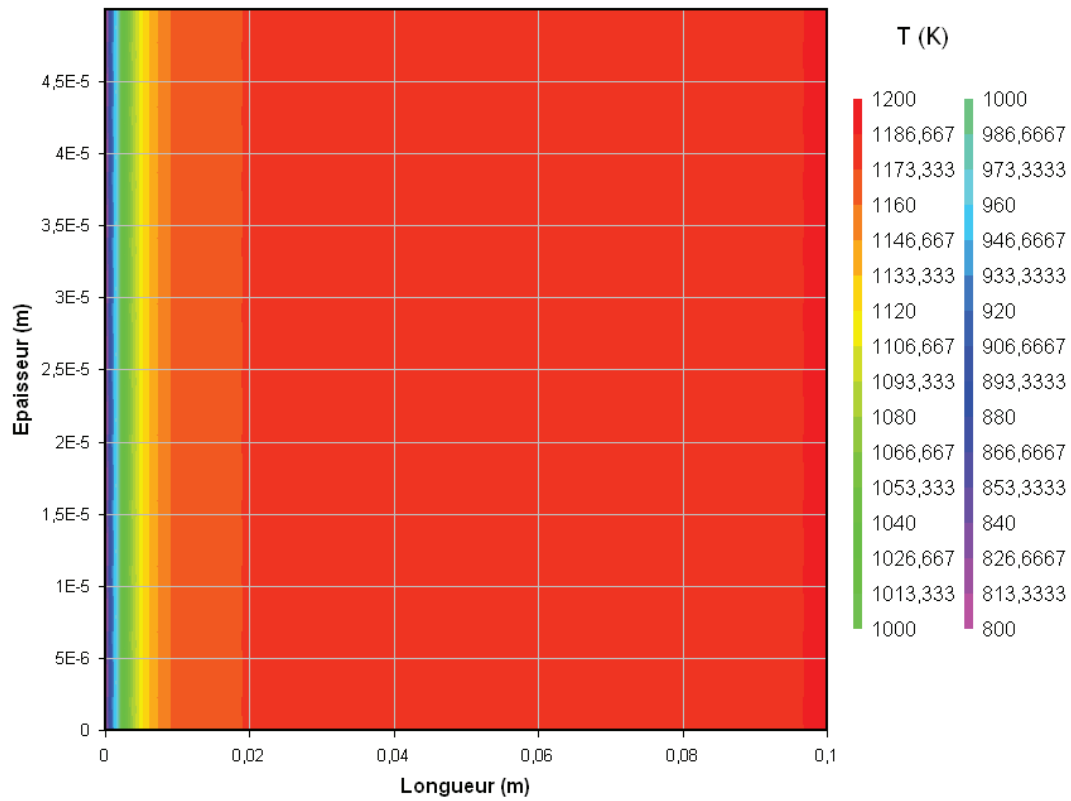


Figure IV.15 Champ de température sous l'effet de deux sources (Ohmique et activation) + source radiative avec $\tau=0.2$ à la cathode

L'influence du terme Ohmique est moins importante par rapport à l'influence du terme d'activation. Tandis que l'effet radiatif n'a pas d'influence remarquable. De la figure IV.11 jusqu'à la figure IV.15.

IV.2.3. Influence des sources de chaleur sur le Champ de température dans toute la cellule

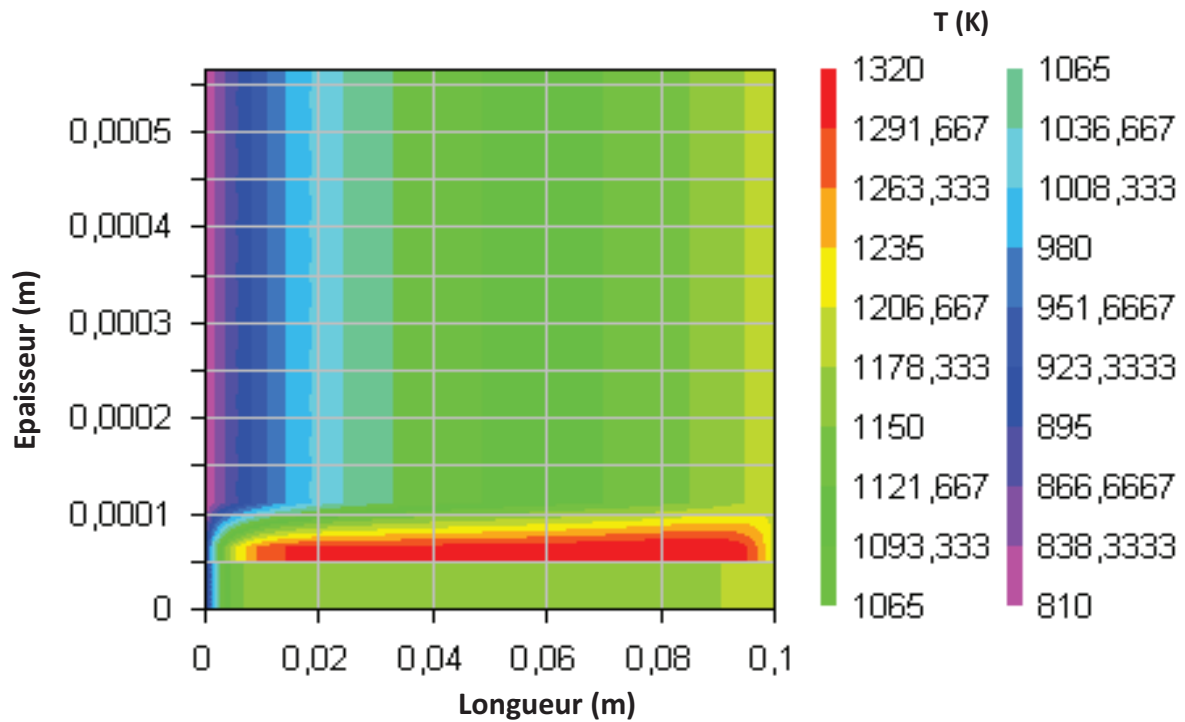


Figure IV.16 : Champ de température sous l'effet de trois sources dans toute la cellule

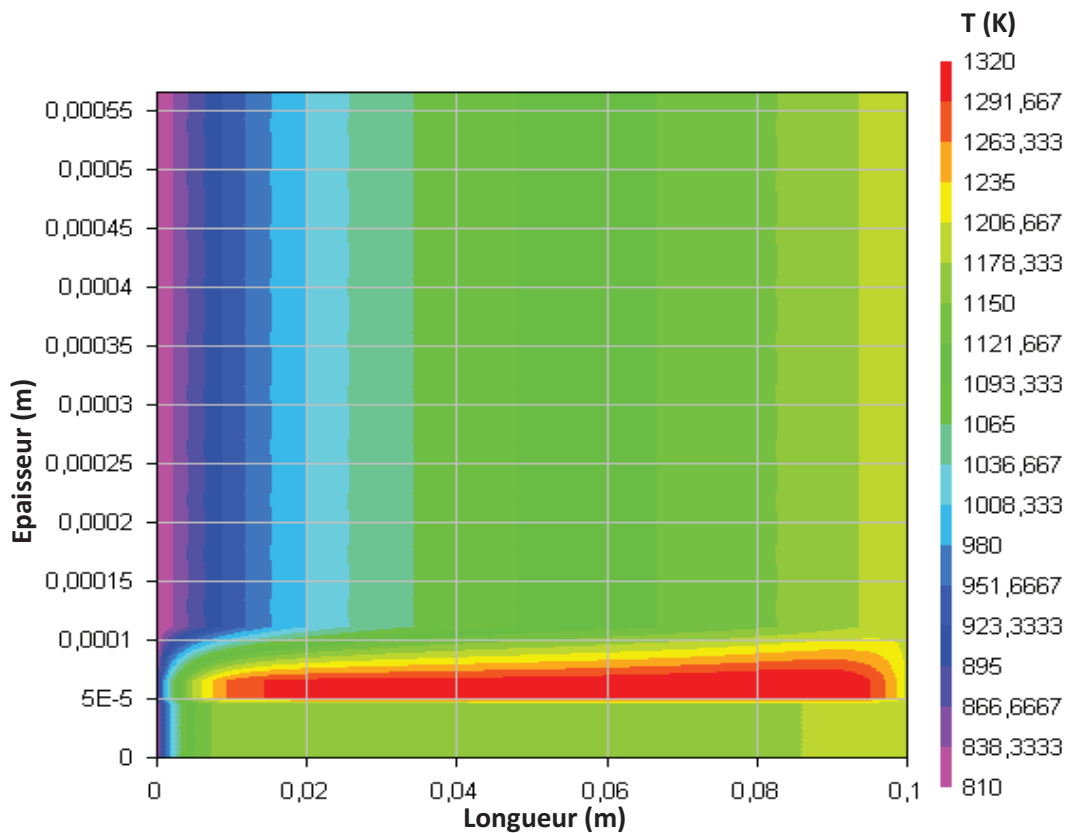


Figure IV.17 : Champ de température sous l'effet de trois sources + source radiative avec $\tau=0.1$ dans toute la cellule

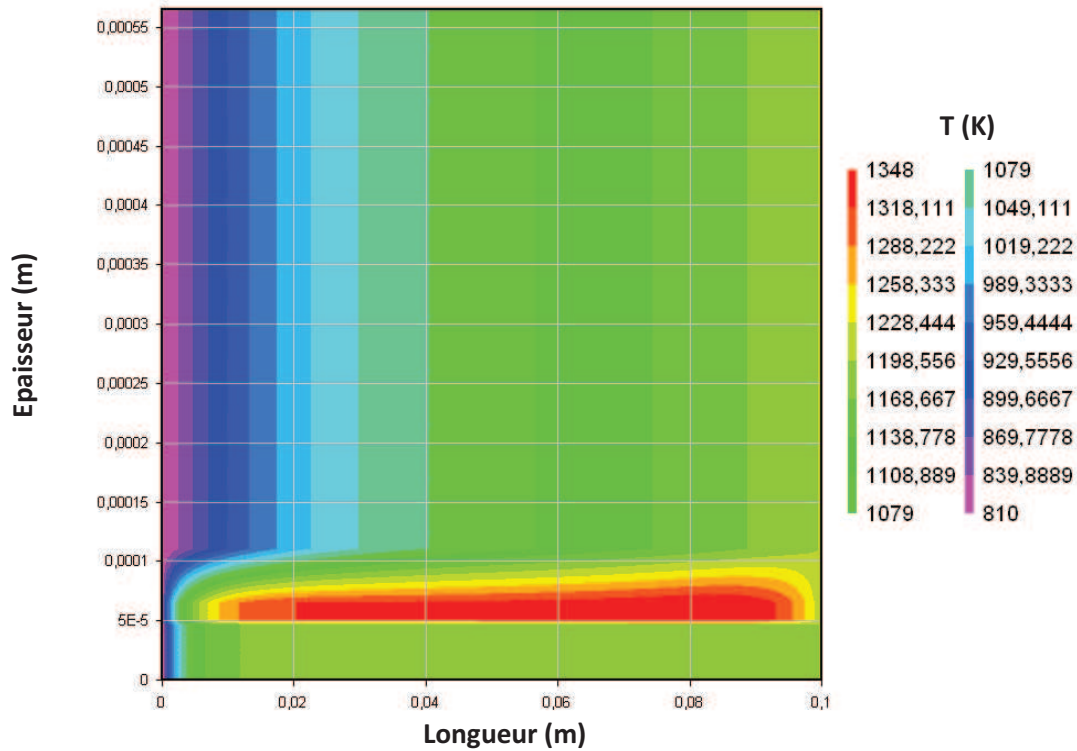


Figure IV.18 : Champ de température sous l’effet de trois sources + source radiative avec $\tau=0.2$ dans toute la cellule

D’une façon générale on peut dire que l’effet de la source de rayonnement sur la pile à combustible est négligeable. Mais si on s’intéresse à chaque partie de la pile, on remarque que les plus hautes températures se trouvent dans l’électrolyte. De la figure IV.11 jusqu’à la figure IV.15

Tableau IV.3: Température maximale dans la cellule.

	Température maximale (K)
avec trois sources	1320
avec trois sources + source radiative pour $\tau=0.1$	1320
avec trois sources + source radiative pour $\tau=0.2$	1348

Conclusion générale et recommandations

D'après l'étude effectuée dans ce mémoire, nous pouvons dire que la pile à combustible est perçue comme l'un des systèmes de production d'énergie les plus propres. Elle est utilisée dans différentes applications stationnaire, transport et portable. Ce système est un dispositif électrochimique qui convertit directement l'énergie chimique d'une réaction en énergie électrique tout en dégageant de la chaleur et de l'eau.

Ce travail consiste en une simulation du transfert thermique incluant le mode 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 sein 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 l'algorithme IMSL a été utilisé pour résoudre le système matriciel.

Cette étude numérique est faite suivant le plan parallèle au sens d'écoulement pour déterminer le champ de température en fonction du type de source de chaleur .

Dans une première partie, la distribution de température dans l'électrolyte est analysée en fonction des différentes sources de chaleur.

Dans une deuxième partie, le champ de température sous l'effet des différentes sources en plus d'une source radiative appliquée à l'anode, à l'électrolyte et à la cathode est étudié.

Dans la dernière partie, le champ de température sous l'effet des différentes sources en plus d'une source radiative dans toute la cellule est analysé.

nous avons conclu aux 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 de l'absorption ou bien l'épaisseur de l'électrolyte.

- ✚ Pour faire apparaître l'effet de source radiative dans la pile à combustible on peut l'étudier en 1D seulement.

Donc, d'après les résultats obtenus, nous proposons:

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

Liste des Figures

Figure I.1 : Expérience de Sir William Grove en 1839	01
Figure I. 2 : pile à combustible du programme Gemini	02
Figure I. 3: Schéma de principe de fonctionnement de la pile SOFC	06
Figure I.4: Composition d'une cellule élémentaire d'une pile à combustible	06
Figure I.5 : géométrie tubulaire de de Simens-westinghouse	10
Figure I.6 : connexion électrique de cellule tubulaire	10
Figure I.7 : configuration planaire (cross flow) d'une SOFC	10
Figure I.8 : cellule unité de chez Sulzer-Hexis	11
Figure I.9 : géométrie monolithique avec flux gazeux dans le même sens	12
Figure I.10 : influence de la pression sur la tension	16
Figure I.11 : influence de la température sur la tension	17
Figure I.13 : Influence de la polarisation sur la tension	18
Figure I.14 : Gradient de concentration à l'électrode	20
Figure I.15 : Effet des différentes polarisations	22
Figure I.16 : Rendements comparés d'une pile à combustible et d'un moteur thermique	23
Figure III.1: Schéma d'une pile SOFC	51
Figure III.2 : Schéma d'une cellule élémentaire d'une pile SOFC à anode supportée	52
Figure III.3 : Discrétisation d'un élément de volume de contrôle	60
Figure III.4 Elément de volume de contrôle	61
Figure III.5 : représentation du vecteur de température	62
Figure IV.1: Profil de la température (conduction+rayonnement) pour différentes valeurs de τ	65
Figure IV.2: Profil de la température (conduction+rayonnement +effet joule) à l'électrolyte	66
Figure IV.3 : Champ de température sous l'effet d'activation à l'anode	67
Figure IV.3 : Champ de température sous l'effet de la source Chimique à l'anode	68
Figure IV.4 :Champ de température sous l'effet de la source Ohmique à l'anode	68

Figure IV.5 :Champ de température sous l'effet de trois sources (Ohmique, Chimique et activation) à l'anode	69
Figure IV.6 :Champ de température sous l'effet de trois sources + source radiative avec $\tau=0.1$ à l'anode	69
Figure IV.7 : Champ de température sous l'effet de trois sources + source radiative avec $\tau=0.2$ à l'anode	70
Figure IV.8 : Champ de température sous l'effet de la source Ohmique à l'électrolyte	71
Figure IV.9 : Champ de température sous l'effet de la source Ohmique et source radiative avec $\tau=0.1$ à l'électrolyte	71
Figure IV.10 : Champ de température sous l'effet de la source Ohmique et source radiative avec $\tau=0.2$ à l'électrolyte	72
Figure IV.11 : Champ de température sous l'effet d'activation à la cathode	73
Figure IV.12 : Champ de température sous l'effet de la source Ohmique à la cathode	73
Figure IV.13 : Champ de température sous l'effet de la source Ohmique et activation à la cathode	74
Figure IV.14 : Champ de température sous l'effet de deux sources (Ohmique et activation) + source radiative avec $\tau=0.1$ à la cathode	74
Figure IV.15 : Champ de température sous l'effet de deux sources (Ohmique et activation) + source radiative avec $\tau=0.2$ à la cathode	75
Figure IV.16 : Champ de température sous l'effet de trois sources dans toute la cellule	76
Figure IV.17 : Champ de température sous l'effet de trois sources + source radiative avec $\tau=0.1$ dans toute la cellule	76
Figure IV.18 : Champ de température sous l'effet de trois sources + source radiative avec $\tau=0.2$ dans toute la cellule	77

Liste des tableaux

Tableau. I.1: Comparaison des Différents Types de piles à combustible	05
Tableau. I.2: Influence de la température sur la tension	17
Tableau. IV.1: Les propriétés d'une cellule SOF	67
Tableau. IV.2: Température maximale dans l'électrolyte	72
Tableau. IV.3: Température maximale dans la cellule	77

SOMMAIRE

Remerciements.....	
Dédicace.....	
Nomenclature.....	
Introduction générale.....	

Chapitre I

Généralités sur les piles à combustible

I.1 Historique.....	01
I. 2. Les différents types de piles à combustible.....	03
I.3.La pile à oxyde solide SOFC.....	05
I.3.1. Le principe de fonctionnement	05
I. 3. 2. Les éléments de la pile (SOFC)	06
I. 3.3. Les différentes configurations des SOFC	09
I. 4. Les applications des piles à combustible.....	12
I. 5.La modélisation thermodynamique et électrochimique des piles à combustible.....	14
I. 5.1.L'énergie libre de Gibbs.....	14
I. 5.2.Les caractéristiques d'une pile à combustible.....	14
I.5.2.1.La tension théorique.....	14
I. 5.2.2.La tension réelle.....	17
I. 5.3.Le rendement d'une pile à combustible.....	22

Chapitre II

Etude bibliographique

Introduction.....	24
II.1 synthèse des travaux utilisant le modèle de rayonnement de Schuster–Schwarzschild	45
II.2 Synthèse des travaux utilisant la même méthode numérique.....	47
II.3.Synthèse des travaux étudiant le rayonnement dans le même région et géométrie.....	48

Chapitre III

Equations et modélisation Numérique du SOFC

Introduction.....	50
III.1 Les différents modèles de source de rayonnement.....	50

III.2	Modèle physique	51
III.3	Modèle Mathématique.....	52
III.4	Hypothèses simplificatrices	52
III.5	Equations régissantes du phénomène.....	52
III.6	Méthodes numériques	58
III.6.1	Méthode des différences finies.....	58
III.6.2	Méthode des volumes finis.....	60
III.7	Organigramme	64

Chapitre IV

Résultats et Interprétations.

Introduction	65
IV.1 Modélisation unidimensionnelle.....	65
IV.1.1 Influence de source de chaleur radiative sur le profile de température dans l'électrolyte.....	65
IV.2 Modélisation bidimensionnelle	67
IV.2.1 Influence des sources de chaleur sur le Champ de température dans l'anode.....	67
IV.2.2 Influence des sources de chaleur sur le Champ de température dans l'électrolyte.....	70
IV.2.3 Influence des sources de chaleur sur le Champ de température dans la cathode.....	73
IV.2.4 Influence des sources de chaleur sur le Champ de température dans toute la cellule.....	76
Conclusion générale.....	
Références bibliographiques	