

Résumé :

La pile à combustible présente une nouvelle filière électrique et thermique, dotée d'un exceptionnel rendement énergétique et par « zéro » rejet nocif dans l'atmosphère notamment avec l'hydrogène. Il existe six types de piles à combustible, parmi eux la pile à membrane échangeuse de protons PEMFC. Dans la pile PEMFC, la gestion de l'eau joue un rôle crucial dans le diagnostic de son bon fonctionnement, c'est l'une des questions primordiales, car un manque d'eau peut entraîner un assèchement de la membrane conduisant à la destruction de la pile ; inversement, un excès d'eau va gêner le transport des espèces présentes dans le cœur de la pile, et se provient la réduction du rendement de la pile. Donc, il est important de bien contrôler les transferts de matière dans le cœur de la pile, en particulier pour l'eau, pour s'assurer que l'humidification et l'évacuation d'eau — affectent à la pile — sont suffisantes pour une bonne hydratation de la membrane, sans risque de saturation ou d'endommagement de la pile.

Cette thèse présente les résultats d'une modélisation du phénomène de transfert de chaleur, de masse et de charge dans une pile à combustible à membrane échangeuse de protons, alimentée en hydrogène. Précisément la compréhension des phénomènes complexes ayant lieu à l'intérieur d'une membrane de Nafion 117, ainsi nous pouvons mieux prévoir leurs comportements dans différentes conditions. La formulation théorique du modèle mathématique du phénomène de transfert étudié est basée sur l'un des modèles macroscopiques, qui est le « modèle de diffusion » du fait que la supposition d'un gradient de concentration conduit les molécules d'eau à travers la membrane, avec l'aide des formulations empiriques conçues par T. E. Springer et Coll. [SZG (1991.)]. Dans la mesure où les modèles de diffusion deviennent impuissants au moment où la teneur en eau dans la membrane est élevée, nous avons introduit dans notre simulation le gradient de pression — qui provoque la conduction des molécules d'eau à travers la membrane — qui est un paramètre directeur du « modèle hydraulique » et leurs corrélations dans les travaux de D. Bernardi et Coll. [BV (1991 et 1992.)]. Dans notre étude, les équations directrices du phénomène présenté dans la membrane sont des équations différentielles de second ordre, sous forme transitoire, de types paraboliques et avec des coefficients variables. En raison de la complexité de ces équations, elles sont discrétisées par les différences finies pour l'espace sous forme numérique simplifiée unidimensionnelle dans la direction (x) et aussi pour l'intégration du temps, ainsi les équations que nous avons résolues sont simulées avec un code numérique de **FORTRAN** innové.

Les simulations effectuées nous permettent de valider nos équations différentielles et algorithmes de résolution et les résultats obtenus donnent les

profils des concentrations d'eau et des températures à travers l'épaisseur de la membrane à différents instants pour des conditions opératoires déterminées (densités de courant, pressions, températures), ainsi que le potentiel de la membrane est calculé. Lors de la validation du code par des problèmes dont la solution est connue, nous avons conclu que la procédure est très stable et donne des résultats intéressants en comparant avec d'autres travaux effectués dans le même domaine, par exemple les travaux du groupe PSI (2002.) et Jay B. Benziger et coll, (2003.).

Mots-clés : Pile à combustible, Hydrogène, Membrane, PEMFC, Phénomène de transfert, Modèle mathématique, Simulation Numérique.