



**HAL**  
open science

## Modèle analytique d'électrolyseurs PEM : approche adimensionnelle

Farid Aubras, Miloud Bessafi, Jonathan Deseure, Amangoua Jean-Jacques Kadjo, Brigitte Grondin-Perez, Michel Benne, Jean-Pierre Chabriat

► **To cite this version:**

Farid Aubras, Miloud Bessafi, Jonathan Deseure, Amangoua Jean-Jacques Kadjo, Brigitte Grondin-Perez, et al.. Modèle analytique d'électrolyseurs PEM : approche adimensionnelle. Réunion Plénière, Groupement de Recherche HySPàC UMR CNRS 7285, May 2017, Limoges, France. 2017. hal-01953495

**HAL Id: hal-01953495**

**<https://hal.univ-reunion.fr/hal-01953495v1>**

Submitted on 13 Dec 2018

**HAL** is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

**Résumé:** L'étude présente les résultats de calculs d'un modèle analytique adimensionnel en régime stationnaire et isotherme portant sur l'ensemble de l'AME d'un électrolyseur basse pression, basse température de type PEM. A l'échelle locale, en 1D, les équations prises en compte sont la conservation du courant dans l'AME, les réactions électrochimiques au sein des couches actives et le transfert de matière à travers la membrane. La résolution a permis d'obtenir des expressions analytiques des surtensions d'électrodes, de la chute ohmique et de la teneur en eau à la membrane. De plus, l'étude propose une expression mathématique simple de la surtension totale du système en fonction de nombres adimensionnels opérationnels ( $\beta_a, \beta_c, \beta_m$ ) et intrinsèques au système ( $w_a, \Pi$ ), similaires à des nombres adimensionnels de Thiele [1] et de Wagner [2]. L'approche adimensionnelle permet de quantifier analytiquement les sources d'irréversibilité (chute ohmique, surtensions d'activations anodique et cathodique, cf fig 1 et 2), respectivement pour les faibles et moyennes densités de courant. Cette étude propose une approche originale et simple (dans son emploi) pour l'analyse et la prévision des performances d'un électrolyseur PEM basse pression, basse température. En outre, ce modèle analytique peut être implémenté dans une boucle de contrôle commande.

[1] Bird, R. B., Stewart, W. E., & Lightfoot, E. N. (2007). *Transport phenomena*. John Wiley & Sons.

[2] Gyenge, E. L. (2005). Dimensionless numbers and correlating equations for the analysis of the membrane-gas diffusion electrode

1

## Modèle 1D de cellule PEMWE

### Mise en équation

Bilan des charges

$$\frac{d\eta_{a,c}}{dx} = \pm \frac{i_{a,c}}{\sigma_{a,c}^{H^+}}$$

Loi de Tafel

$$\frac{di_{a,c}}{dx_{a,c}} = \pm i_{0,a,c} \exp\left\{\frac{\pm \alpha_{a,c} F \eta_{a,c}}{RT_{a,c}}\right\}$$

Bilan de flux à la membrane

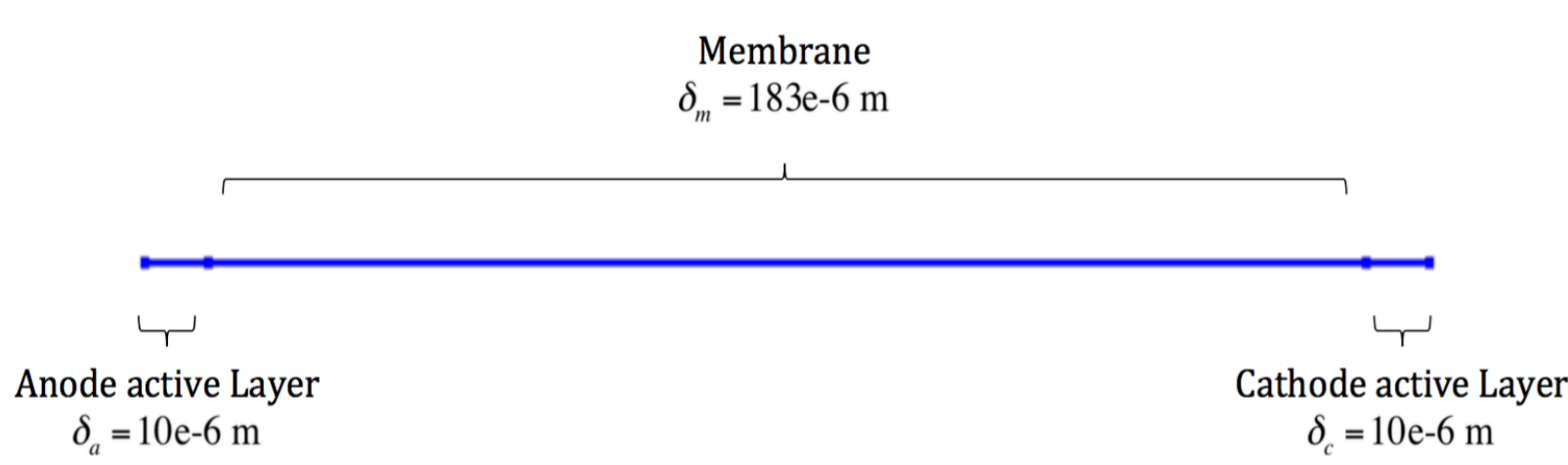
$$\frac{d}{dx_m} \left( -D_\lambda \frac{\rho_{dry}}{EW} \frac{d\lambda_m}{dx_m} + \frac{\sigma_m M_{H_2O} \tau_0}{F} \frac{d\eta_m}{dx_m} \lambda_m \right) = 0$$

Bilan des charges

$$\frac{d\eta_m}{dx_m} = \pm \frac{i_m}{\sigma_m}$$

a, c, m respectivement anode, cathode et membrane

### Modèle 1D



### Nomenclature

$D_\lambda$	Coefficient de diffusion ( $m^2 s^{-1}$ )
EW	Masse équivalente ( $kg mol^{-1}$ )
F	Constante de Faraday ( $C mol^{-1}$ )
$i_{a,c}$	Densité de courant ( $A cm^{-2}$ )
$i_l$	Densité de courant locale ( $A cm^{-2}$ )
$i_0$	Densité de courant d'échange ( $A cm^{-2}$ )
$j_0$	Densité de courant d'opération ( $A cm^{-2}$ )
$M_{H_2O}$	Masse molaire ( $kg mol^{-1}$ )
R	Constante des gaz parfait ( $J mol^{-1} K^{-1}$ )
$T_{a,c,m}$	Température (K)
$\rho_{dry}$	Masse volumique du Nafion® sec ( $kg m^{-3}$ )
$\sigma_{a,c,m}$	Conductivité protonique ( $S m^{-1}$ )
$\tau_0$	Coefficient d'échange électro-osmotique (-)
$\lambda_{sat}$	Teneur en eau de saturation (-)
$\delta_{a,c,m}$	Epaisseur (m)
$\phi_m^*$	Terme source adimensionnel à la membrane (-)
$k_{a,c}$	Constante d'intégration (-)

2

## Modèle adimensionnel

### Variables adimensionnelles

Densités de courant

$$i_{a,c}^* = \frac{i_{a,c}}{j_0}$$

Teneur en eau

$$\lambda_m^* = \frac{\lambda_m}{\lambda_{sat}}$$

### Equations différentielles

$$i_{a,c}^{*''} = \beta_{a,c} i_{a,c}^* i_{a,c}^{*'} i_{a,c}^*$$

$$\eta_m^* = \beta_m$$

### Nombres adimensionnels opérationnels

$$\beta_{a,c,m} = \frac{j_0 F \delta_{a,c,m}}{RT_{a,c,m} \sigma_{a,c,m}}$$

$$\gamma_m = \frac{M_{H_2O} \delta_m j_0 \tau_0}{\rho_{dry} D_\lambda F} EW$$

Surtensions

$$\eta_{a,c}^* = \frac{\eta_{a,c}}{\frac{RT_{a,c}}{\alpha_{a,c} F}}$$

$$\eta_m^* = \frac{\eta_m}{\frac{RT_m}{F}}$$

Longueurs caractéristiques

$$x_{a,c,m}^* = \frac{x_{a,c,m}}{\delta_{a,c,m}}$$

$$\Pi \frac{d\lambda_m^*}{dx_m^*} - \lambda_m^* \frac{d\eta_m^*}{dx_m^*} = \gamma_m \phi_m^*(x_m^*)$$

### Nombres adimensionnels intrinsèques

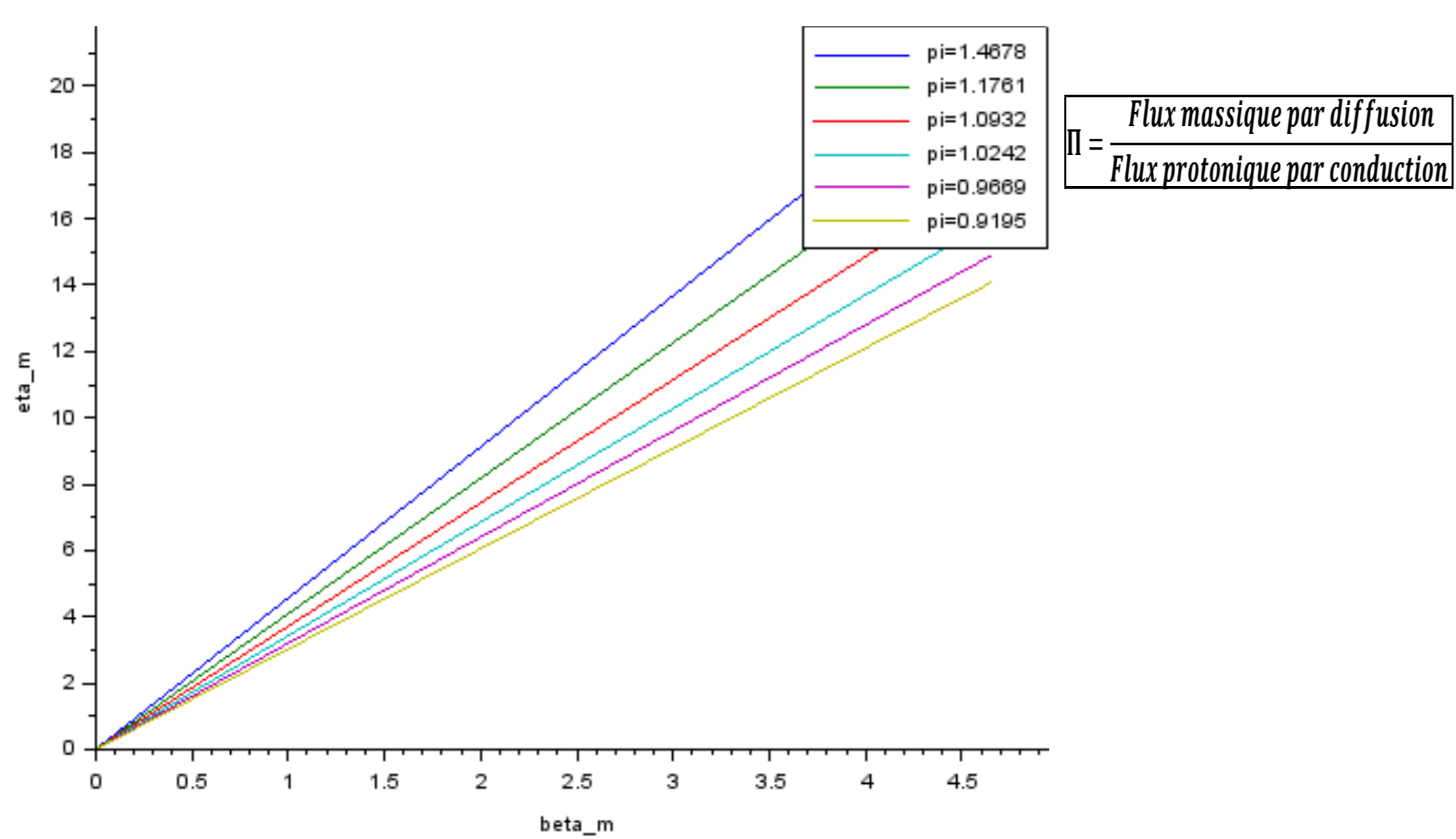
$$\Pi = \frac{F^2 D_\lambda \rho_{dry}}{M_{H_2O} \tau_0 RT_m \sigma_m EW}$$

$$w_{a,c} = \frac{F i_{0,a,c} \delta_{a,c}^2}{RT_{a,c} \sigma_{a,c}}$$

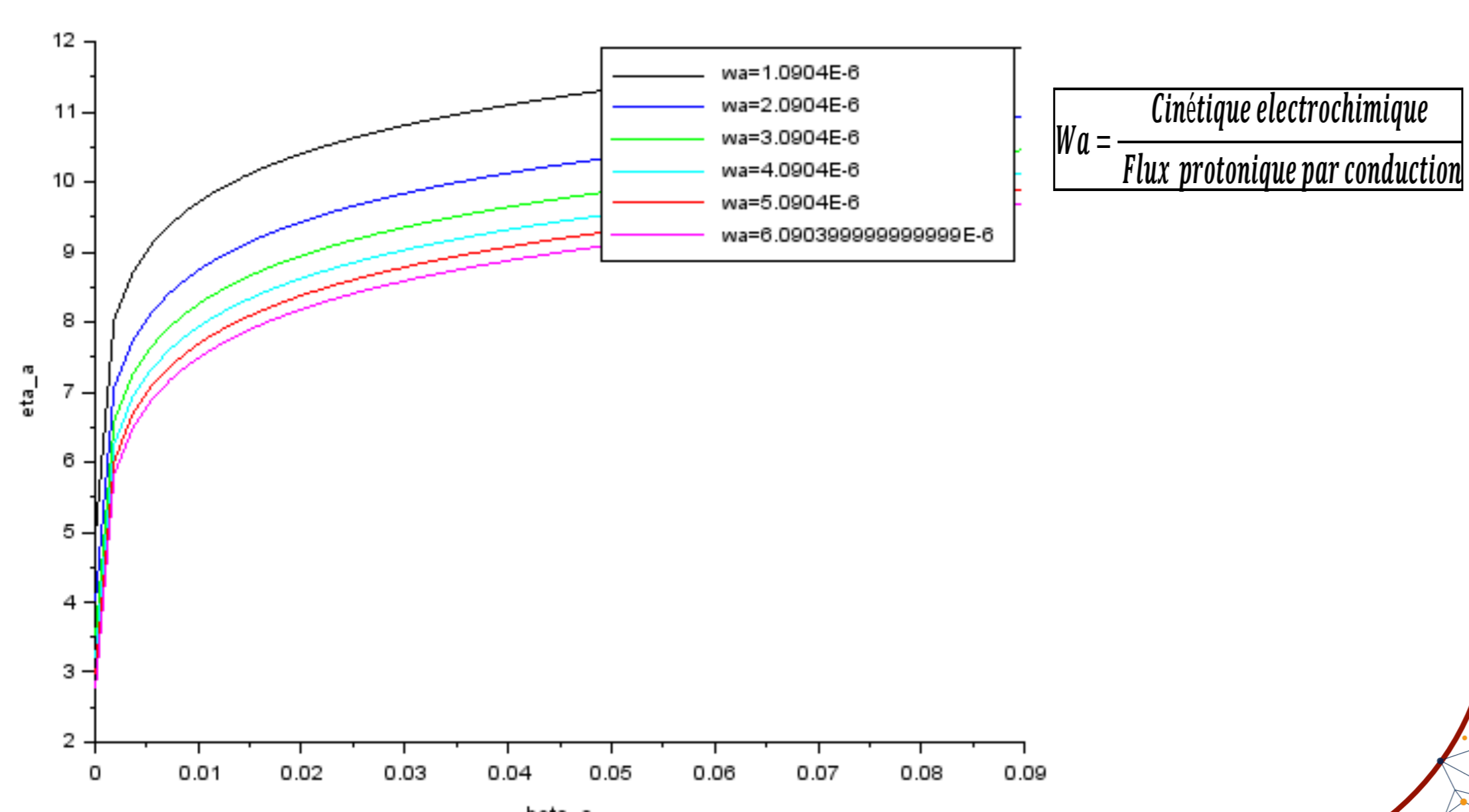
4

## Abaques

### Chute ohmique



### Surtension d'activation anodique



3

## Solution analytique

### Surtension totale

$$\eta_t^* = \eta_{act,a}^* + \eta_{act,c}^* + \eta_m^*$$

### Surtensions d'activation anodique et cathodique

$$\eta_{act,a}^* = \frac{2k_a}{\beta_a} \ln \left[ \left( \frac{2k_a}{2k_a - \beta_a} \right)^2 \right] - \ln \left[ \frac{2w_a}{(2k_a - \beta_a)^2} \right] - 2$$

$$\eta_{act,c}^* = \frac{2k_c}{\beta_c} \ln \left[ \left( \frac{2k_c}{2k_c + \beta_c} \right)^2 \right] - \ln \left[ \frac{2w_c}{(2k_c + \beta_c)^2} \right] - 2$$

### Chute ohmique

$$\eta_m^* = \frac{\Pi \gamma_m}{2}$$

5

## Discussion

La présente étude a permis de quantifier l'influence des paramètres intrinsèques ( $w_{a,c}, \Pi$ ) sur les sources d'irréversibilités aux couches catalytiques et à la membrane. Pour une augmentation du nombre  $w_{a,c}$ , les résultats démontrent une baisse significative de la surtension d'activation et pour une diminution du nombre  $\Pi$ , une réduction conséquente de la chute ohmique. En d'autres termes et d'un point de vue phénoménologique, l'approche analytique a permis de dire que :

- une vitesse de réaction importante et une conduction protonique faible aux couches catalytiques auront un impact positif sur la barrière d'activation
- une vitesse de diffusion massique lente et une conduction protonique importantes à la membrane induiront une baisse significative de la chute ohmique

Pour l'aspect opérationnel, l'expression mathématique simple de la surtension totale  $\eta_t^* = f(\beta_{a,c}, \beta_m, \Pi, w_{a,c})$  permettra d'obtenir en temps réel la surtension moyenne théorique d'un système électrolyseur pem pour un point de fonctionnement et pour une topologie donnés, représentés respectivement par  $\beta_{a,c}, \beta_m$  et  $\Pi, w_{a,c}$ .

Remerciement: Ce projet a été réalisé avec le support financier de la Région Réunion.