Modélisation multiphysique d'un stack d'un électrolyseur de type PEM

Nicolas Vignal¹, Zhongliang Li¹, Benoit Latour³, Daniel Hissel^{1,2}

¹ Université de Franche-Comté, FEMTO-ST, UTBM, CNRS, Belfort, 90000, France

² Institut Universitaire de France (IUF), France

³ Direction Opérationnelle Recherche et Développement, Michelin Ladoux, Cébazat, France

Résumé — Ce travail propose une approche de modélisation électrochimique et de transport de matière d'un électrolyseur à membrane échangeuse de protons (PEM), ainsi qu'une identification des paramètres à l'aide de contraintes basées sur la physique.

Dans cette étude, nous avons développé un modèle de comportement, couplé à une identification des paramètres clés, et nous nous concentrons sur la technologie d'électrolyse PEM.

Le modèle de comportement développé est composé de deux sous-modèles couplés : un électrochimique et un de transport de matière [1]. Différentes hypothèses sont posées pour modéliser le système : les cellules sont équivalentes, indépendantes et isolées, la densité de courant est uniforme et les contacts entre les différents composants du système sont supposés parfaits. Le modèle de transport permet de suivre les concentrations d'hydrogène et d'oxygène à travers les électrodes et la membrane. Le modèle électrochimique se compose des pertes de surtension d'activation à l'anode et à la cathode, ohmiques et de diffusion [2]. Nous obtenons le modèle de stack suivant :

$$U_{stack} = (E_{rev} + \frac{R \cdot T}{n \cdot \alpha_a \cdot F} \cdot asinh\left(\frac{i_a}{i_{0,a}}\right) + \frac{R \cdot T}{n \cdot \alpha_c \cdot F} \cdot asinh\left(\frac{i_c}{i_{0,c}}\right) + \frac{R \cdot T}{4 \cdot F} \cdot ln\frac{C_{0_2}^{mem}}{C_{0_{2,0}}^{mem}} + \frac{R \cdot T}{2 \cdot F} \cdot ln\frac{C_{H_2}^{mem}}{C_{H_{2,0}}^{mem}} + \frac{\phi}{\sigma_m} \cdot j) \cdot N_{cell}$$

Les paramètres électrochimiques, tels que les coefficients de transfert de charge $(\alpha_{an}, \alpha_{cat})$, la densité de courant d'échange $(i_{0,a}, i_{0,c})$ et la conductivité de la membrane (σ_m) , sont identifiés à partir de données expérimentales [3]. Ces paramètres sont modélisés par des fonctions de température, ce qui rend le modèle plus adapté aux conditions de fonctionnement.

Les données, issues d'un électrolyseur PEM Leancat LCWE-25-10, ont été recueillies à différentes conditions de température à l'aide du banc expérimental (voir figure 1) réalisé au laboratoire. Ce dispositif permet de contrôler le système dans diverses conditions de fonctionnement et de mesurer les principaux paramètres utiles à la simulation physique du système.

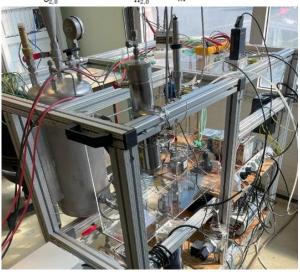


Figure 1: Banc d'essai pour un électrolyseur PEM

Conclusion

La précision du modèle dynamique est de 0,15 V sous différentes conditions de température. Ce modèle, s'appuyant sur les lois physiques peut être utilisé pour optimiser la conception et le contrôle des électrolyseurs PEM, contribuant ainsi à une production d'hydrogène plus efficace.

Références

[1] K. S. Agbli, M. C. Péra, D. Hissel, O. Rallires, C. Turpin et I. Doumbia, «Multiphysics simulation of a PEM electrolyser: Energetic Macroscopic Representation approach» International Journal of Hydrogen Energy, vol. 36, n° 12, pp. 1382-1398, 1 2011.

[2] Z. Abdin, C. J. Webb et E. M. Gray, «Modelling and simulation of a proton exchange membrane (PEM) electrolyser cell» International Journal of Hydrogen Energy, vol. 40, n° 139, pp. 13243-13257, 10 2015.

[3] A. S. Tijani, N. A. Binti Kamarudin et F. A. Binti Mazlan, «Investigation of the effect of charge transfer coefficient (CTC) on the operating voltage of polymer electrolyte membrane (PEM) electrolyzer» International Journal of Hydrogen Energy, vol. 43, n° 119, pp. 9119-9132, 5 2018.