

Vers un modèle physique 1D+1D dynamique de la pile à hydrogène PEMFC pour des systèmes embarqués

-



Raphaël Gass



Sommaire



1. Objectifs de la modélisation
2. Le système pile à combustible étudié
3. Un modèle nodal à 9 nœuds, 1D, dynamique, biphasique
4. Les résultats du modèle 1D
5. Vérifier le modèle
6. Vers un modèle 1D+1D
7. Vers une considération de la dégradation

1. Objectifs de la modélisation
2. Le système pile à combustible étudié
3. Un modèle nodal à 9 nœuds, 1D, dynamique, biphasique
4. Les résultats du modèle 1D
5. Vérifier le modèle
6. Vers un modèle 1D+1D
7. Vers une considération de la dégradation

Objectifs de la modélisation

Objectif global:

- Contribuer à l'augmentation de la durée de vie des piles à combustible. Passer de 15 000h (~7.5 ans) en 2020 à 30 000h (~15 ans) en 2030 (UE).

Objectif spécifique:

- Avoir un modèle qui permette de piloter en temps réel la pile à hydrogène en faisant varier ses paramètres de fonctionnement: T, P, Φ , S.
- Le modèle donne les états internes de la pile, afin de pouvoir ensuite:
 - maximiser la densité de courant exploitable.
 - maximiser la tension résultante.
 - minimiser l'apparition de défauts dans la pile (assèchement, noyage, chute en réactifs).
 - maximiser sa longévité.

Précision: Sur les états internes de la pile (composition, flux, densité de courant et tension).

Rapidité d'exécution: Afin de pouvoir être embarqué.

Objectifs de la modélisation

Objectif global:

- Contribuer à l'augmentation de la durée de vie des piles à combustible. Passer de 15 000h (~7.5 ans) en 2020 à 30 000h (~15 ans) en 2030 (UE).

Objectif spécifique:

- Avoir un modèle qui permette de piloter en temps réel la pile à hydrogène en faisant varier ses paramètres de fonctionnement: T, P, Φ , S.
- Le modèle donne les états internes de la pile, afin de pouvoir ensuite:
 - maximiser la densité de courant exploitable.
 - maximiser la tension résultante.
 - minimiser l'apparition de défauts dans la pile (assèchement, noyage, chute en réactifs).
 - maximiser sa longévité.

Précision: Sur les états internes de la pile (composition, flux, densité de courant et tension).

Rapidité d'exécution: Afin de pouvoir être embarqué.

Objectifs de la modélisation

Objectif global:

- Contribuer à l'augmentation de la durée de vie des piles à combustible. Passer de 15 000h (~7.5 ans) en 2020 à 30 000h (~15 ans) en 2030 (UE).

Objectif spécifique:

- Avoir un modèle qui permette de piloter en temps réel la pile à hydrogène en faisant varier ses paramètres de fonctionnement: T, P, Φ , S.
- Le modèle donne les états internes de la pile, afin de pouvoir ensuite:
 - maximiser la densité de courant exploitable.
 - maximiser la tension résultante.
 - minimiser l'apparition de défauts dans la pile (assèchement, noyage, chute en réactifs).
 - maximiser sa longévité.

Précision: Sur les états internes de la pile (composition, flux, densité de courant et tension).

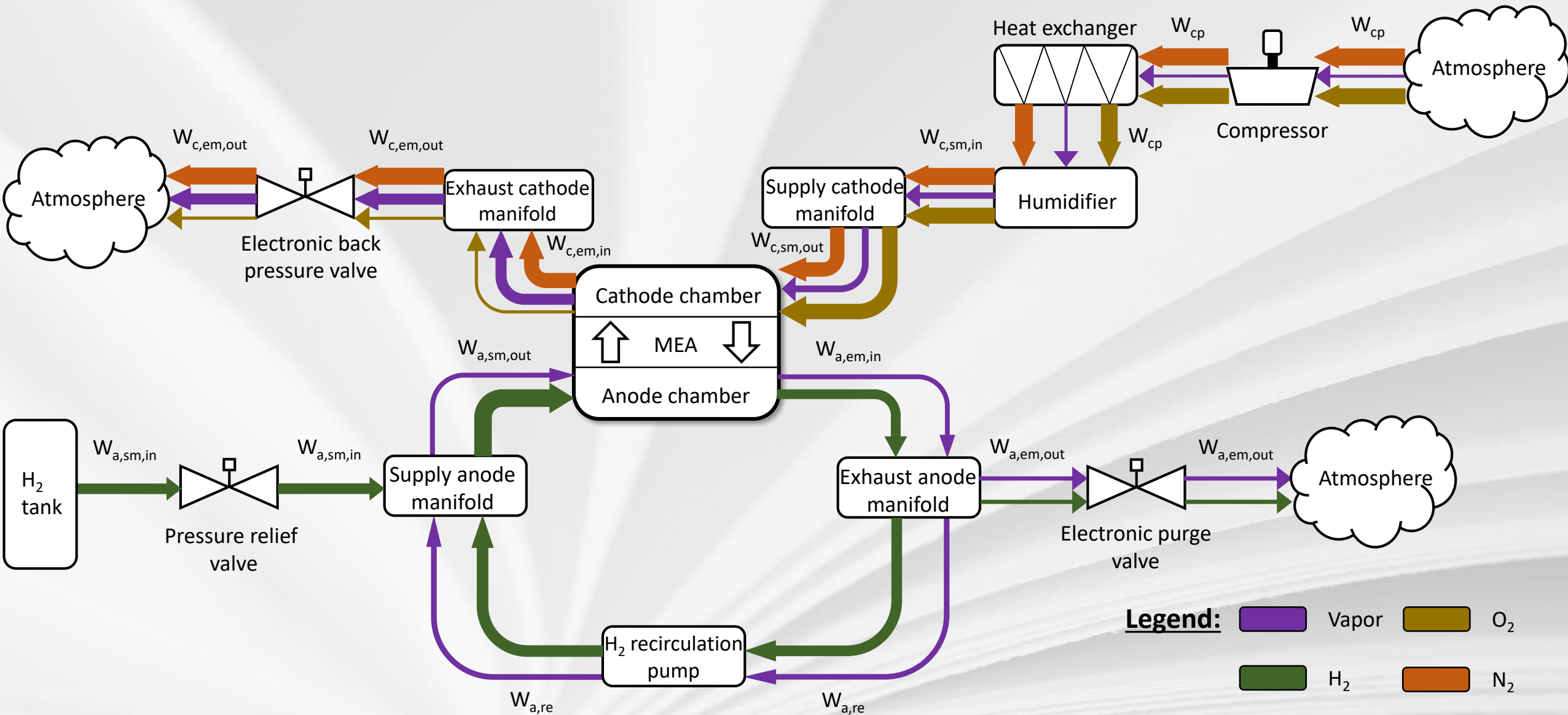
Rapidité d'exécution: Afin de pouvoir être embarqué.

Sommaire

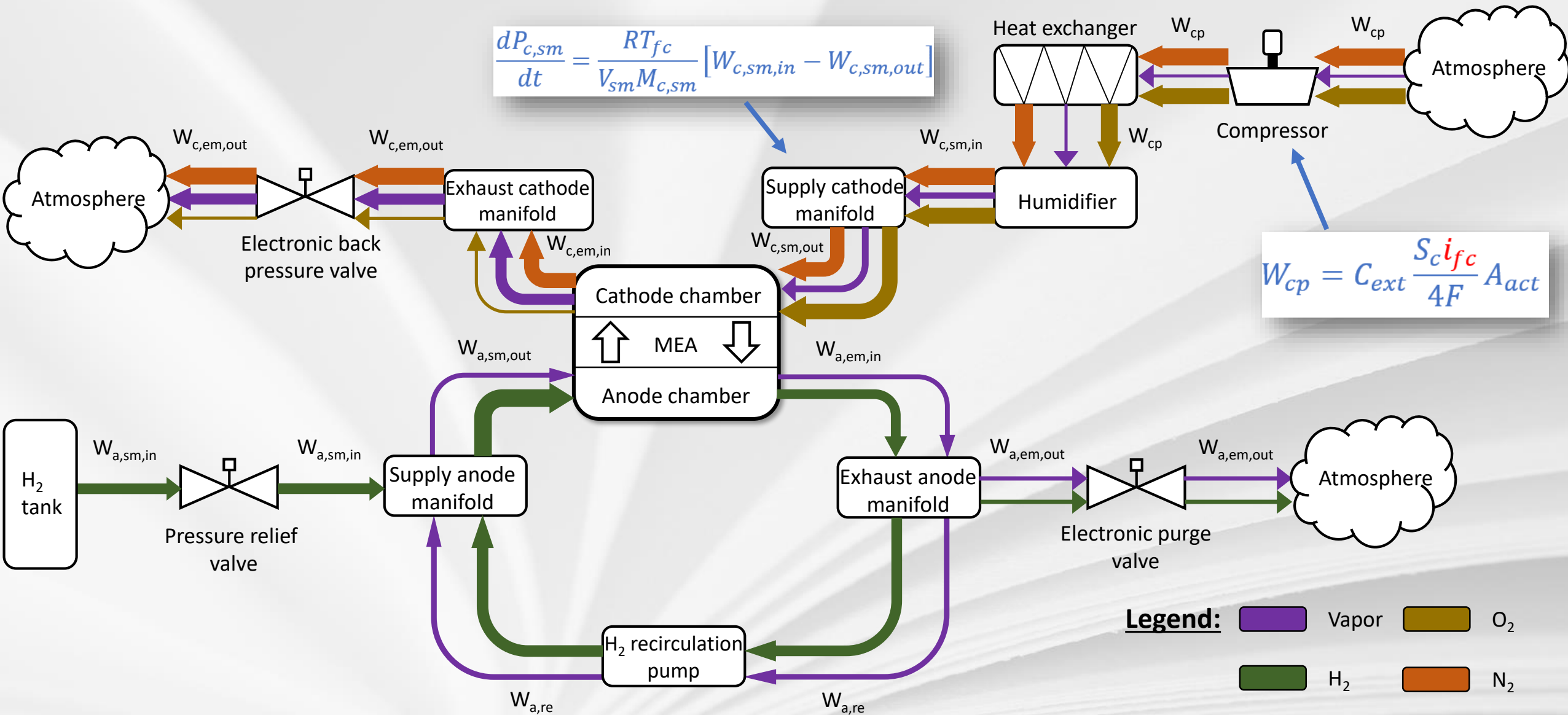


1. Objectifs de la modélisation
2. Le système pile à combustible étudié
3. Un modèle nodal à 9 nœuds, 1D, dynamique, biphasique
4. Les résultats du modèle 1D
5. Vérifier le modèle
6. Vers un modèle 1D+1D
7. Vers une considération de la dégradation

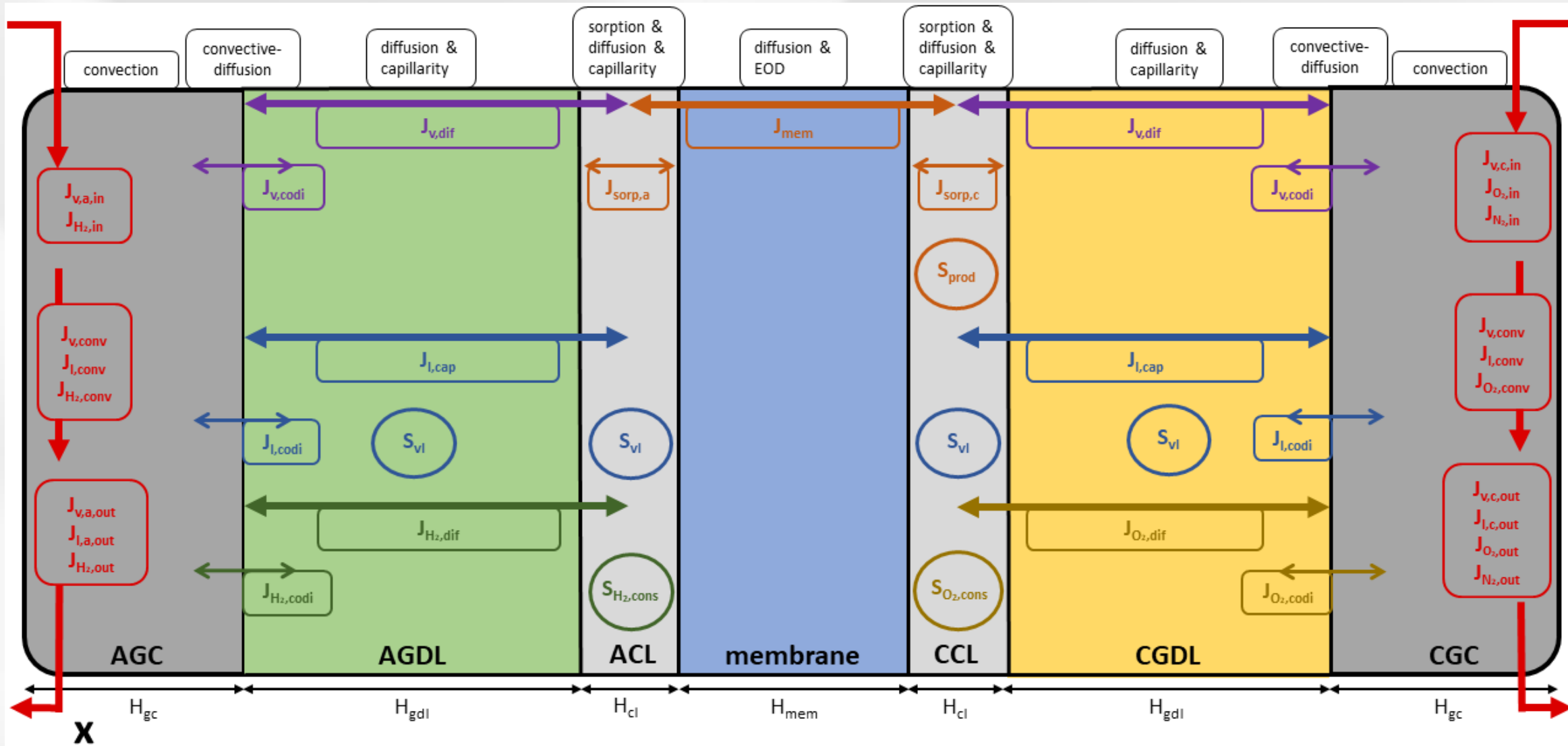
Le système pile à combustible étudié



Le système pile à combustible étudié



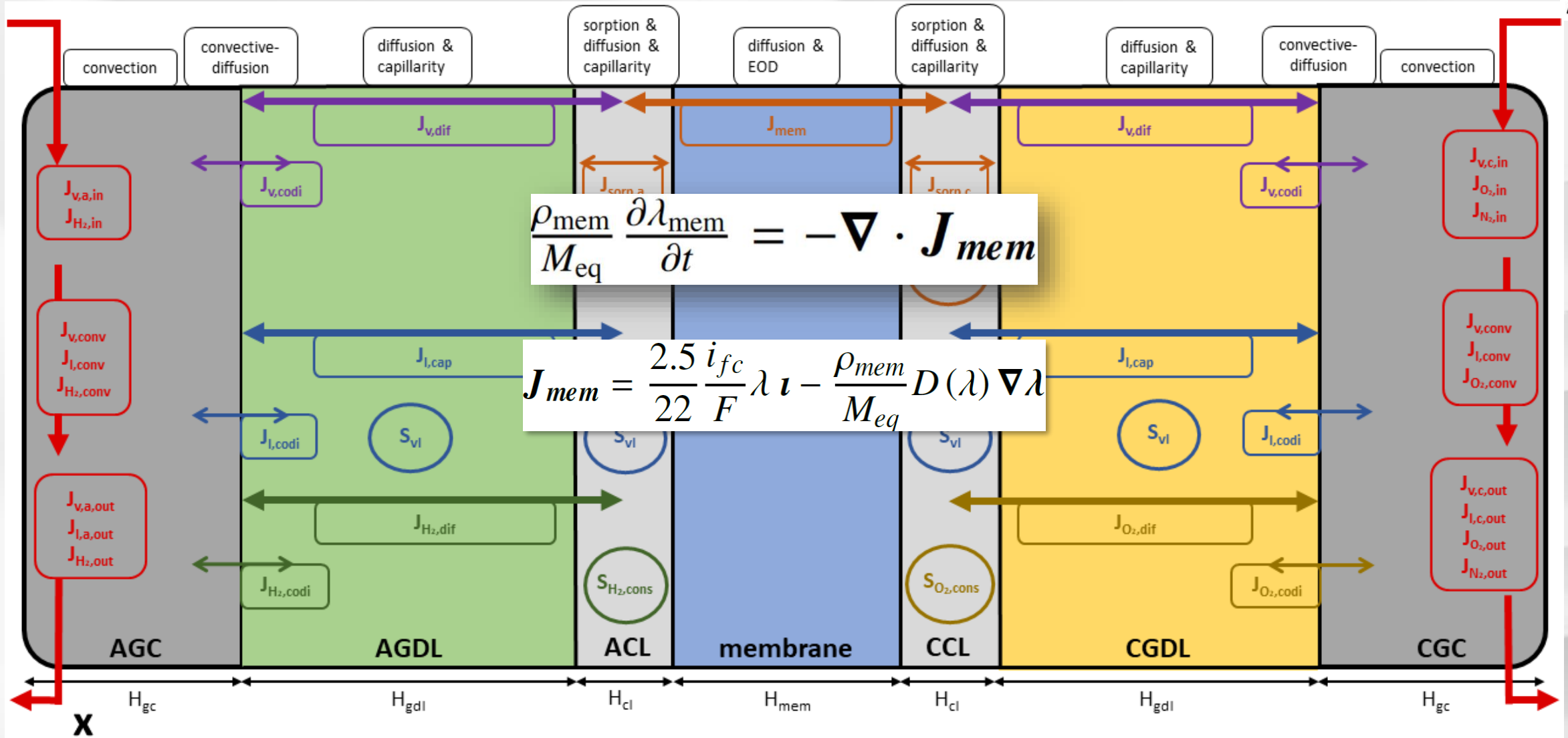
Le système pile à combustible étudié



Legend: \overleftrightarrow{J} Flow, \overleftrightarrow{J} Boundary Flow, \odot Matter conversion, Liquid water, Vapor, Dissolved water, H₂, O₂

A,a: anode, **C,c:** cathode, **cap:** capillarity, **codi:** convective-diffusion, **Cl:** catalyst layer, **cons:** consumed, **conv:** convection, **dif:** diffusion, **GC:** gas channel, **GDL:** gas diffusion layer, **in:** inlet, **l:** liquid water, **out:** outlet, **prod:** produced, **sorp:** sorption, **v:** vapor, **vl:** vapor to liquid

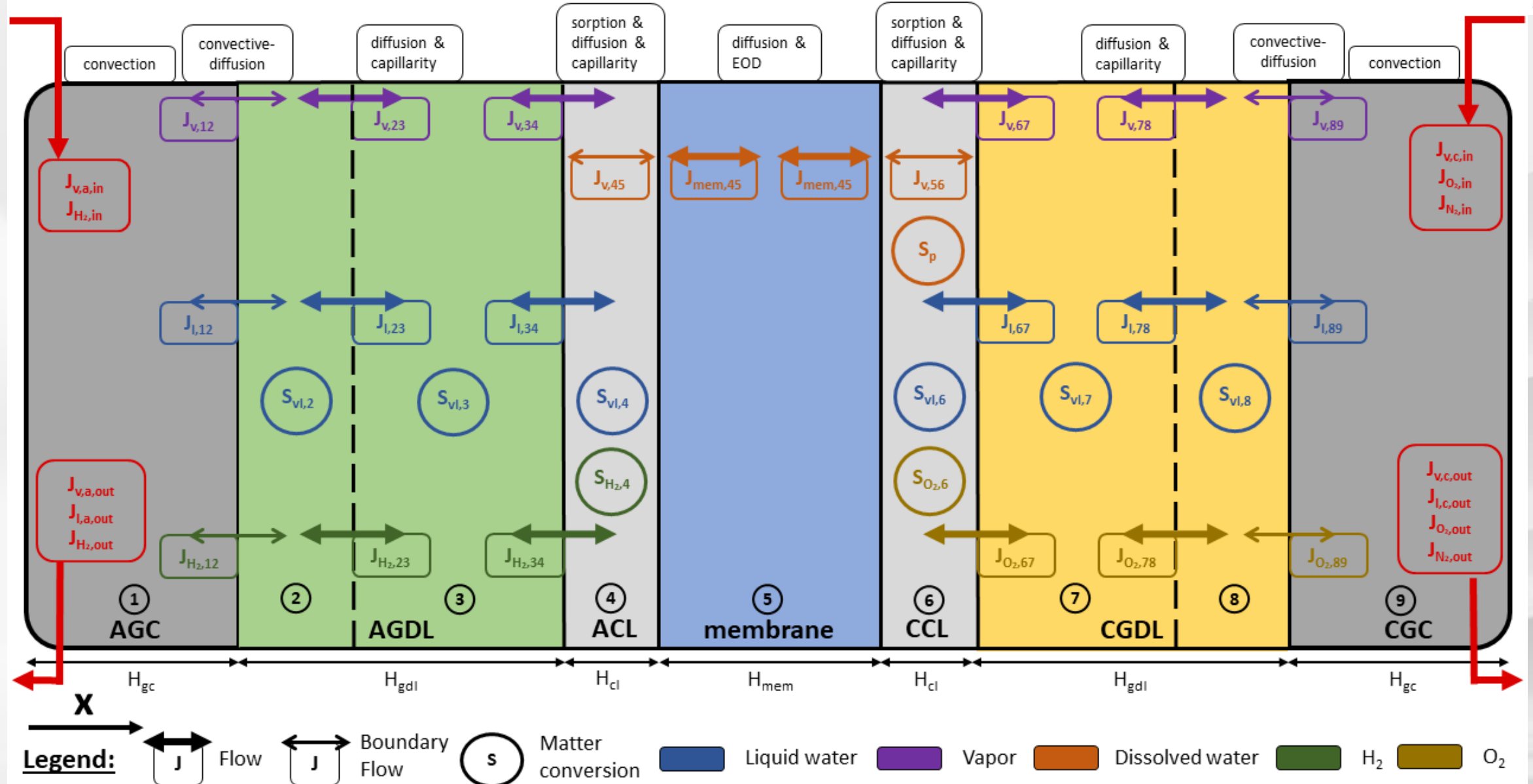
Le système pile à combustible étudié



Legend: \mathbf{J} Flow, \mathbf{J} Boundary Flow, \mathbf{S} Matter conversion, Liquid water, Vapor, Dissolved water, H₂, O₂, Gases

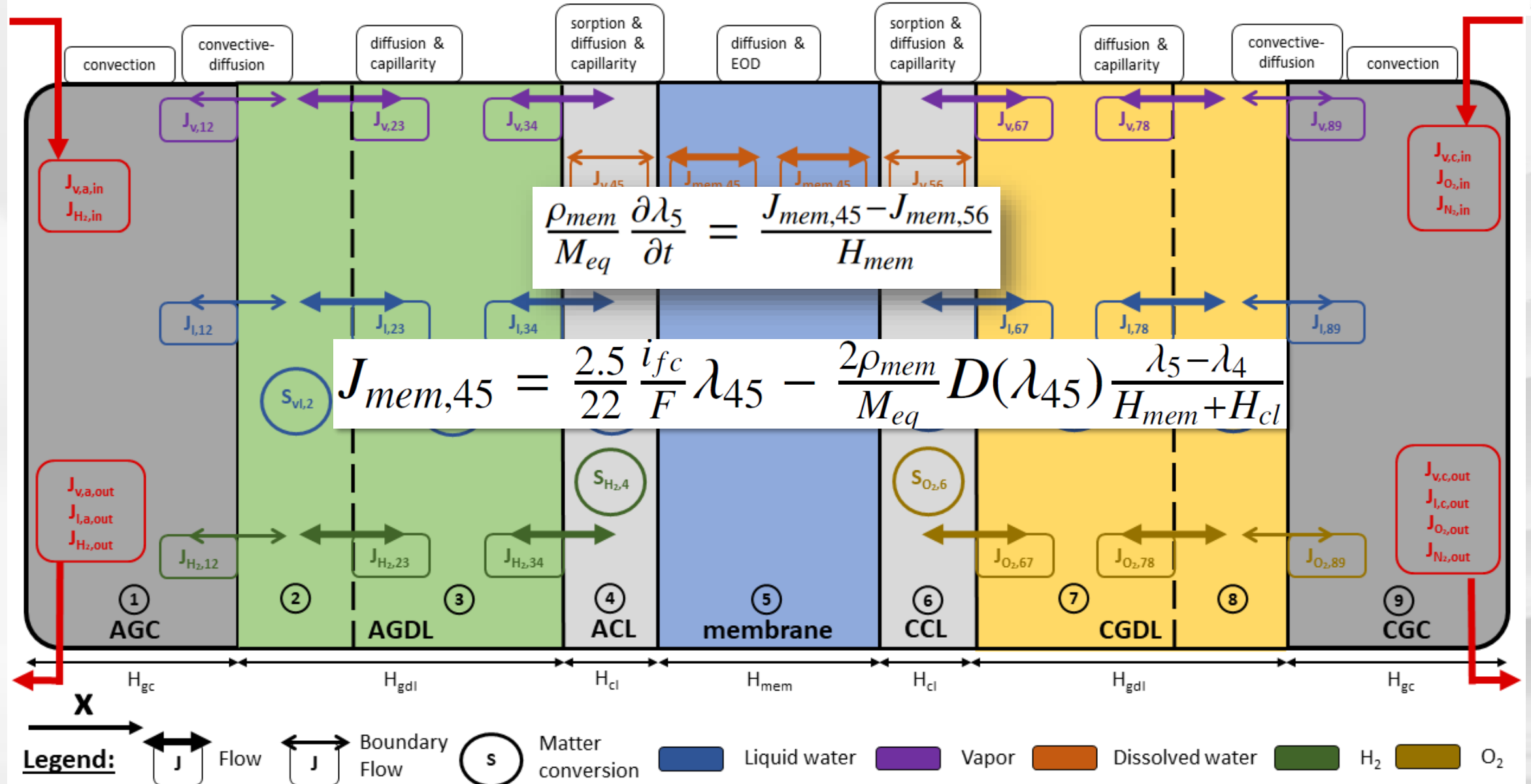
A,a: anode, **C,c:** cathode, **cap:** capillarity, **codi:** convective-diffusion, **Cl:** catalyst layer, **cons:** consumed, **conv:** convection, **dif:** diffusion, **GC:** gas channel, **GDL:** gas diffusion layer, **in:** inlet, **l:** liquid water, **out:** outlet, **prod:** produced, **sorp:** sorption, **v:** vapor, **vl:** vapor to liquid

Un modèle nodal à 9 nœuds, 1D, dynamique, biphasique



A,a: anode, **C,c:** cathode, **cap:** capillarity, **cc:** convective-conductive **Cl:** catalyst layer, **cons:** consumed, **conv:** convection, **diff:** diffusion, **GC:** gas channel, **GDL:** gas diffusion layer, **in:** inlet, **l:** liquid water, **out:** outlet, **prod:** produced, **sorp:** sorption, **v:** vapor, **vl:** vapor to liquid

Un modèle nodal à 9 nœuds, 1D, dynamique, biphasique



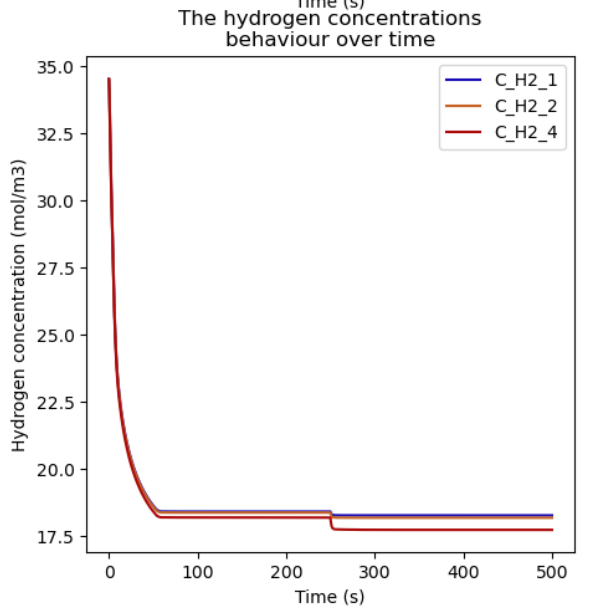
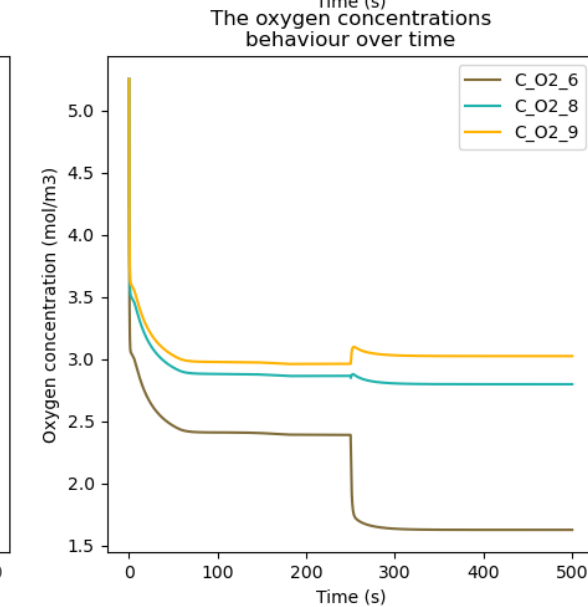
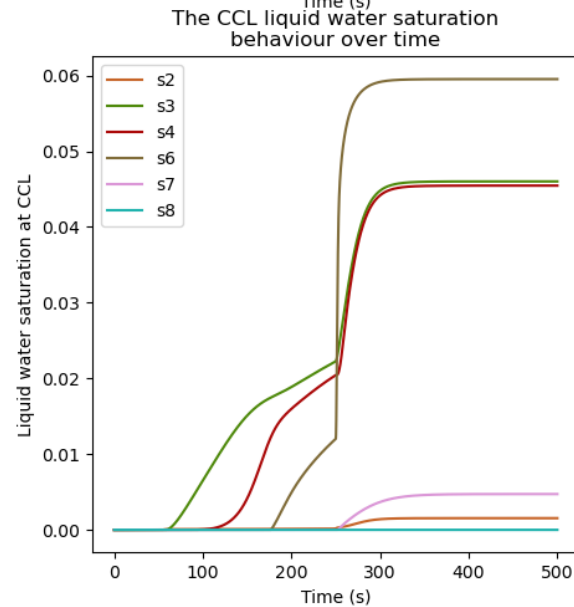
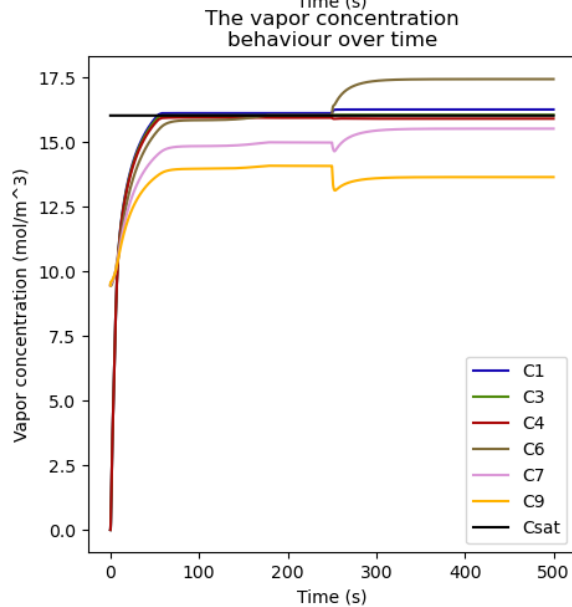
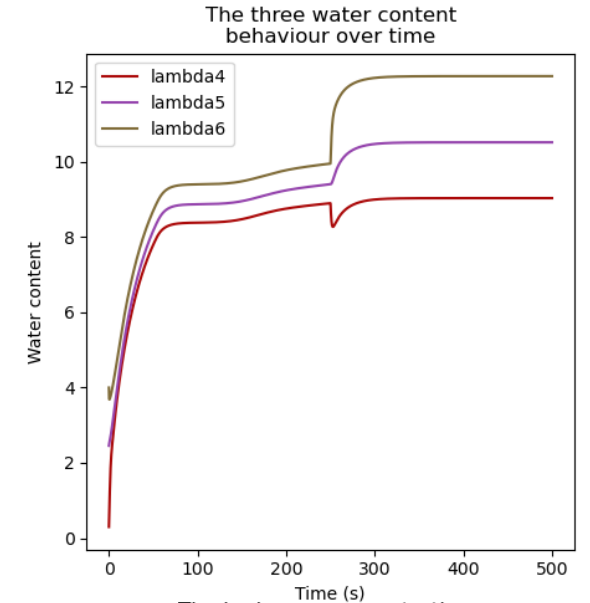
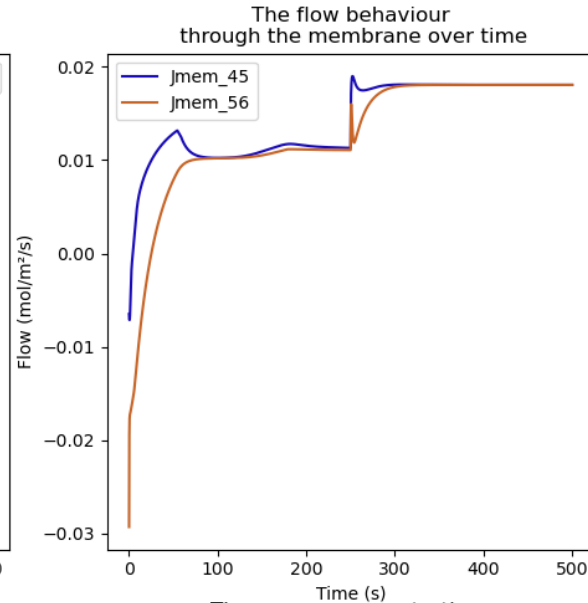
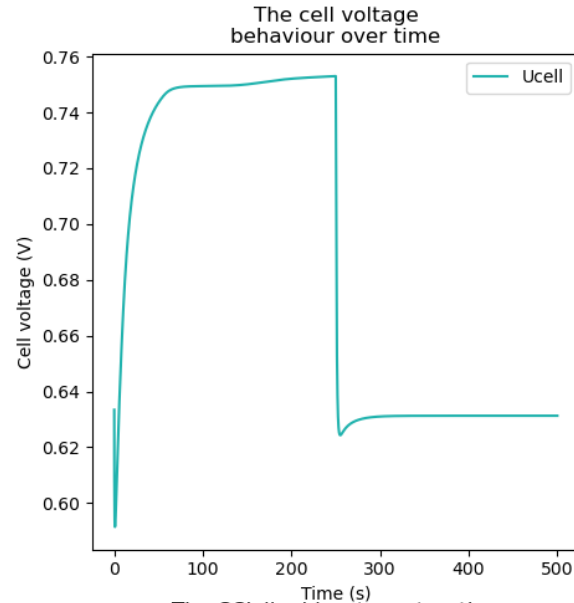
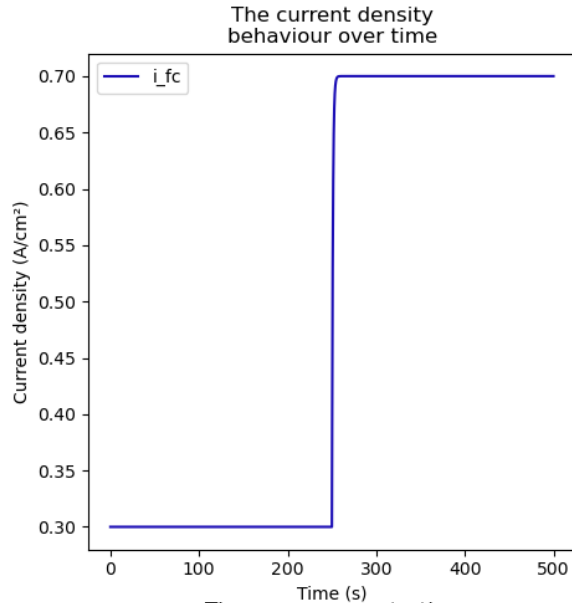
A,a: anode, C,c: cathode, cap: capillarity, cc: convective-conductive, Cl: catalyst layer, cons: consumed, conv: convection, dif: diffusion, GC: gas channel, GDL: gas diffusion layer, in: inlet, l: liquid water, out: outlet, prod: produced, sorp: sorption, v: vapor, vl: vapor to liquid

Sommaire



1. Objectifs de la modélisation
2. Le système pile à combustible étudié
3. Un modèle nodal à 9 nœuds, 1D, dynamique, biphasique
4. Les résultats du modèle 1D
5. Vérifier le modèle
6. Vers un modèle 1D+1D
7. Vers une considération de la dégradation

Les résultats du modèle 1D



Vérifier le modèle

1. Comparer à l'expérimental (macroscopique).
 - Courbes de polarisation, EIS, Bode.
 - Limites: ces analyses sont partiellement aveugles à la complexité mésoscopique.
2. Comparer à d'autres modèles (mésoscopique).
 - Impossible de passer par l'expérimental.
 - Comporte des limites: pas de liens directs avec la réalité.

Vérifier le modèle

1. Comparer à l'expérimental (macroscopique).
 - Courbes de polarisation, EIS, Bode.
 - Limites: ces analyses sont partiellement aveugles à la complexité mésoscopique.
2. Comparer à d'autres modèles (mésoscopique).
 - Impossible de passer par l'expérimental.
 - Comporte des limites: pas de liens directs avec la réalité.

Vérifier le modèle – analyse de sensibilité

Paramètres non optimisables			
Conditions opératoires	Plus petite valeur	Plus forte valeur	Sensibilité
T_{fc} (°C)	60	80	
$P_a=P_c$ (bar)	1.0	3.0	
S_a, S_c	1.4	6.0	
ϕ_a, ϕ_c	0.5	1.0	
Paramètres physiques	Plus petite valeur	Plus forte valeur	Sensibilité
A_{act} (m ²)	1,00E-04	1	**
H_{mem} (m)	5,00E-05	1,00E-04	
H_{cl} (m)	5,00E-06	5,00E-05	
H_{gdl} (m)	1,00E-04	5,00E-04	
H_{gc} (m)	1,00E-04	2,00E-03	
W_{gc} (m)	3,00E-04	2,00E-03	
L_{gc} (m)	0,1	40	**
ϵ_{gdl}	0,5	0,7	++
ϵ_{cl}	0,12	0,5	+

Paramètres macroscopiques

Paramètres mésoscopiques

Paramètres importants

Peu d'impacts. Valeur idéale recommandée

Paramètres optimisables				
Paramètres physiques	Valeur idéale	Plus petite valeur	Plus forte valeur	Sensitivity
τ	1,5	1	4	Ohm ++
ϵ_{mc}	0.25	0,15	0,4	Ohm ++
ϵ_c	/	0,15	0,3	Mass ++
Constantes basées sur l'interaction eau-structure	Valeur idéale	Plus petite valeur	Plus forte valeur	Sensitivity
γ_{cond} (s ⁻¹)	5000	1	10000	Mass +
γ_{evap} (Pa ⁻¹ .s ⁻¹)	0,0001	5,00E-05	0,001	Mass +
θ_c^{gdl} (°)	120	110	130	Mass +
θ_c^{cl} (°)	95	90	100	Mass +
e (int only)	4	3	5	Mass ++
Tension de polarisation	Valeur idéale	Plus petite valeur	Plus forte valeur	Sensitivity
R_e (Ω.m ²)	/	1,00E-06	5,00E-06	Ohm +
$C_{O_2}^{ref}$ (mol.m ⁻³)	3.39	3,39	40,89	Act ++
$i_{0,ca}$ (A.m ⁻²)	120*H _{cl}	0,001	500	Act ++
k_{co} (mol.m ⁻¹ .s ⁻¹ .Pa ⁻¹)	1	0,1	10	Act ++
α_c	0,5	0,1	0,5	Act ++
K	2	0	100	Act ++, Mass +

Vérifier le modèle – analyse de sensibilité

Paramètres non optimisables			
Conditions opératoires	Plus petite valeur	Plus forte valeur	Sensibilité
T_{fc} (°C)	60	80	
$P_a=P_c$ (bar)	1.0	3.0	
S_a, S_c	1.4	6.0	
ϕ_a, ϕ_c	0.5	1.0	
Paramètres physiques	Plus petite valeur	Plus forte valeur	Sensibilité
A_{act} (m ²)	1,00E-04	1	**
H_{mem} (m)	5,00E-05	1,00E-04	
H_{cl} (m)	5,00E-06	5,00E-05	
H_{gdl} (m)	1,00E-04	5,00E-04	
H_{gc} (m)	1,00E-04	2,00E-03	
W_{gc} (m)	3,00E-04	2,00E-03	
L_{gc} (m)	0,1	40	**
ϵ_{gdl}	0,5	0,7	++
ϵ_{cl}	0,12	0,5	+

Paramètres macroscopiques

Paramètres mésoscopiques

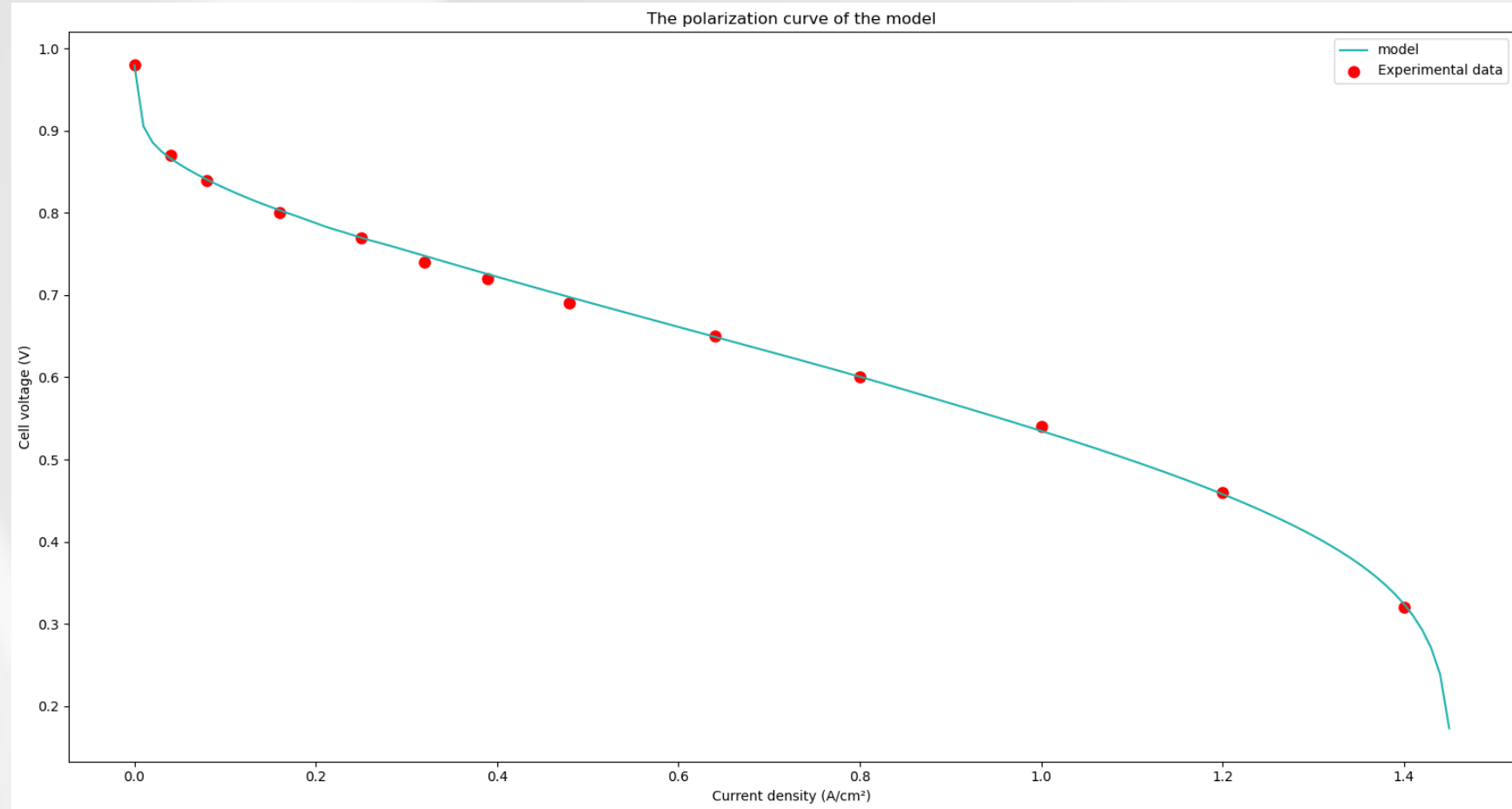
Paramètres importants

Peu d'impacts. Valeur idéale recommandée

Paramètres optimisables				
Paramètres physiques	Valeur idéale	Plus petite valeur	Plus forte valeur	Sensitivity
τ	1,5	1	4	Ohm ++
ϵ_{mc}	0.25	0,15	0,4	Ohm ++
ϵ_c	/	0,15	0,3	Mass ++
Constantes basées sur l'interaction eau-structure	Valeur idéale	Plus petite valeur	Plus forte valeur	Sensitivity
γ_{cond} (s ⁻¹)	5000	1	10000	Mass +
γ_{evap} (Pa ⁻¹ .s ⁻¹)	0,0001	5,00E-05	0,001	Mass +
θ_c^{gdl} (°)	120	110	130	Mass +
θ_c^{cl} (°)	95	90	100	Mass +
e (int only)	4	3	5	Mass ++
Tension de polarisation	Valeur idéale	Plus petite valeur	Plus forte valeur	Sensitivity
R_e (Ω.m ²)	/	1,00E-06	5,00E-06	Ohm +
$C_{O_2}^{ref}$ (mol.m ⁻³)	3.39	3,39	40,89	Act ++
$i_{0,ca}$ (A.m ⁻²)	120*H _{cl}	0,001	500	Act ++
k_{Co} (mol.m ⁻¹ .s ⁻¹ .Pa ⁻¹)	1	0,1	10	Act ++
α_c	0,5	0,1	0,5	Act ++
K	2	0	100	Act ++, Mass +

Vérifier le modèle – courbe de polarisation

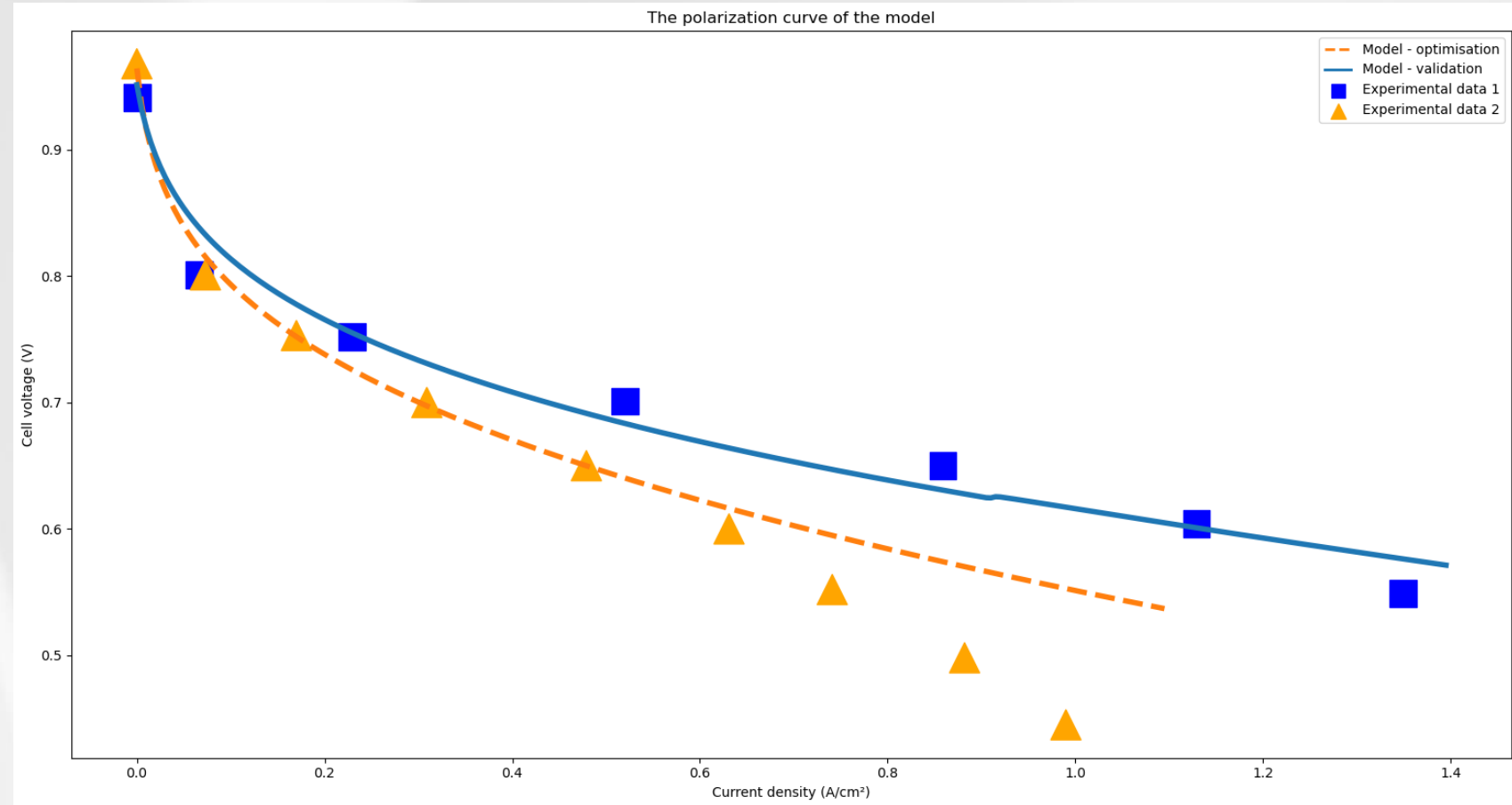
Paramètres non-optimisables		
Conditions opératoires	Valeur de l'auteur	Valeur extrapolée
T_{fc} (°C)	80	/
$P_a=P_c$ (bar)	1.0	/
S_a, S_c	2.0, 1.5	/
ϕ_a, ϕ_c	0.84, 0.59	/
Paramètres physiques	Valeur de l'auteur	Valeur extrapolée
A_{act} (m ²)	/	2,50E-03
H_{mem} (m)	5,08E-05	/
H_{cl} (m)	1,00E-05	/
H_{gdl} (m)	4,20E-04	/
H_{gc} (m)	1,00E-03	/
W_{gc} (m)	8,00E-04	/
L_{gc} (m)	/	1,6
ϵ_{gdl}	0,6	/
ϵ_{cl}	0,3	/



Linhao Fan 2017

Vérifier le modèle – courbe de polarisation

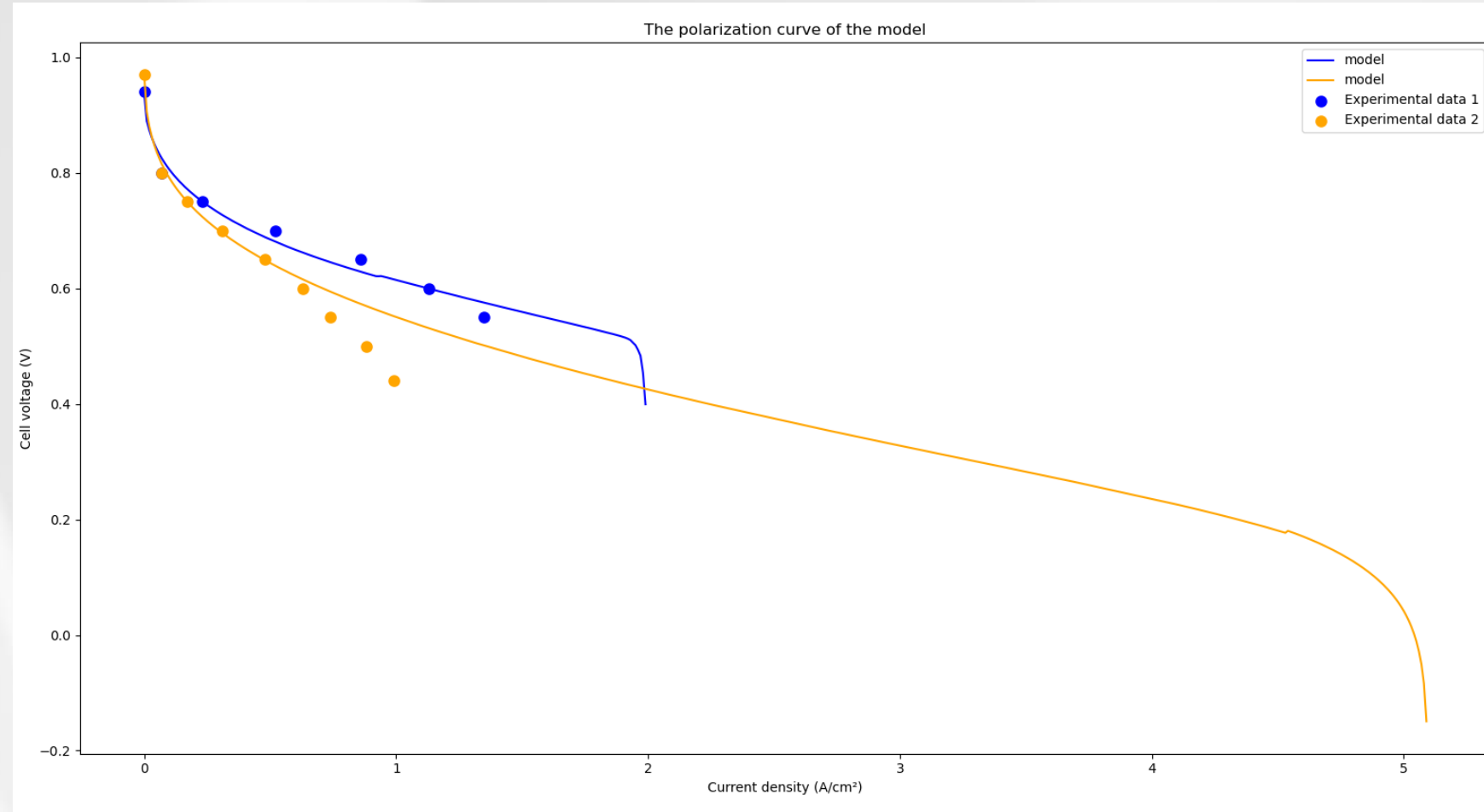
Paramètres non-optimisables		
Conditions opératoires	Valeur de l'auteur	Valeur extrapolée
T_{fc} (°C)	80	/
$P_a=P_c$ (bar)	1.35 1.0	/
S_a, S_c	1.5, 2.0	/
ϕ_a, ϕ_c	1.0, 0.5 0.25, 0.25	/
Paramètres physiques	Valeur de l'auteur	Valeur extrapolée
A_{act} (m ²)	5,00E-03	/
H_{mem} (m)	1,00E-05	/
H_{cl} (m)	1,00E-05	/
H_{gdl} (m)	2,00E-04	/
H_{gc} (m)	5,00E-04	/
W_{gc} (m)	8,00E-04	/
L_{gc} (m)	/	3,0
ϵ_{gdl}	0,65	/
ϵ_{cl}	/	0.35



Biao Xie 2019

Vérifier le modèle – courbe de polarisation

Paramètres non-optimisables		
Conditions opératoires	Valeur de l'auteur	Valeur extrapolée
T_{fc} (°C)	80	/
$P_a=P_c$ (bar)	1.35	/
S_a, S_c	1.5, 2.0	/
ϕ_a, ϕ_c	1.0, 0.5 0.25, 0.25	/
Paramètres physiques	Valeur de l'auteur	Valeur extrapolée
A_{act} (m ²)	5,00E-03	/
H_{mem} (m)	1,00E-05	/
H_{cl} (m)	1,00E-05	/
H_{gdl} (m)	2,00E-04	/
H_{gc} (m)	5,00E-04	/
W_{gc} (m)	8,00E-04	/
L_{gc} (m)	/	3,0
ϵ_{gdl}	0,65	/
ϵ_{cl}	/	0.35



Biao Xie 2019

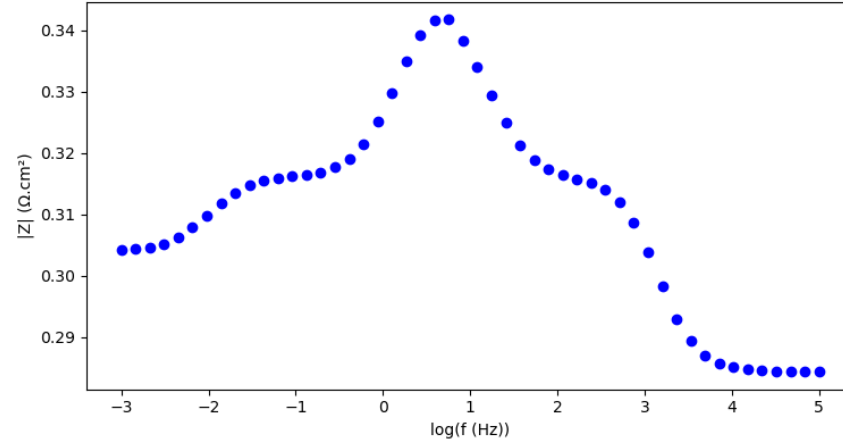
Vérifier le modèle – courbe EIS et diagrammes de Bode



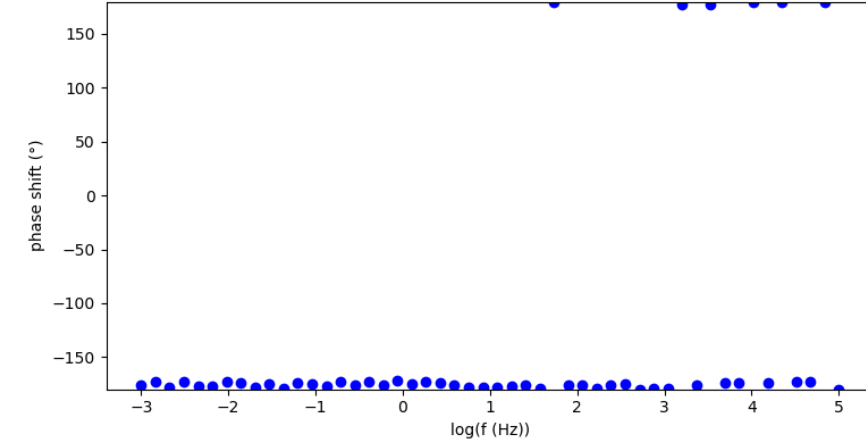
Paramètres non-optimisables

Conditions opératoires	Valeur de l'auteur	Valeur extrapolée
T_{fc} (°C)	80	/
$P_a=P_c$ (bar)	1.0	/
S_a, S_c	2.0, 1.5	/
ϕ_a, ϕ_c	0.84, 0.59	/
Paramètres physiques	Valeur de l'auteur	Valeur extrapolée
A_{act} (m ²)	/	2,50E-03
H_{mem} (m)	5,08E-05	/
H_{cl} (m)	1,00E-05	/
H_{gdl} (m)	4,20E-04	/
H_{gc} (m)	1,00E-03	/
W_{gc} (m)	8,00E-04	/
L_{gc} (m)	/	1,6
ϵ_{gdl}	0,6	/
ϵ_{cl}	0,3	/

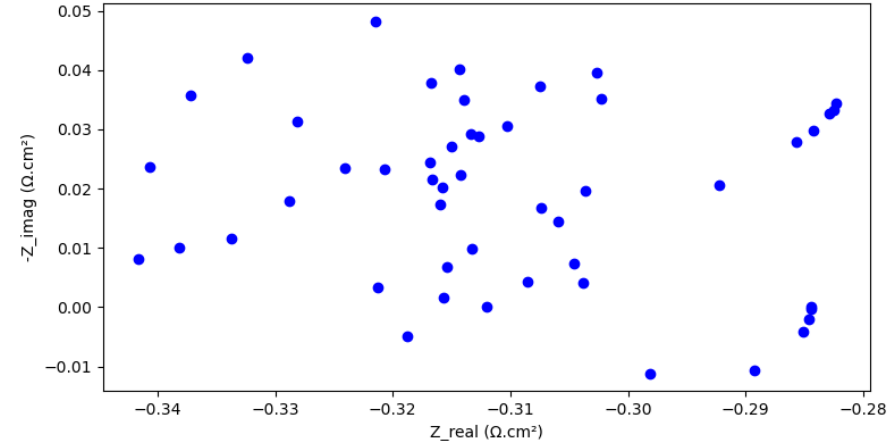
The Bode curve of the model (1/2)



The Bode curve of the model (2/2)



The Nyquist plots of the model



Linhao Fan 2017

Sommaire



1. Objectifs de la modélisation
2. Le système pile à combustible étudié
3. Un modèle nodal à 9 nœuds, 1D, dynamique, biphasique
4. Les résultats du modèle 1D
5. Vérifier le modèle
- 6. Vers un modèle 1D+1D**
- 7. Vers une considération de la dégradation**

Vers un modèle 1D+1D

Objectifs:

- Proposer un modèle global cohérent, qui respecte la physique.
- Un modèle dynamique non isotherme et biphasique.

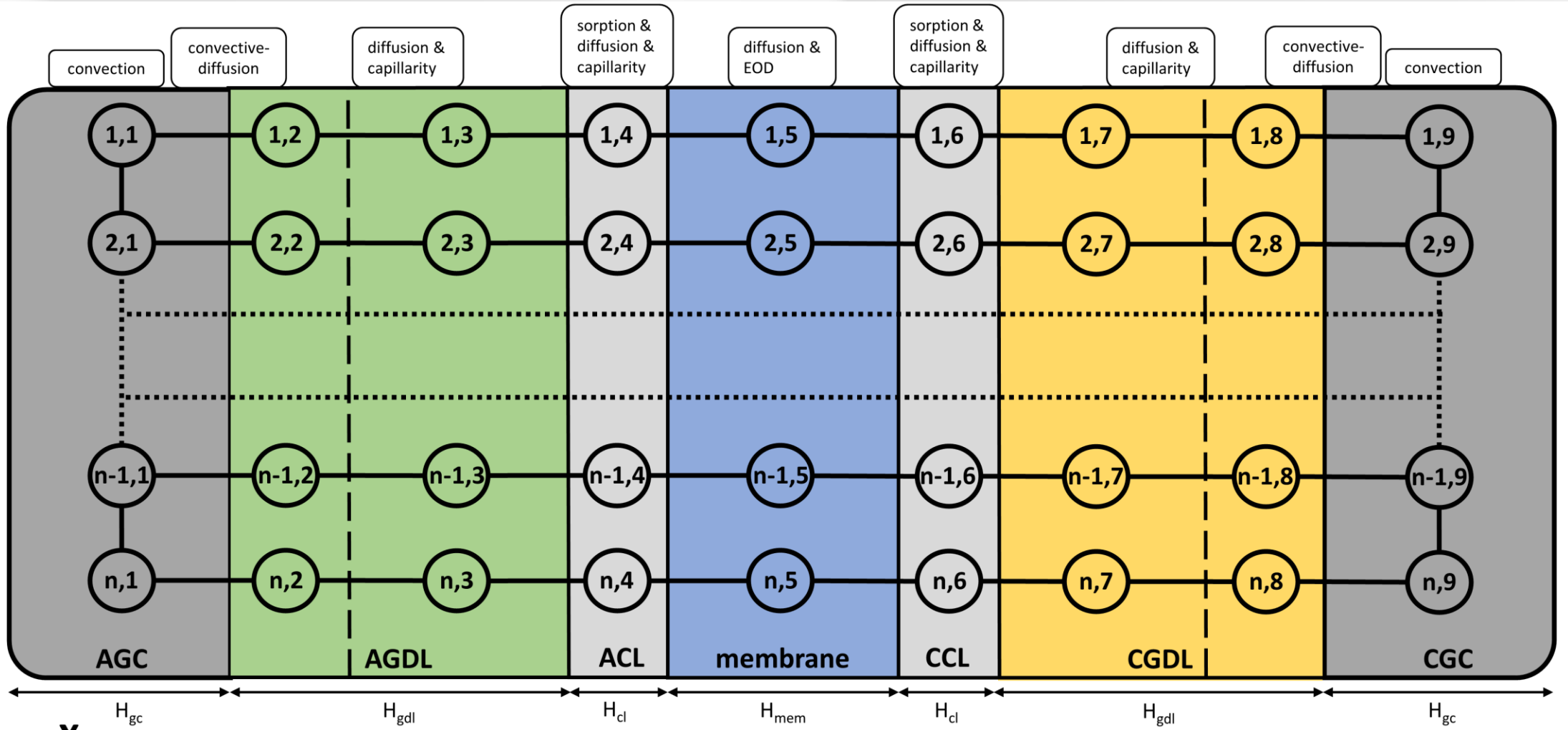
Avantages:

- Pouvoir prédire le point de chute de la courbe de polarisation.
- Pouvoir prédire plus précisément l'apparition de défauts dans la pile.
- Pouvoir avoir un contrôle plus précis de la dégradation.
- Améliorer la courbe EIS simulée ?

Risques:

- Ne pas réussir à surmonter ce challenge.
- Avoir des temps de calculs importants.

Vers un modèle 1D+1D



Legend:

X
→
Y
↓

- Liquid water
- Vapor
- Dissolved water
- H₂
- O₂

A,a: anode, C,c: cathode, cap: capillarity, cc: convective-conductive CL: catalyst layer, cons: consumed, conv: convection, dif: diffusion, Gases
 GC: gas channel, GDL: gas diffusion layer, in: inlet, l: liquid water, out: outlet, prod: produced, sorp: sorption, v: vapor, vl: vapor to liquid

Vers une considération de la dégradation

- Beaucoup de travaux sur le pronostic utilisent les courbes de polarisation et EIS.
- Il est donc fortement utile de pouvoir les simuler correctement.





Des questions ?



raphael.gass@femto-st.fr