

Etude numérique sur la modélisation d'un écoulement multi-phase dans les Proton Exchange Membrane Fuel Cells (PEMFC)

Labo d'accueil : ISAS/DES/DM2S/STMF/LGLS

Encadrants : Elie SAIKALI (elie.saikali@cea.fr), Adrien BRUNETON (adrien.bruneton@cea.fr)

Démarrage: mars 2022

Possibilité de poursuite en thèse : oui

Les piles à combustibles PEMFC (*Proton Exchange Membrane Fuel Cell*) permettent la conversion de l'hydrogène en électricité. L'intérêt de ces piles est qu'elles peuvent être embarquées dans des véhicules (voiture bus, camion, train...) pour alimenter en électricité des moteurs électriques en complément ou en substitution des batteries pour augmenter l'autonomie et permettre des recharges rapides en hydrogène. Cependant leur coût élevé et leur durabilité encore insuffisante nécessite des travaux de recherche importants pour améliorer leurs performances et réduire les mécanismes de vieillissement responsables de leur dégradation. Pour atteindre ces objectifs il est indispensable de parfaitement comprendre les différents mécanismes physiques, chimiques, électrochimiques qui se produisent dans les piles. Deux approches complémentaires sont utilisées : l'expérimentation et la simulation. Ce stage se situe dans l'approche modélisation/simulation.

Au CEA, la simulation numérique des PEMFC à l'échelle complète et/ou microscopique vise à fournir des résultats numériques sans compromis ni sur la géométrie complexe de cette technologie ni sur l'exactitude physique des phénomènes complexes sur lesquels elles reposent. La structure de la pile (voir *fig 1*) comprend deux séries de canaux de gaz distincts utilisés pour alimenter la couche active avec les deux réactifs impliqués dans le mécanisme de recombinaison : l'oxygène (O_2) de l'air d'un côté et l'hydrogène (H_2) d'un réservoir de l'autre, tous deux circulant en régime non turbulent (nombre de Reynolds jusqu'à 300-400). Ces deux canaux sont aussi la voie principale de sortie de l'eau (vapeur et potentiellement liquide) produit de la réaction électrochimique qui fournit l'électricité. Suivant le régime de fonctionnement et d'autres paramètres locaux (température, fraction molaire de vapeur, propriétés de surface, etc.), l'eau peut se condenser dans le canal et former soit un film à la frontière avec le milieu poreux, soit à l'extrême un bouchon liquide, dégradant ainsi le fonctionnement de la pile. Il est donc clair qu'une simulation multi-phase précise des différentes espèces et phases (H_2 , O_2 , eau) circulant dans les canaux est nécessaire.

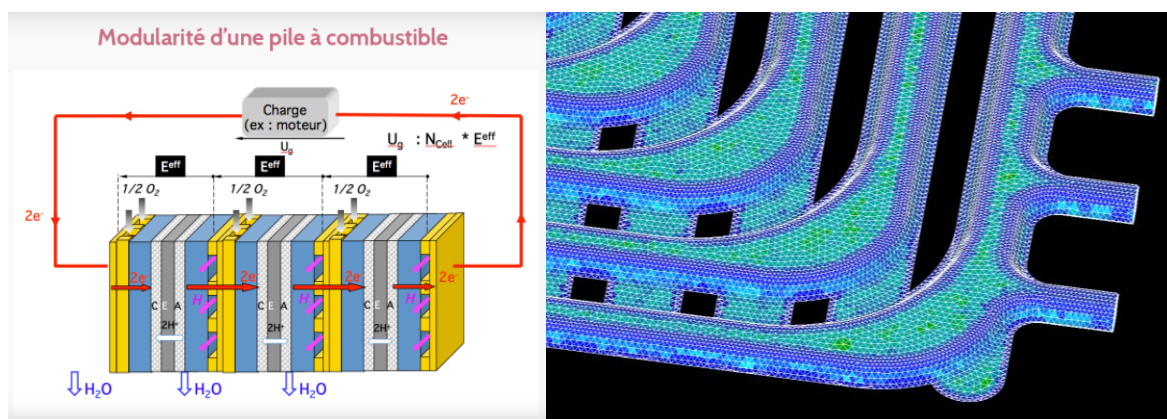


Fig 1. Gauche : Schéma d'une pile à combustible (canaux en jaune), droite : maillage des canaux.

Ce travail de stage servira d'étude préliminaire avant une thèse qui visera la mise en œuvre et la validation d'un modèle multi-phase permettant de réaliser une simulation couplée entre les différentes régions de la pile à l'échelle du système complet (canaux gaz, canaux de refroidissement, membrane, ...). Le but de ce stage est donc de faire le point sur l'ensemble de l'état de l'art et des travaux théoriques/numériques réalisés jusqu'à présent sur la modélisation multiphasique des PEMFC [1,2,3]. Une fois que cette étude de la littérature sera réalisée, le deuxième but du stage concerne la mise en place d'un modèle multi-phase simplifié dans TRUST (plateforme open-source HPC thermohydraulique, développée au sein du CEA/DES). Dans ce travail, seuls les canaux gaz seront considérés. L'objectif de cette partie est de tester l'efficacité/précision des différentes approches rapportées dans la littérature (modèles homogènes, 6 équations ...) où les résultats obtenus avec un autre solveur seront utilisés pour comparaison. Ce travail sera basé sur une nouvelle architecture introduite récemment dans TRUST qui permet de généraliser la résolution des écoulements à N-phases avec 3N équations.

Lieu :

- le stage se déroulera dans les locaux du LGLS au CEA Saclay

Compétences :

- bonne maîtrise du C++ et des outils informatiques (Linux, Git, ...)
- compétences en physique et en CFD, idéalement en écoulements diphasiques

Rémunération :

- la rémunération est fixée par les grilles du CEA et dépend de la formation initiale du (de la) candidat(e) retenu(e).

Bibliographie :

- [1] Zhang et al. "A comprehensive three-dimensional model coupling channel multi-phase flow and electrochemical reactions in proton exchange membrane fuel cell", *Advances in Applied Energy*, 2021.
- [2] Zhang et al. "A 3D model of PEMFC considering detailed multiphase flow and anisotropic transport properties", *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2017.
- [3] Kone et al. "Three-dimensional multiphase flow computational fluid dynamics models for proton exchange membrane fuel cell: A theoretical development", *The Journal of Computational Multiphase Flows*, 2017.