

Développement d'un modèle multi physique multidimensionnel de pile à combustible à membrane échangeuse de proton en temps réel pour système embarqué

Pierre Massonnat

▶ **To cite this version:**

Pierre Massonnat. Développement d'un modèle multi physique multidimensionnel de pile à combustible à membrane échangeuse de proton en temps réel pour système embarqué. Energie électrique. Université de Technologie de Belfort-Montbeliard, 2015. Français. NNT : 2015BELF0268 . tel-01423668v2

HAL Id: tel-01423668
https://hal.science/tel-01423668v2

Submitted on 14 Sep 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.

SPIM

Thèse de Doctorat

date de soutenance : 26/09/2015

école doctorale **sciences pour l'ingénieur et microtechniques**

UNIVERSITÉ DE TECHNOLOGIE BELFORT-MONTBÉLIARD

Développement d'un modèle multi physique multidimensionnel de pile à combustible à membrane échangeuse de proton en temps réel pour système embarqué

PIERRE MASSONNAT

MEMBRES DU JURY :

Pr. Mohammed Benbouzid	Université de Brest (Rapporteur)
Pr. Radu Munteanu	Université de Cluj (Rapporteur)
Pr. Demba Diallo	Université Paris Sud (Examinateur)
Pr. Mohamed Gabsi	Ecole normale supérieur de Cachan (Examinateur)
Pr. Abdellatif Miraoui	Université de Technologie de Belfort-Montbeliard (Directeur)
Dr. David Bouquain	Université de Technologie de Belfort-Montbeliard (Encadrant)
Dr. Fei Gao	Université de Technologie de Belfort-Montbeliard (Encadrant)

THESE – Développement d'un modèle multi physique multidimensionnel de pile à combustible à membrane échangeuse de proton en temps réel pour système embarqué

Massonnat Pierre

17 août 2015

Table des matières

1 État de l'art **14**
1.1 La pile à combustible . . . 14
1.1.1 Qu'est-ce qu'une pile à combustible ? . . . 14
1.1.1.1 La pile . . . 14
1.1.1.2 L'intérêt de la pile à combustible . . . 16
1.1.1.2.1 La stratégie énergétique . . . 16
1.1.1.2.2 L'environnement . . . 19
1.1.1.2.3 Les spécificités techniques de la pile à combustible PEM . . . 19
1.1.2 Pourquoi faire un modèle temps réel en plusieurs dimensions ? . . . 20
1.1.2.1 Pourquoi faire un modèle ? . . . 20
1.1.2.2 Schéma équivalent électrique . . . 20
1.1.2.3 Modèle multi-physique . . . 20
1.1.2.4 Modèle multi-dimensionnel . . . 21
1.1.2.5 Modèle temps réel . . . 21
1.1.3 Fonctionnement et modélisation physique . . . 22
1.1.3.1 Le fonctionnement . . . 22
1.1.3.2 La modélisation . . . 23
1.1.3.3 La localisation des phénomènes . . . 24
1.1.3.4 Les phénomènes fluidiques . . . 24
1.1.3.4.1 La diffusion . . . 24
1.1.3.4.2 La gravité . . . 26
1.1.3.4.3 La condensation . . . 26
1.1.3.4.4 La capillarité . . . 27
1.1.3.4.5 Les frottements en matériaux poreux . . . 27
1.1.3.4.6 L'électro-osmose (membrane) . . . 28
1.1.3.4.7 La back diffusion (membrane) . . . 28
1.1.3.5 Les phénomènes thermiques . . . 28
1.1.3.5.1 La convection thermique . . . 28
1.1.3.5.2 Les pertes thermiques dans la réaction . . . 29
1.1.3.5.3 L'effet Joule . . . 29
1.1.3.6 Les phénomènes électrochimiques . . . 29
1.1.3.6.1 Le potentiel thermodynamique . . . 29
1.1.3.6.2 Le phénomène d'activation . . . 30
1.1.3.6.3 La conduction ionique (membrane) . . . 31
1.1.3.6.4 La capacité de double couche . . . 31
1.1.3.7 La correction de Bruggemann . . . 31
1.1.4 Vieillissement de la pile à combustible . . . 31
1.1.4.1 Les différents dommages . . . 31
1.1.4.1.1 La corrosion . . . 33
1.1.4.1.2 La pollution . . . 35
1.1.4.1.3 La réorganisation du platine . . . 36
1.1.4.1.4 Les dommages structuraux . . . 37
1.1.4.2 Les mécanismes d'endommagement . . . 37
1.1.4.2.1 La physiologie chimique de la cellule . . . 40

1.1.4.2.2 Le vieillissement mécanique . . . 43
1.2 Quelques bases de mathématique pour faire de la simulation temps réel . . . 45
1.2.1 Les critères de qualité . . . 45
1.2.1.1 Un problème bien posé . . . 45
1.2.1.2 Le conditionnement . . . 45
1.2.1.3 La consistance . . . 46
1.2.1.4 La stabilité numérique . . . 46
1.2.1.5 La convergence . . . 46
1.2.1.6 La complexité . . . 46
1.2.2 Les méthodes de résolution d'équation . . . 47
1.2.2.1 La recherche dichotomique . . . 47
1.2.2.2 La méthode de Newton . . . 47
1.2.3 Les méthodes de résolution de systèmes . . . 48
1.2.3.1 La méthode de Gauss-Jordan . . . 48
1.2.3.2 La méthode de Newton-Raphson . . . 48
1.2.4 Une méthode d'optimisation robuste : l'algorithme génétique . . . 49
1.2.5 Les méthodes par éléments finis . . . 49
1.2.5.1 Les équations aux dérivés partielles . . . 49
1.2.5.2 La méthode de la différence finie . . . 50
1.2.5.3 La méthode des volumes finis . . . 50
1.2.6 Sur les systèmes dynamiques . . . 51
1.2.6.1 Les systèmes multi-agents . . . 51
1.2.6.2 La théorie du chaos . . . 51
1.2.6.3 La prédiction dynamique . . . 52
1.2.6.4 La méthode explicite . . . 52
1.2.7 Le calcul multidimensionnel optimisé en vitesse . . . 52
1.2.7.1 L'enrichissement . . . 53
1.2.7.2 La normalisation . . . 53
1.2.7.3 La projection . . . 54
1.2.7.4 L'estimation de la convergence . . . 54
1.2.7.5 Son utilisation . . . 54
1.3 Les possibilités matérielles . . . 54
1.3.1 CPU . . . 54
1.3.1.1 La programmation pour CPU . . . 54
1.3.1.2 La représentation des nombres dans la machine . . . 55
1.3.1.3 Les technologies de processeur . . . 55
1.3.2 GPU . . . 56
1.3.2.1 Structure . . . 56
1.3.2.2 Un type spécial de programmation . . . 56
1.3.3 FPGA . . . 57
1.4 Les problématiques liées à la gestion du projet . . . 57
1.4.1 La modélisation temps réel, un espace pluridisciplinaire d'innovation . . . 57
1.4.1.1 La place de chacun . . . 58
1.4.1.1.1 Le physicien . . . 58
1.4.1.1.2 Le mathématicien . . . 58
1.4.1.1.3 L'informaticien . . . 58
1.4.1.2 L'organisation du travail . . . 58
1.4.1.2.1 L'organisation par la recherche heuristique . . . 59
1.4.1.2.2 La nécessité d'une démarche créative . . . 60
1.4.2 Un développement "infernal" . . . 60
1.4.2.1 Problématique . . . 60
1.4.2.2 Conséquences et solutions . . . 60
1.4.3 Spéculation sur les investissements techniques judicieux . . . 61
1.5 Conclusion partielle . . . 61

2 Conception du modèle **63**
2.1 Le modèle . . . 63
2.1.1 Le type de modèle . . . 63
2.1.2 La structure du modèle . . . 63
2.1.3 L'intégration du modèle . . . 64
2.1.3.1 L'intégration au stack . . . 64
2.1.3.2 L'intégration des modules auxiliaires . . . 65
2.2 Modèle fluidique . . . 65
2.2.1 Vue d'ensemble . . . 65
2.2.2 Canaux . . . 66
2.2.2.1 Répartition de pression . . . 66
2.2.2.2 Calcul de la variation des fractions molaires pour chaque espèce chimique . . . 69
2.2.3 La couche de diffusion (GDL) . . . 71
2.2.4 Assemblage final . . . 73
2.3 Modèle électrique . . . 74
2.3.1 La problématique . . . 74
2.3.2 La méthode classique . . . 75
2.3.3 La méthode de la table interpolée . . . 77
2.3.3.1 Simplification du système . . . 77
2.3.3.2 La table de valeur . . . 77
2.3.3.3 La fonction d'interpolation générale . . . 79
2.3.4 La méthode du polynôme interpolé . . . 82
2.3.4.1 Le principe . . . 82
2.3.4.2 L'application . . . 83
2.3.5 Le calcul des N_{ca} . . . 83
2.4 Modèle de la membrane . . . 84
2.4.1 Le système membrane . . . 84
2.4.2 La diffusion . . . 84
2.4.3 L'éléctro-osmose . . . 85
2.4.4 Les conditions aux limites . . . 85
2.4.5 Le calcul dynamique . . . 86
2.5 Modèle thermique . . . 86
2.5.1 La discrétisation . . . 86
2.5.2 Le circuit de refroidissement . . . 87
2.5.3 La base de la plaque bipolaire . . . 89
2.5.3.1 La convection avec le fluide de refroidissement . . . 89
2.5.3.2 La convection avec les gaz de la réaction (carburant de la pile) . . . 89
2.5.3.3 La conduction vers les supports de canaux . . . 90
2.5.3.4 La conduction dans le plan . . . 90
2.5.3.5 La dynamique . . . 90
2.5.4 Les canaux . . . 90
2.5.4.1 La convection avec les gaz de la réaction . . . 91
2.5.4.2 La conduction avec la base de la plaque bipolaire . . . 91
2.5.4.3 La conduction avec la couche catalytique . . . 91
2.5.4.4 La conduction à l'intérieur de la plaque bipolaire . . . 92
2.5.4.5 La dynamique de la température de la plaque bipolaire . . . 92
2.5.5 La couche catalytique . . . 92
2.5.6 La membrane . . . 93
2.5.6.1 La conduction avec l'anode et la cathode . . . 93
2.5.6.2 La conduction à l'intérieur de la membrane . . . 94
2.5.6.3 Les pertes par effet Joule . . . 94
2.5.6.4 La dynamique de la température de la membrane . . . 94
2.6 La modélisation réduite équivalente . . . 94
2.6.1 La nécessité de réduire la complexité des canaux . . . 94
2.6.2 Les conséquences de cette simplification et leurs importances . . . 96

2.6.2.1 Les conséquences fluidiques . . . 96
2.6.2.1.1 Au niveau des canaux . . . 96
2.6.2.1.2 Au niveau de la couche de diffusion . . . 96
2.6.2.2 Les conséquences thermiques . . . 97
2.6.2.2.1 La réduction de la conductivité transversale . . . 97
2.6.2.2.2 La réduction de la convection latérale . . . 97
2.6.3 Les solutions apportées pour réduire ces conséquences . . . 97
2.6.3.1 Le coefficient empirique K . . . 97
2.6.3.2 Les coefficients de diffusion . . . 98
2.6.3.3 La correction de la convection thermique . . . 98
2.6.3.4 La correction de la capacité thermique . . . 98
2.7 Conclusion partielle . . . 99

3 Développement et implémentation du code temps réel 100
3.1 Les tactiques . . . 100
3.1.1 La transformation d'un programme séquentiel en un programme de cause/conséquence 100
3.1.2 La découverte des variables intermédiaires de calcul . . . 101
3.1.3 La découverte des constantes . . . 102
3.1.4 La gestion des erreurs numériques du CPU . . . 102
3.1.4.1 La pression absolue dans les canaux . . . 103
3.1.4.2 Le coefficient de perte de pression . . . 103
3.2 Le calcul parallèle . . . 103
3.2.1 Le lien entre le programme cause/conséquence et le calcul parallèle . . . 103
3.2.2 Les différents types de parallélisation développés . . . 104
3.2.2.1 La parallélisation par zone spatiale et modules . . . 104
3.2.2.2 La construction de matrice parallélisées . . . 104
3.2.2.3 La parallélisation de l'algorithme de Gauss-Jordan . . . 105
3.2.2.4 La parallélisation de l'application d'une formule avec le GPU . . . 106
3.2.3 La gestion de la communication optimisée pour la parallélisation par modules . . . 106
3.3 Le compilateur . . . 107
3.3.1 Le programme et ses options . . . 107
3.3.2 Les calculs de base . . . 108
3.3.2.1 Le module "FORMULE" . . . 108
3.3.2.2 Le module "TABLE INTERPOLE" . . . 108
3.3.3 Les assemblages . . . 109
3.3.3.1 Le module "APP CHAMPS" . . . 109
3.3.3.2 Le module "COMPOSITION" . . . 109
3.3.4 Les résolutions . . . 110
3.3.4.1 Le module "DICHOTOMIQUE" . . . 110
3.3.4.2 Le module "SYSTEM UNIQUE" . . . 110
3.3.4.3 Le module "SYSTEM INDEPENDANT" . . . 110
3.3.4.4 Le module "SYSTEM NEWTON" . . . 111
3.3.5 Les systèmes multi-agents . . . 114
3.3.5.1 Le module "EXPLICITE" . . . 114
3.3.6 Le calcul parallèle . . . 115
3.3.6.1 Le module "TACHE CADENCE" . . . 115
3.3.6.2 Les modules "SYNCHRO" et "SYNCHRO FIN" . . . 115
3.3.6.3 Le module "ANTI INSTABLE" . . . 116
3.3.7 La gestion du maillage . . . 117
3.3.7.1 Le module "INTEGRALE INTERMAIL" . . . 117
3.3.8 La perspective d'un compilateur vers du FPGA en deux étapes . . . 120
3.4 Conclusion partielle . . . 120

4 Validation du modèle programmé **122**
4.1 Validation physique . . . 122
4.1.1 Recherche des paramètres . . . 122
4.1.1.1 L'estimation initiale . . . 122
4.1.1.2 L'ajustement . . . 129
4.1.1.2.1 Les paramètres du modèle . . . 129
4.1.1.2.2 La complexité de recherche . . . 130
4.1.1.2.3 La stratégie d'ajustement . . . 130
4.1.2 Validation expérimentale . . . 131
4.2 Validation numérique . . . 132
4.2.1 Estimation des erreurs des calculs statiques dans les canaux . . . 132
4.2.1.1 La convergence du calcul des pressions . . . 132
4.2.1.2 La possibilité de se passer du re-calcul des volumes molaires . . . 133
4.2.2 Estimation des erreurs des calculs dans la couche de diffusion . . . 134
4.2.3 Stabilité numérique du système itératif général . . . 134
4.3 Validation temps réel . . . 135
4.3.1 Performance de l'optimisation des calculs statiques dans les canaux . . . 135
4.3.2 Performance de l'optimisation des calculs dans la couche de diffusion . . . 136
4.3.3 Performance des techniques d'optimisation pour le calcul des répartitions de courant . 136
4.3.4 Performance des modules dynamiques explicites . . . 138
4.3.4.1 Les performances en temps de calcul . . . 138
4.3.4.2 La gestion des instabilités . . . 138
4.3.5 Performance des techniques de calculs parallèles . . . 140
4.3.5.1 Bilan sur les types d'optimisations en calcul parallèle expérimentés (RAPPEL) 140
4.3.5.1.1 La parallélisation de l'anode et de la cathode . . . 140
4.3.5.1.2 La génération de matrice par un complexe de zones calculées en parallèles . . 140
4.3.5.1.3 La parallélisation de l'algorithme de l'élimination de Gauss-Jordan . . . 140
4.3.5.2 Résultats de l'étude et analyse . . . 140
4.3.5.2.1 Les résultats mono tache non parallélisée . . . 140
4.3.5.2.2 Les gains des optimisations en calcul parallèle . . . 141
4.4 Conclusion partielle . . . 141

5 Analyse des résultats obtenus par le modèle multidimensionnel **142**
5.1 En régime permanent . . . 142
5.1.1 Courant faible . . . 142
5.1.1.1 Résultats fluidiques . . . 142
5.1.1.2 Résultats thermiques . . . 146
5.1.1.3 Résultats électriques . . . 149
5.1.1.4 Analyse intermédiaire . . . 149
5.1.2 Courant fort . . . 150
5.1.2.1 Résultats fluidiques . . . 150
5.1.2.2 Résultats thermiques . . . 153
5.1.2.3 Résultats électriques . . . 155
5.1.3 Analyse intermédiaire . . . 156
5.2 Évolution des grandeurs . . . 157
5.2.1 Évolution de la fluidique en fonction du courant . . . 157
5.2.2 Évolution de la thermique . . . 159
5.2.3 Évolution de la répartition de courant . . . 162
5.2.4 Bilan . . . 164
5.3 Conclusion partielle . . . 165

Table des figures

1.1 Une pile à combustible (cf [19]) . . . 15
1.2 Un stack de pile à combustible . . . 15
1.3 Une cellule de pile à combustible . . . 15
1.4 Courbe de polarisation d'une cellule de pile à combustible . . . 16
1.5 Illustration général de la chaîne de transformation de l'énergie (Wikipedia, inventaire-forestier.ign.fr) 17
1.6 La chaîne de transformation de l'énergie d'un point de vue économique (Boursorama, Conrad, LeroyMerlin, myshop-solaire) . . . 17
1.7 L'influence de l'économie de marché sur la recherche . . . 18
1.8 La répartition des réserves de pétrole (avenir-sans-petrole.org) . . . 19
1.9 Photographie du drone NASA Helios . . . 20
1.10 Le fonctionnement de la pile à combustible PEM . . . 22
1.11 Le mélange de deux gaz . . . 25
1.12 Diagramme d'état de l'eau . . . 26
1.13 Réaction électrochimique forcée . . . 29
1.14 Représentation schématique des types de dommages dans une demie cellule de pile à combustible 32
1.15 La corrosion sur l'électrode au microscope optique [80] . . . 33
1.16 Graphie de joint en silicone corrodé [45] . . . 34
1.17 Spectrographie sur les polluants générés par la corrosion progressive d'un joint en silicone [45] 34
1.18 Couche catalytique endommagée au microscope électronique . . . 35
1.19 Voltamograme appliqué sur une cellule à différents stades de corrosion [58] . . . 35
1.20 Évolution de la courbe de polarisation d'une cellule lors de la corrosion du carbone [58] . . . 35
1.21 Photographie au microscope électronique d'une membrane polluée par des particules de platine [71] . . . 36
1.22 Cluster de platine au microscope électronique [71] . . . 37
1.23 Photographie réalisée au microscope électronique de délamination et fissuration dans une cellule [71] . . . 38
1.24 Photographie réalisée au microscope des débris de couche de diffusion sur la membrane et la couche catalytique[71] . . . 38
1.25 Photographie réalisée au microscope électronique d'une couche de diffusion en fibres compressée [63] . . . 39
1.26 Photographie des conséquences des "pinholes" sur une membrane [53] . . . 39
1.27 Figure illustrant les vitesses relatives des différents mécanismes endommageant la pile à combustible [69] . . . 40
1.28 La production d'acide dans la pile à combustible . . . 41
1.29 Le déplacement des espèces chimiques due à la corrosion puis la pollution [47] . . . 42
1.30 L'influence de la pollution d'ions métalliques sur la résilience (solidité) de la membrane [39] . 42
1.31 La dégradation du pouvoir catalytique de la couche catalytique en fonction de cycles de potentiels appliqués [15] . . . 43
1.32 Répartition de contraintes mécaniques dans la cellule calculée dans [5] . . . 44
1.33 Répartition de températures dans des cellules saines (à gauche) et endommagées (à droite) [56] 44
1.34 Un cas avec un mauvais conditionnement (à gauche) et un autre avec un bon (à droite) . . . 46
1.35 Comparaison du temps de calcul en fonction du nombre de variables pour deux algorithmes . 47
1.36 Parcours d'une fonction par l'algorithme de recherche de Newton pour trouver sa racine . . . 48
1.37 Système chaotique (à gauche) et système non chaotique (à droite) . . . 52

1.38 Nombre exprimé en virgule fixe . . . 55
1.39 Nombre exprimé en virgule flottante . . . 55
1.40 Représentation des nombres à virgule flottante sur des bytes . . . 55
1.41 Structure d'un GPU . . . 56
1.42 programme de calcul sur GPU . . . 56
1.43 Algorithme d'organisation de la phase de conception . . . 59

2.1 Structure générale du modèle . . . 64
2.2 Répartition de la température des cellules le long d'un stack [27] . . . 64
2.3 Schéma des modules internes aux modèles fluidiques d'une cellule de pile à combustible . . . 65
2.4 Résultat de simulation utilisant l'équation de Navier-Stokes de l'écoulement d'un fluide circulant dans un tube . . . 66
2.5 Schéma présentant l'écoulement des gaz dans un canal de cellule . . . 67
2.6 Convention de nomenclature des bords de maille . . . 69
2.7 Exemple de maillage pour les canaux . . . 69
2.8 Problématique du calcul explicite des concentrations . . . 70
2.9 Progression du calcul explicite des concentrations par le système multi-agents . . . 71
2.10 Circuit électrique analogue pour calculer localement la diffusion des gaz dans la couche de diffusion . . . 72
2.11 Schéma de la la structure itérative finale du module fluidique . . . 74
2.12 Algorithme de calcul par la méthode classique . . . 76
2.13 La répartition des valeurs de K_1 . . . 78
2.14 La répartition des valeurs de K_2 . . . 78
2.15 L'algorithme de la recherche dichotomique . . . 78
2.16 I en fonction de K_1 et K_2 pour $J_C = 0$ (en A) . . . 79
2.17 Rapprochement des isovaleurs en couples pour calculer θ . . . 80
2.18 $\theta(K_2)$ extrait d'une matrice de valeurs trop petite . . . 80
2.19 $\theta(K_2)$ extrait pour plusieurs courants de fuites J_C . . . 80
2.20 Corrélation $\theta(K_2)$ avec son interpolation . . . 81
2.21 Corrélation $I(-5, K_2)$ avec son interpolation . . . 81
2.22 Répartition de l'erreur relative de l'interpolation pour $J_C = 12mA$ . . . 82
2.23 Une maille de membrane avec ses 6 frontières projetées . . . 84
2.24 L'algorithme de calcul dynamique de la membrane . . . 86
2.25 La séparation et le maillage de la cellule de pile à combustible pour le modèle thermique . . . 87
2.26 Carte des débit relatifs du fluide de refroidissement . . . 88
2.27 Schéma du refroidissement de la base de la plaque bipolaire . . . 88
2.28 Schéma des flux thermiques de la base de la plaque bipolaire . . . 89
2.29 Schéma des flux thermiques de la couche des canaux de la plaque bipolaire . . . 91
2.30 Schéma des flux thermique de la membrane . . . 93
2.31 Exemple de structure de canaux d'une pile à combustible . . . 94
2.32 Configuration de canaux série réelle . . . 95
2.33 Configuration de canaux série simplifiée . . . 95
2.34 Configuration pour les canaux en parallèle réelle . . . 95
2.35 Configuration de canaux parallèle simplifiée . . . 95
2.36 Configuration de canaux série parallèle réelle . . . 96
2.37 Configuration de canaux série parallèle simplifiée . . . 96
2.38 Schéma équivalent pour la configuration de canaux série réelle . . . 97
2.39 Schéma équivalent pour la configuration de canaux série simplifiée . . . 97
2.40 Schéma équivalent pour la configuration de canaux parallèle réelle . . . 98
2.41 Schéma équivalent pour la configuration de canaux parallèle simplifiée . . . 98
2.42 Zone de configuration pour les canaux réels . . . 98
2.43 Zone de configuration de canaux simplifiés ($B = 2$) . . . 98

3.1 Algorithme de recette de mousse au chocolat . . . 100

3.2 Algorithme de recette de mousse au chocolat revu avec des liaisons de dépendances entre les étapes . . . 100
3.3 Arbre de calcul de la formule : $Y = (A + B \times C) / (D - E)$ . . . 101
3.4 Arbre de calcul de la formule : $Z = (D - E) + A / (B \times C)$ . . . 101
3.5 Arbre de calcul des grandeurs Y et Z par les formules $Y = (A + B \times C) / (D - E)$ et $Z = (D - E) + A / (B \times C)$ . . . 102
3.6 Le fonctionnement en synchronisation du calcul statique fluidique . . . 104
3.7 Le remplissage d'une matrice par un système de calcul parallèle multi-taches . . . 105
3.8 L'algorithme de Gauss Jordan en pivot partiel . . . 105
3.9 Les échanges d'informations entre les modules agents . . . 106
3.10 Algorithme de la fonction préprogrammée TABLE_ INTERPOLE . . . 108
3.11 Algorithme de la fonction préprogrammée APP_ CHAMPS . . . 109
3.12 Grille de référencement des positions des variables du système . . . 111
3.13 Grille de référencement des types de systèmes à appliquer . . . 111
3.14 Codage en hexadécimal des configurations possibles pour une maille . . . 112
3.15 Algorithme de la fonction préprogrammé SYSTEM_ NEWTONE . . . 113
3.16 Algorithme de la fonction préprogrammé EXPLICITE . . . 114
3.17 Algorithme de la fonction préprogrammée TACHE_ CADENCE pour les modules déclarés en tache cadencée . . . 115
3.18 Procédure de mise à jour des paramètres d'un modèle dynamique en parallèle (UML diagramme de séquence) . . . 116
3.19 Algorithme de correction d'instabilités par troncature . . . 117
3.20 Algorithme de correction d'instabilités par recherche de pic . . . 118
3.21 Algorithme de correction d'instabilités par recherche d'occilation . . . 118
3.22 Algorithme de correction d'instabilités par recherche d'évolution exponentiel . . . 119
3.23 Algorithme de la fonction préprogrammée INTEGRALE_ INTERMAIL . . . 119

4.1 Le paramètre config pour la cathode . . . 122
4.2 Le paramètre config pour l'anode . . . 122
4.3 Le paramètre dx pour la cathode . . . 123
4.4 Le paramètre dy pour la cathode . . . 123
4.5 Le paramètre dx pour l'anode . . . 126
4.6 Le paramètre dy pour l'anode . . . 126
4.7 Le paramètre configGDL pour la cathode . . . 127
4.8 Le paramètre configGDL pour l'anode . . . 127
4.9 Le paramètre configM pour la membrane . . . 127
4.10 Le paramètre configI pour le module éléctrochimique . . . 127
4.11 Le paramètre configfan pour le circuit de refroidissement du module thermique . . . 127
4.12 Tableau du paramètre configT pour le module thermique . . . 127
4.13 Le paramètre fluxrefx . . . 127
4.14 Le paramètre fluxrefy . . . 127
4.15 Le paramètre *Age* pour la cathode . . . 128
4.16 Le paramètre *Age* pour l'anode . . . 128
4.17 la répartition *Age* pour la membrane et la couche catalytique (ratio de 0 à 1) . . . 129
4.18 Algorithme de recherche des paramètres du modèle . . . 131
4.19 Résultat de l'ajustement du modèle sur les valeurs expérimentales . . . 132
4.20 Étude de convergence des pressions partielles . . . 133
4.21 Étude de convergences des flux de sortie de la cathode . . . 133
4.22 Erreur générée par l'hypothèse de volume molaire constant pour le calcul des pressions dans les canaux en fonction de la longueur des canaux . . . 133
4.23 Erreur générée par l'hypothèse de volume molaire constant pour le calcul des pressions dans les canaux en fonction du nombre de mailles et de la différence de pression entrée sortie . . . 133
4.24 La répartition de l'erreur dans les canaux liée à l'hypothèse du volume molaire constant . . . 134
4.25 Une répartition type de densités molaires d'oxygène au niveau de la couche catalytique après une itération . . . 135

4.26 Répartition transversale de la pression dans la couche de diffusion calculée avec un système statique 3D de 5 couches de mailles . . . 135
4.27 Mémoire nécessaire pour faire tourner le module fluidique statique au nivaux des canaux en fonction du nombre de mailles . . . 136
4.28 Le temps de calcul d'une itération du module fluidique statique au nivaux des canaux en fonction du nombre de mailles . . . 136
4.29 Répartition de température du fluide de refroidissement en régime stable . . . 138
4.30 Répartition de température du fluide de refroidissement en régime "scintillant" . . . 138
4.31 Répartition de la résistance de la membrane avec des pic d'erreurs locales . . . 139
4.32 Répartition de température de la base de la plaque bipolaire en cas d'erreur grave . . . 139
4.33 Résultat intermédiaire d'ajustement du modèle (en état instable) à partir de données expérimentales . . . 139
4.34 Remplissage multi-taches d'une matrice . . . 140

5.1 Répartition de la pression dans la cathode pour un courant de 5A en régime permanent . . . 143
5.2 Répartition de la pression dans l'anode pour un courant de 5A en régime permanent . . . 143
5.3 Répartition de la densité molaire de O_2 dans les canaux coté cathode pour un courant de 5A en régime permanent . . . 143
5.4 Répartition de la densité molaire de O_2 dans la couche catalytique coté cathode pour un courant de 5A en régime permanent . . . 143
5.5 Répartition de la densité molaire de H_2O dans les canaux coté cathode pour un courant de 5A en régime permanent . . . 144
5.6 Répartition de la densité molaire de H_2O dans la couche catalytique coté cathode pour un courant de 5A en régime permanent . . . 144
5.7 Répartition de la densité molaire de H_2 dans les canaux coté anode pour un courant de 5A en régime permanent . . . 144
5.8 Répartition de la densité molaire de H_2 dans la couche catalytique coté anode pour un courant de 5A en régime permanent . . . 144
5.9 Répartition de la densité molaire de H_2O dans les canaux coté anode pour un courant de 5A en régime permanent . . . 145
5.10 Répartition de la densité molaire de H_2O dans la couche catalytique coté anode pour un courant de 5A en régime permanent . . . 145
5.11 Répartition de la température dans le circuit de refroidissement pour un courant de 5A en régime permanent . . . 146
5.12 Répartition de la température dans la base de la plaque bipolaire coté cathode pour un courant de 5A en régime permanent . . . 146
5.13 Répartition de la température dans les canaux coté cathode pour un courant de 5A en régime permanent . . . 146
5.14 Répartition de la température dans la couche catalytique coté cathode pour un courant de 5A en régime permanent . . . 146
5.15 Répartition de la température dans la membrane pour un courant de 5A en régime permanent 147
5.16 Répartition de la température dans la couche catalytique coté anode pour un courant de 5A en régime permanent . . . 147
5.17 Répartition de la température dans les canaux coté anode pour un courant de 5A en régime permanent . . . 148
5.18 Répartition de la température dans la base de la plaque bipolaire coté anode pour un courant de 5A en régime permanent . . . 148
5.19 Répartition de la résistance de la membrane pour un courant de 5A en régime permanent . . . 149
5.20 Répartition du courant dans la couche catalytique pour un courant de 5A en régime permanent 149
5.21 Répartition de la pression dans la cathode pour un courant de 40A en régime permanent . . . 150
5.22 Répartition de la pression dans l'anode pour un courant de 40A en régime permanent . . . 150
5.23 Répartition de la densité molaire de O_2 dans les canaux coté cathode pour un courant de 40A en régime permanent . . . 150
5.24 Répartition de la densité molaire de O_2 dans la couche catalytique coté cathode pour un courant de 40A en régime permanent . . . 150

5.25 Répartition de la densité molaire de H_2O dans les canaux coté cathode pour un courant de 40A en régime permanent . . . 151
5.26 Répartition de la densité molaire de H_2O dans la couche catalytique coté cathode pour un courant de 40A en régime permanent . . . 151
5.27 Répartition de la densité molaire de H_2 dans les canaux coté anode pour un courant de 40A en régime permanent . . . 151
5.28 Répartition de la densité molaire de H_2 dans la couche catalytique coté anode pour un courant de 40A en régime permanent . . . 151
5.29 Répartition de la densité molaire de H_2O dans les canaux coté anode pour un courant de 40A en régime permanent . . . 152
5.30 Répartition de la densité molaire de H_2O dans la couche catalytique coté anode pour un courant de 40A en régime permanent . . . 152
5.31 Répartition de la température dans les circuits de refroidissement pour un courant de 40A en régime permanent . . . 153
5.32 Répartition de la température dans la base de la plaque bipolaire coté cathode pour un courant de 40A en régime permanent . . . 153
5.33 Répartition de la température dans les canaux coté cathode pour un courant de 40A en régime permanent . . . 153
5.34 Répartition de la température dans la couche catalytique coté cathode pour un courant de 40A en régime permanent . . . 153
5.35 Répartition de la température dans la membrane pour un courant de 40A en régime permanent 154
5.36 Répartition de la température dans la couche catalytique coté anode pour un courant de 40A en régime permanent . . . 154
5.37 Répartition de la température dans les canaux coté anode pour un courant de 40A en régime permanent . . . 154
5.38 Répartition de la température dans la base de la plaque bipolaire coté anode pour un courant de 40A en régime permanent . . . 154
5.39 Répartition de la résistance de la membrane pour un courant de 40 A dans un régime permanent 155
5.40 Répartition du courant dans la couche catalytique pour un courant de 40A en régime permanent 155
5.41 Évolution de la répartition de pression dans les canaux coté cathode en fonction du courant (du plus bas (5A) au plus haut (40A)) . . . 157
5.42 Évolution de la répartition de pression dans les canaux coté anode en fonction du courant (du plus bas (5A) au plus haut (40A)) . . . 157
5.43 Évolution de la répartition de densité molaire de O_2 dans la couche catalytique en fonction du courant (du plus bas (5A) au plus haut (40A)) . . . 158
5.44 Évolution de la répartition de densité molaire de H_2O dans la couche catalytique coté cathode en fonction du courant (du plus bas (5A) au plus haut (40A)) . . . 158
5.45 Évolution de la répartition de densité molaire de H_2 dans la couche catalytique en fonction du courant (du plus bas (5A) au plus haut (40A)) . . . 158
5.46 Évolution de la répartition de densité molaire de H_2O dans la couche catalytique coté anode en fonction du courant (du plus bas (5A) au plus haut (40A)) . . . 159
5.47 Évolution de la répartition de température dans le circuit de refroidissement en fonction du courant (du plus bas (5A) au plus haut (40A)) . . . 159
5.48 Évolution de la répartition de température dans les canaux coté cathode en fonction du courant (du plus bas (5A) au plus haut (40A)) . . . 160
5.49 Évolution de la répartition de température dans les canaux coté anode en fonction du courant (du plus bas (5A) au plus haut (40A)) . . . 160
5.50 Évolution de la répartition de température dans la couche catalytique coté cathode en fonction du courant (du plus bas (5A) au plus haut (40A)) . . . 160
5.51 Évolution de la répartition de température dans la couche catalytique coté anode en fonction du courant (du plus bas (5A) au plus haut (40A)) . . . 161
5.52 Évolution de la répartition de température dans la membrane en fonction du courant (du plus bas (5A) au plus haut (40A)) . . . 161
5.53 Évolution de la répartition de température dans la couche catalytique coté cathode pendant le régime transitoire qui suit un échelon de courant (du moment de l'échelon au régime permanent) 161

5.54 Évolution de la répartition de température dans la couche catalytique coté anode pendant le régime transitoire qui suit un échelon de courant (du moment de l'échelon au régime permanent) 162
5.55 Évolution de la répartition de température dans la membrane pendant le régime transitoire qui suit un échelon de courant (du moment de l'échelon au régime permanent) 162
5.56 Évolution de la répartition de la résistance de la membrane en fonction du courant (du plus bas(5A) au plus haut(40A)) 163
5.57 Évolution de la répartition de courant dans la couche catalytique en fonction du courant (du plus bas(5A) au plus haut(40A)) 163
5.58 Évolution de la répartition de la résistance de la membrane pendant le régime transitoire qui suit un échelon de courant (du moment de l'échelon au régime permanent) 163
5.59 Évolution de la répartition de courant dans la couche catalytique pendant le régime transitoire qui suit un échelon de courant (du moment de l'échelon au régime permanent) 164

Liste des tableaux

1.1 Les couches (layer) d'une cellule de pile à combustible PEM 15
1.2 Bilan des positions des phénomènes à modéliser dans la pile à combustible 24
1.3 Valeur des paramètres T_{crit} et P_{crit} pour le calcul du coefficient de diffusion 25
1.4 Résultats de l'étude sur les résistances de contact entre l'électrode et la couche de diffusion avant et après corrosion pour différents alliages et pour différents pressions d'assemblage [76] . 33

2.1 Estimation des caractéristiques thermiques de chaque organe de la cellule 87
2.2 Comparaison des caractéristiques de chaque organes 87

4.1 Les paramètres fluidiques coté Cathode 123
4.2 Les paramètres fluidiques coté anode 124
4.3 Les paramètres pour la membrane 124
4.4 Les paramètres thermiques 125
4.5 Les paramètres électrochimiques 126
4.6 Mémoire vive utilisée en fonction du nombre de mailles 135
4.7 Temps de calcul en fonction du nombre de mailles (avec un processeur de 1.4 GHz) 135
4.8 Les temps de calcul avec la méthode classique 136
4.9 Les temps de calcul avec l'algorithme optimisé totalement 136
4.10 Avantages et inconvénients des optimisations pour le calcul de la répartition du courant en fonction du matériel et des charges étudiées 137
4.11 Temps de calcul expérimental pour un système mono-tache 140
4.12 Résultat des temps de calcul optimisés par un calcul parallèle 141

5.1 Bilan des observations fluidiques pour les bas courants 145
5.2 Bilan des observations thermiques pour les bas courants 148
5.3 Bilan des observations fluidiques pour les hauts courants 152
5.4 Bilan des observations thermiques pour les hauts courants 155
5.5 Bilan des observations 156
5.6 Bilan des observations sur les évolutions des paramètres 165

INTRODUCTION

La pile à combustible est un système ancien et intéressant qui peine à émerger dans nos mœurs techniques. Intéressant parce que c'est le deuxième système le plus crédible pour le stockage d'énergie (quand il est associé au dihydrogène) après le système le plus utilisé actuellement : celui du carburant et du moteur thermique. En effet, son rendement est plus élevé et la pile à combustible peut fonctionner sans émettre de CO_2 (sauf lorsque le dihydrogène est produit à partir d'hydrocarbures). Alors pourquoi n'est elle pas utilisée ? Parce qu'il existe une problématique de coût qui rend les moteurs thermiques plus attractifs. Cependant, il reste intéressant de développer cette technologie car elle possède des caractéristiques spécifiques qui peuvent la rendre attractive une fois son coût réduit.

La pile à combustible est un système multi physique d'une grande complexité. Les phénomènes fluidiques, thermiques, électriques et électro-chimiques y sont étroitement liés. Cela rend la compréhension de ces systèmes difficile, d'autant plus que le siège de ces phénomènes est très peu accessible pour des mesures. Si on veut améliorer la performance et la durée de vie de la pile à combustible, il est important de comprendre au moins comment elle fonctionne et les différents phénomènes physiques entrants en jeu. Il ne faut pas seulement la comprendre sur le papier, mais, dans la réalité, qu'est-ce qui se passe à l'intérieur ? Les piles à combustible sont beaucoup plus coûteuses que les moteurs thermiques, on ne peut pas faire des centaines de prototypes et faire des essais à la chaîne car les coûts seraient trop importants. C'est pourquoi la simulation est une bonne idée pour étudier la pile.

Si on veut pouvoir simuler ce qui se passe à l'intérieur, il faut faire un modèle en 2D utilisant des mailles et des méthodes de calculs par éléments finis. Ainsi, les temps de calcul peuvent être de quelques secondes à plusieurs heurs. Cela ne pose aucun problème pour une étude statique dans un cadre bien précis, mais si on veut faire une simulation sur une plage de temps importante (30 min par exemple), le temps de calcul devient considérable. Ainsi, simuler une pile à combustible en plusieurs dimensions et sur la durée est aussi une approche onéreuse. Il serait donc avantageux d'avoir un modèle de pile à combustible qui calculerait à une vitesse raisonnable. Un modèle où on aurait échangé un peu de précision contre la possibilité d'émuler le fonctionnement d'une pile à combustible en temps réel et pouvoir observer ce qui se passe comme si on était à l'intérieur. C'est l'objectif de cette thèse.

Pour qu'un tel modèle puisse fonctionner, il faut :

— qu'il comporte toute la physique de la pile à combustible (la fluidique, la thermique, etc) ;

— que le calcul soit rapide.

Il faut donc trouver des solutions pour adapter les phénomènes physiques en formulations et en procédés de calculs rapides. Il existe déjà beaucoup de formules physiques développées pour la pile à combustible et ses phénomènes. Il y a aussi une panoplie de méthodes numériques qui peuvent être utilisées pour le calcul, ainsi que des supports de calcul plus ou moins puissants avec des spécificités exploitables pour gagner en vitesse. Pour mener à bien ce projet, il faut aussi gérer sa complexité et son caractère pluridisciplinaire comme une contrainte technique de développement. Enfin, il faut être en mesure d'estimer au mieux la fiabilité des résultats obtenus.

Dans la première partie, nous parlerons de la pile à combustible, de son fonctionnement, de ses phénomènes physiques ainsi que des techniques, supports, stratégies et sources d'inspirations qui ont permis la réalisation de cette expérience. Ensuite, viendra la conception du modèle détaillé par phénomènes et par zones. Suite à quoi seront présentés les programmes, algorithmes et optimisations réalisés pour que le modèle puisse être développé et fonctionner à la vitesse voulue. Nous finirons par un chapitre sur la validation du modèle et un autre sur des résultats et leurs analyses.

Chapitre 1

État de l'art

1.1 La pile à combustible

1.1.1 Qu'est-ce qu'une pile à combustible ?

1.1.1.1 La pile

Les différentes téchnologies La pile à combustible est un système capable de transformer directement l'énergie chimique d'un carburant en une énergie électrique en s'appuyant sur une réaction électrochimique.

La découverte du principe de pile à combustible date de 1839 par l'Allemand Christian Schönbein. C'est donc un système ancien. Aujourd'hui, il existe plusieurs types de pile à combustible, et notamment :

- AFC – Pile à combustible alcaline ;
- DBFC – Pile à combustible à hydrure de bore direct ;
- **PEMFC – Pile à combustible à membrane échangeuse de protons** ;
- DMFC – Pile à combustible à méthanol direct ;
- DEFC – Pile à combustible à éthanol direct ;
- FAFC – Pile à combustible à acide formique ;
- PAFC – Pile à combustible à acide phosphorique ;
- MCFC – Pile à combustible à carbonate fondu ;
- PCFC – Pile à combustible à céramique protonante ;
- SOFC – Pile à combustible à oxyde solide.

Elles fonctionnent toutes sur la base d'une réaction d'oxydoréduction mais avec des carburants différents, des températures de fonctionnement pouvant aller de 20^oC à plus de 1000^oC, et des électrolytiques pouvant être des polymères ou des matériaux céramiques. Elles ont aussi des rendements plus ou moins importants variant de 20% et 60%.

Structure de la pile La pile à combustible qui fait l'objet de cette thèse est de type membrane échangeuse de protons (PEMFC).

Le système d'une pile à combustible est un dispositif contenant des canaux, une membrane, des couches de diffusions et des catalyseurs. Pour des raisons pratiques qui facilitent son assemblage, ce système est construit comme une succession de couches ou layers que l'on appelle cellule. Cependant, avec le carburant utilisé (couple RedOx H_2/O_2) dans cette technologie, on obtient une tension basse de $0.6 - 1.1V$ par cellule. Ainsi, plusieurs cellules sont mises côte à côte (en série) pour obtenir une tension globale plus élevée. On appelle cet assemblage de cellules un "stack". Le stack qui connecte les cellules en série pour avoir une tension plus importante unira entre autres toutes les entrées et sorties des cellules et permettra leur refroidissement (pour les systèmes de grande puissance) grâce à un éventuel circuit dédié placé entre les cellules. Enfin, des organes auxiliaires viendront se greffer sur le stack pour assurer son approvisionnement. Les figures 1.1, 1.2 et 1.3, illustrent la structure de la pile à combustible.

Dans cette thèse, nous allons modéliser une cellule de pile à combustible car le stack est une somme de plusieurs cellules identiques. Ainsi, en modélisant une cellule on peut obtenir un modèle de tout le stack en faisant l'assemblage de plusieurs modèles identiques ou simplement en calculant $U_{stack} = Nb_{cellules} \times U_{cell}$ où :

- U_{stack} est le potentiel de toute la pile à combustible (entre la borne rouge et la borne bleue) ;

— $Nb_{cellules}$ est le nombre de cellules présentes dans le stack ;
— U_{cell} est le potentiel d'une cellule qui sera calculé par le modèle développé dans cette thèse.

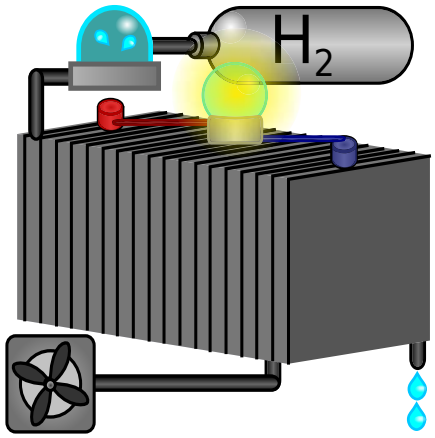


FIGURE 1.1 – Une pile à combustible (cf [19])

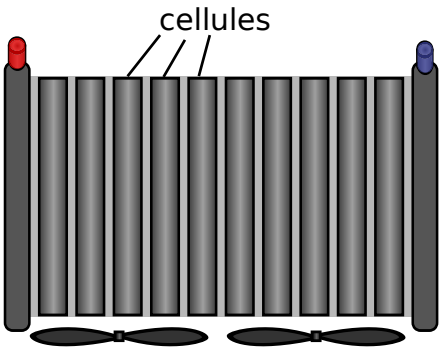


FIGURE 1.2 – Un stack de pile à combustible

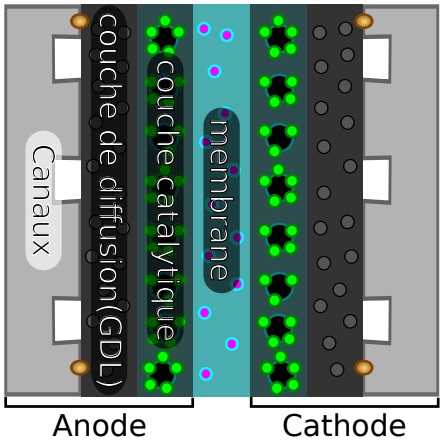


FIGURE 1.3 – Une cellule de pile à combustible

Cellules de pile à combustible Le tableau 1.1 fait le point sur les différentes couches et leurs fonctions dans une cellule.

Couche	Épaisseur	Matériaux	Fonctions
Canaux	$1-2mm$	graphite ou métal	transporter les réactifs évacuer l'eau conduire l'électricité séparer l'hydrogène et l'oxygène des cellules voisines conduire la chaleur vers l'exterieur assurer le support mécanique de la pile
Couche de diffusion	$0.2-0.5mm$	feuille/tissu de carbone poreuse	diffuser les réactifs évacuer l'eau conduire l'électricité conduire la chaleur vers l'exterieur assurer le support mécanique des couches catalytiques et de la membrane
Couche catalytique	$0.05mm$	$C+Pt+Nafion$	diffuser les réactifs catalyser la réaction électrochimique conduire les protons vers l'électrolyte (Membrane) conduire les électrons vers l'électrode
Membrane	$0.01-0.2mm$	polymère + ions CF_2COOH (NAFION)	conduire les protons bloquer le passage des électrons séparer l'hydrogène et l'oxygène de l'anode et de la cathode

TABLE 1.1 – Les couches (layer) d'une cellule de pile à combustible PEM

Le profil électrique de la pile La pile à combustible n'est pas un générateur électrique parfait. La figure 1.4 donne un exemple de la tension que l'on peut attendre d'une cellule en fonction du courant qu'elle fournit. Il y a trois types de pertes qui influencent la tension :

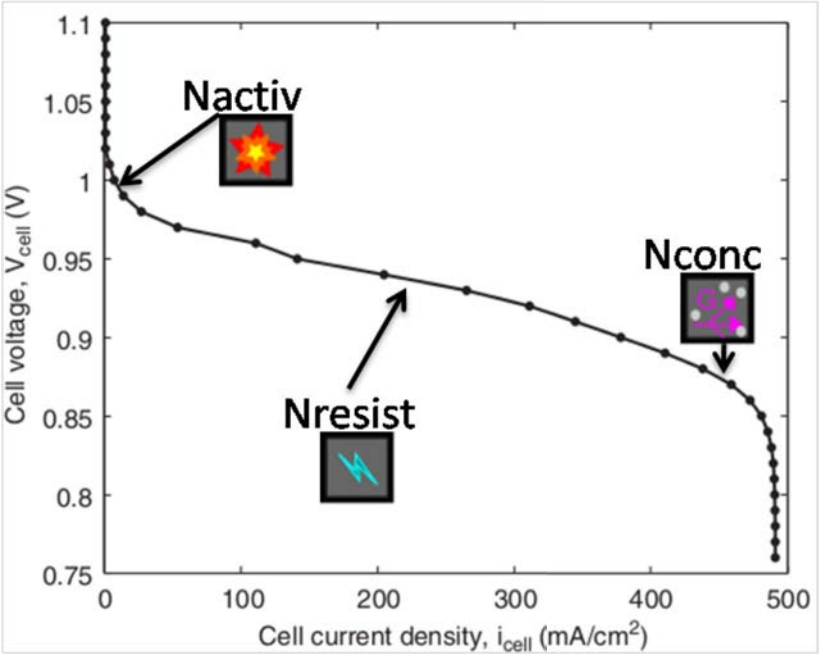


FIGURE 1.4 – Courbe de polarisation d'une cellule de pile à combustible

Nactiv les pertes par activation qui augmentent rapidement dans les faibles courants ;
Nresist les pertes par effet Joules qui augmentent linéairement avec le courant ;
Nconc les pertes par concentration qui commencent à apparaître pour les courants importants et qui sont dues aux limites de diffusions des réactifs.

1.1.1.2 L'intérêt de la pile à combustible

Pourquoi donc développer un tel système ? Les raisons sont multiples :
— la stratégie énergétique ;
— l'environnement ;
— les spécificités techniques de la pile à combustible.

1.1.1.2.1 La stratégie énergétique

Le pétrole vient de la décomposition des animaux et le charbon de la décomposition des arbres. Les animaux tirent leur énergie des végétaux qui tirent leur énergie du soleil. Donc l'énergie vient essentiellement du soleil. Chaque transformation de cette énergie solaire vers une autre forme d'énergie se fait avec un certain rendement. La figure 1.5 fait le bilan de ces transformations énergétiques en partant du soleil et en faisant un cycle de stockage avec un moteur thermique et avec une pile à combustible. Dans un monde sans énergie fossile, l'utilisation de charbon de bois ou la production de pétrole à partir de l'énergie solaire apparaît comme beaucoup moins intéressante qu'un système photovoltaïque couplé avec une pile à combustible. La pile à combustible pourrait être un générateur privilégié dans un monde sans ressource fossile.

Les pourcentages indiqués dans la figure 1.5 sont des rendements de transformation quand ils sont sous les flèches, sinon c'est la part d'énergie restante par rapport l'énergie initiale fournie par le soleil. Les icônes :
—  représente des rejets de gaz à effet de serre dans l'atmosphère ;
—  représente la quantité d'énergie déjà stockée dans la nature.

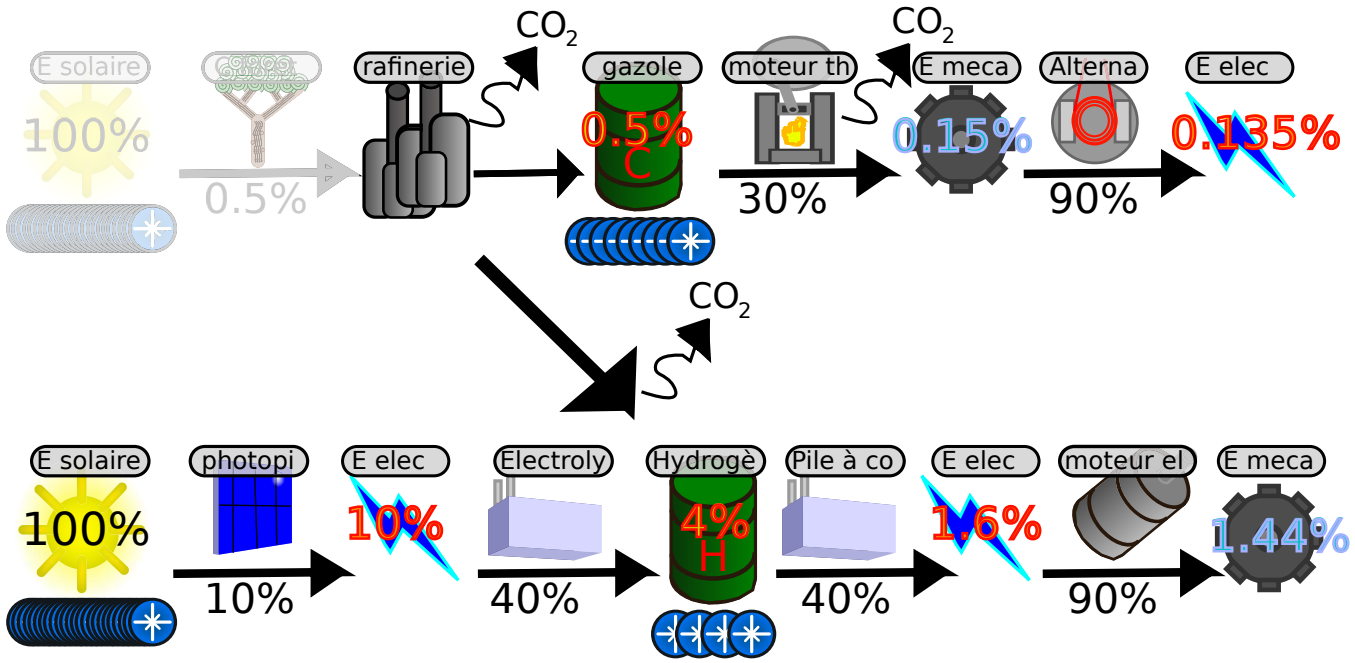


FIGURE 1.5 – Illustration général de la chaîne de transformation de l'énergie (Wikipedia, inventaire-forestier.ign.fr)

La présence de stocks naturels d'énergie fossile permet de court-circuiter la transformation de l'énergie solaire en énergie fossile. Ainsi, le coût actuel de l'énergie fossile est conditionné par des coûts d'extraction et par la loi du marché. Il est donc très inférieur au coût qu'elle aurait si elle était produite par l'Homme en partant de l'énergie solaire. La figure 1.6 donne un aperçu de la situation économique de ces sources d'énergie.

Les icônes représentent les tendances relatives :

— € représente des coûts liés à la production lorsqu'ils sont alignés horizontalement et les coûts cumulés de l'énergie lorsqu'ils sont alignés verticalement ;

— € représente des coûts liés à la lois de l'offre et de la demande ;

— € représente des économies faites dans l'immédiat grâce à l'existence des stocks énergétiques naturels (sous forme fossile).

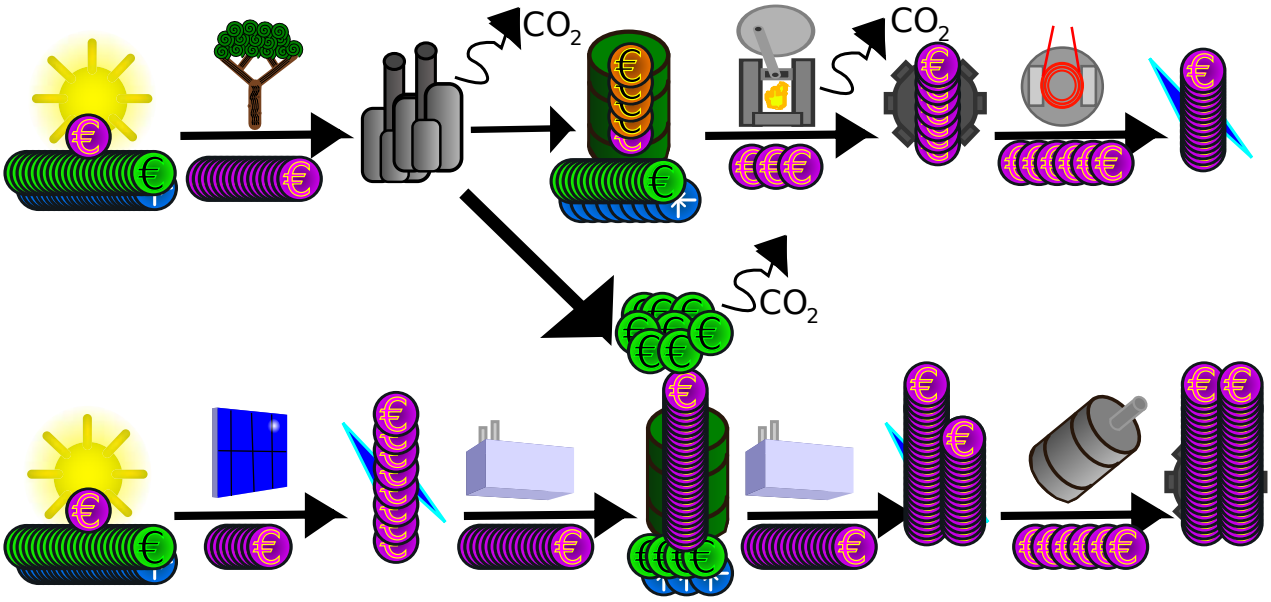


FIGURE 1.6 – La chaîne de transformation de l'énergie d'un point de vue économique (Boursorama, Conrad, LeroyMerlin, myshop-solaire)

Dans l'état actuel des choses, l'usage des énergies fossiles stockées place les coûts de stockage et d'usage de l'énergie par moteur thermique à un nivaux plus bas que l'énergie stockée et utilisée par la pile à combustible en partant du soleil. Par ailleurs, la conversion de cette énergie en énergie électrique par un groupe électrogène classique est peu coûteuse car les générateurs permettant cette conversion sont peu chers puisque produits en grande série. À l'inverse, les piles à combustible sont encore des générateurs peu utilisés et beaucoup plus chers, ce qui augmente le coût de conversion. Pour avoir de l'hydrogène (carburant de la pile à combustible PEM), il existe deux voies représentées dans les figures 1.5 et 1.6 :

— la production par électrolyse qui ne rejette pas de gaz à effet de serre si l'énergie utilisée vient d'une source d'énergie renouvelable. Cette production de carburant est coûteuse.
— l'extraction des énergies fossiles, qui est beaucoup moins coûteuse et peut donc réduire les coûts mais qui émet des gaz à effet de serre.

Ainsi, si la pile à combustible offre un rendement énergétique bien supérieur à celui d'un moteur thermique dans un contexte sans stock d'énergies fossiles, elle est beaucoup moins avantageuse d'un point de vue économique dans le cadre actuel.

Il y a aussi les lois du marché (les coûts supplémentaires € dans la figure 1.6) qui découlent de la loi de l'offre et de la demande et qui augmentent le prix du pétrole. Si ce coût du pétrole dépasse un certain seuil, la production d'hydrogène par électrolyse peut devenir compétitive. La figure 1.7 représente le cours du pétrole jusqu'en 2012. On a ajouté une courbe bleue qui représente l'évolution du nombre de publications sur la pile à combustible que l'on trouve sur "**science direct**".

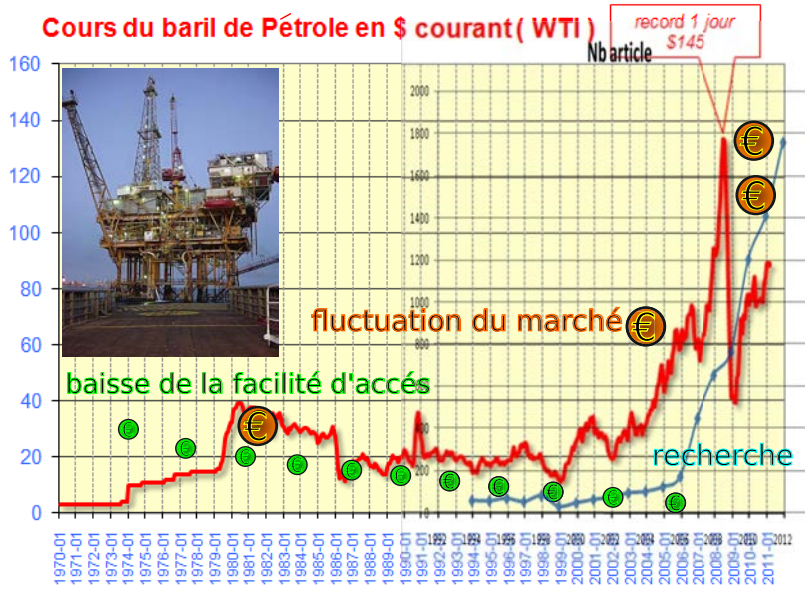


FIGURE 1.7 – L'influence de l'économie de marché sur la recherche

On remarque plusieurs choses, notamment :

— le prix du marché pour le pétrole est très fluctuant ;
— globalement le prix du pétrole augmente, on sait par ailleurs que l'on sera obligé d'aller vers des sites de plus en plus inaccessibles pour en trouver ;
— l'activité de recherche semble suivre la courbe des prix du pétrole.

Il y a donc probablement des facteurs liés au marché qui motive la recherche pour développer la pile à combustible. Par ailleurs, d'un point de vue politique, le pétrole est une ressource inégalement répartie et les pays qui consomment le plus de pétrole ne sont pas ceux qui en possèdent le plus. La figure 1.8 appuie cette problématique.

Notons que tant qu'il n'y aura quasiment que des méthodes de production d'énergie qui s'appuient sur le pétrole, cette ressource sera très critique. Cela peut engendrer des tensions politiques.

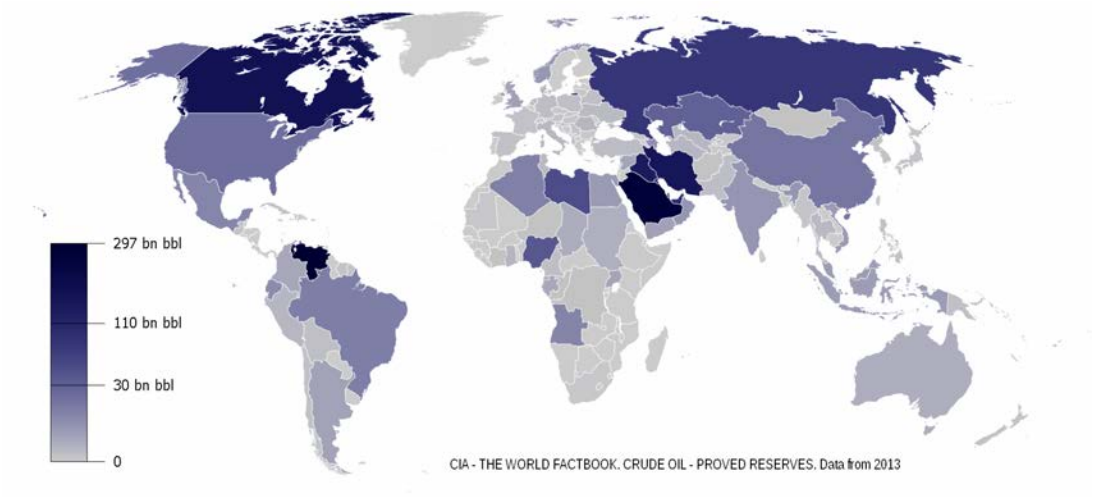


FIGURE 1.8 – La répartition des réserves de pétrole (avenir-sans-petrole.org)

1.1.1.2.2 L'environnement

Les systèmes conventionnels de conversion d'énergie chimique vers électrique s'appuyant sur la combustion d'hydrocarbure rejettent des gaz à effet de serre. Les gaz à effet de serre agissent comme des miroirs à infrarouge qui vont permettre à la terre de conserver plus d'énergie thermique et donc d'avoir une température plus élevée. Pour vous donner une idée, sans l'effet de serre la température moyenne de la terre serait de 33^oC inférieure à la température actuelle (encyclopedie-dd.org). L'effet de serre permet à l'eau d'exister sous forme liquide sur terre et donc rend la vie possible sur cette planète. L'effet de serre est donc un effet clé de la vie. Ainsi, l'augmentation des gaz à effet de serre ne sera pas sans conséquences. L'étude des fossiles nous montre que des changements climatiques importants sont possibles avec de grandes conséquences sur les espèces vivantes animales et végétales. La population humaine étant importante, elle est tributaire d'un système d'agriculture intensive, elle se retrouve fragile face à un changement climatique qui pourrait engendrer des famines et probablement une cascade d'autres problèmes qui en serait la conséquence.

Ainsi les pays du monde se sont réunis pour signer l'accord de Kyôto visant à diminuer l'émission de ces gaz à effet de serre. Or, on sait que les transports représentent 14% des rejets en CO_2 (Le monde). Le développement d'une pile à combustible PEM remplaçant les moteurs thermiques actuels et utilisant de l'hydrogène issu de l'électrolyse avec de l'électricité produite à partir de sources d'énergie non fossiles permettrait d'éviter ces émissions de CO_2 et donc serait un grand pas pour respecter les accords de Kyôto.

1.1.1.2.3 Les spécificités techniques de la pile à combustible PEM

La pile à combustible PEM utilise une membrane en polymère. Elle peut fonctionner avec de l'hydrogène et de l'oxygène comme réactifs. L'hydrogène peut être synthétisé à partir de l'eau avec un électrolyseur et l'oxygène compose 20% de l'atmosphère terrestre. Elle fonctionne à une température basse, aux alentours de 60^oC et elle peut démarrer rapidement. C'est donc un bon candidat pour une application automobile de grande série. Il faudra cependant augmenter sa durée de vie et réduire son coût pour qu'elle soit compétitive.

Mais ce qui est le plus notable, même sans spéculer sur l'évolution de ses performances, c'est l'autonomie qu'elle peut offrir aux systèmes embarqués électriques. En effet, le stockage de l'énergie électrique est difficile et les technologies actuelles sont très loin d'être aussi performantes que le stockage d'énergie chimique. La pile à combustible permet de convertir directement l'énergie chimique en énergie électrique avec un rendement de l'ordre de $40-50\%$. On peut ainsi doter notre système d'un réservoir d'hydrogène et d'une pile à combustible plutôt qu'une batterie ou qu'un système électrogène complet utilisant un moteur thermique. Pour se faire une idée, dans $1kg$ de dihydrogène on a $120,5MJ$ soit $50MJ$ d'énergie récupérable par une pile à combustible soit l'équivalent d'une batterie de $24V$ avec $578A\cdot h$. Une batterie Lithium de $1kg$ de $24V$ aura $5A\cdot h$ soit cent fois moins d'énergie. Si maintenant on prend un système moteur thermique on aura dans $1kg$ d'essence $47,3MJ$ soit $15MJ$ d'énergie récupérable, soit 3 fois moins qu'avec une pile à combustible. Cependant, le stockage de l'hydrogène pose des problèmes car il requière une pression importante pouvant aller jusqu'à $700bar$ et donc un dispositif capable de supporter ces pressions. Ainsi, ce n'est qu'à partir d'une taille critique importante

du réservoir que la pile à combustible peut offrir une plus grande autonomie à masse équivalente. Mais le volume du réservoir reste 3 à 4 fois plus important.

Par ailleurs, la pile à combustible est une technologie propre et silencieuse car elle ne contient que très peu voir pas de pièces mobiles. Une autre de ses caractéristiques notables c'est que son carburant peut être régénéré à partir de son produit d'échappement. Il est facile de produire du dihydrogène en électrolysant de l'eau, l'eau étant le produit de la réaction électrochimique dans la pile à combustible. Il est donc possible d'avoir un système embarqué capable de régénérer son carburant sans apport de matière en utilisant une pile à combustible. Un exemple emblématique de l'usage de ces caractéristiques techniques spécifiques, c'est le drone développé par la NASA qui vole sans jamais se poser présenté dans la figure 1.9.



FIGURE 1.9 – Photographie du drone NASA Helios

1.1.2 Pourquoi faire un modèle temps réel en plusieurs dimensions ?

1.1.2.1 Pourquoi faire un modèle ?

Le coût de production d'une pile à combustible expérimentale est élevé. Beaucoup de choses peuvent être faites en s'appuyant sur un modèle avant de produire un prototype. Par ailleurs, il faut au moins un modèle de base pour pouvoir faire des simulations en plaçant la pile dans un circuit électrique. L'article [87] donne un exemple de système expérimental mis en place avec une pile à combustible. On remarque que c'est une chose assez complexe et qu'il vaut mieux développer des modèles et des émulateurs pour que des spécialistes d'autres disciplines puissent faire des simulations ou des essais incluant un émulateur de pile à combustible.

1.1.2.2 Schéma équivalent électrique

Ainsi, des modèles simples de pile à combustible ont été développés au début sous forme de circuits électriques équivalents. Dans l'article [62], on voit comment la spectrométrie d'impédance est utilisée pour concevoir un circuit équivalent possédant les mêmes propriétés qu'une pile à combustible.

1.1.2.3 Modèle multi-physique

La pile à combustible ne peut pas être résumée en un système électrique pur. En effet, le potentiel qu'elle délivre dépend beaucoup de la température et d'autres facteurs extérieurs au seul comportement électrique de la pile. Il faut prendre en compte ces phénomènes pour vraiment savoir ce qui va se passer ou comment on pourrait améliorer la pile. Ainsi, des modèles plus élaborés ont été conçus sur des plates-formes comme Matlab ou Simulink comme dans les articles [75], [43], [41] incluant aussi un convertisseur statique et [74] qui reprend un schéma électrique équivalent et fait varier les paramètres de ses composants avec des formules physiques prenant en compte la température. Ces modèles peuvent être intégrés facilement dans d'autres modèles de systèmes qui utilisent la pile à combustible. Ils sont aussi capables de tourner en temps réel.

Les modèles multi-physiques pour la pile à combustible sont devenus de plus en plus élaborés avec des modèles plus lourds et beaucoup plus proches de la physique comme dans les articles [17] et [48]. Dans ces

modèles, l'intégration du modèle de la pile dans un autre modèle devient plus compliquée car les programmes prennent de l'autonomie et de l'ampleur. Ils peuvent toujours s'exécuter en temps réel, mais ils sont d'avantage utilisés pour la compréhension de la pile et son optimisation que pour faire des simulations l'incluant.

1.1.2.4 Modèle multi-dimensionnel

Il existe différentes formes de canaux, de configurations de pile à combustible. Le comportement de la pile à combustible va différer en fonction de ces configurations. Afin de pouvoir estimer l'influence de la géométrie de la pile sur son fonctionnement, il faut développer des modèles en 2D ou en 3D. Ainsi, cela permet de réfléchir sur les phénomènes liés à sa géométrie et proposer des améliorations. C'est pourquoi, des modèles 2D et 3D ont été développés.

La plupart des modèles réalisés sont conçus pour des études spécifiques comme la dynamique de l'eau dans la pile. Ces études portent sur des petites parties de cellules de pile à combustible. Des logiciels de calcul par éléments finis sont utilisés pour réaliser ces études. On peut trouver des exemples de ces études dans les articles [1], [64], [65], [55] et [82] où le maillage est très fin et dans [38]. Ces études sont nombreuses je ne peux en citer que quelques-unes. Les résultats qu'elles donnent sont hypothétiques car la validation de tels résultats est très compliquée et coûteuse (voir article [37]), elle est donc rarement effectuée. Par ailleurs, les maillages sont très fins, ce qui ne se justifie pas vu le caractère hypothétique des résultats. En effet, il n'est pas raisonnable de penser qu'il est possible de connaître la répartition d'une pression de gaz au dixième de millimètre près dans un circuit de canaux. Ces modèles donnent parfois une estimation du potentiel de la pile assez précis. Une fois encore cela implique des hypothèses fortes de redondance parfois à l'intérieur même d'une cellule de pile. Par ailleurs, ces modèles sont très coûteux en calcul et ne peuvent donc pas tourner en temps réel. Ainsi, ils ne peuvent être utilisés que pour réfléchir sur certains phénomènes.

Il y a aussi des modèles utilisant des logiciels de calculs par éléments finis où on a choisi de modéliser toute une cellule de pile à combustible comme dans les articles [40], [77]. Ces modèles sont une fois encore bien trop gourmands en calculs pour tourner en temps réel. Ils sont donc utilisés pour chercher des solutions d'optimisations ou comparer différentes configurations de piles à combustible.

Notons qu'il y a aussi des modèles multi physiques, multidimensionnels atypiques où le système est d'avantage autonome et où on peut aussi se focaliser sur des phénomènes très spécifiques comme dans les articles [50], [54] et [21].

1.1.2.5 Modèle temps réel

Une voie importante du développement de la technologie pile à combustible, ce sont ses systèmes auxiliaires et la gestion de la charge appliquée à la pile. En effet, de nombreux systèmes et stratégies de commande sont développés pour utiliser une pile à combustible de manière à augmenter sa durée de vie. Un modèle temps réel, multidimensionnel est un outil moins coûteux qu'une pile à combustible réelle pour les essais destructif de vieillissement. En effet, il est possible de réaliser un émulateur pour faire des simulations ou des tests. Cet émulateur peut entre autres permettre l'affichage de toutes les grandeurs physiques inaccessibles dans la réalité en les estimant par le calcul. Ainsi, il existe un besoin de ce type de modèle. D'où la place du modèle de cette thèse plus proche des besoins du développement extérieur à la pile (précision raisonnable, temps de calcul permettant le temps réel) mais en plusieurs dimensions pour continuer à étudier ce qui se passe dans les différentes configurations de pile.

1.1.3 Fonctionnement et modélisation physique

1.1.3.1 Le fonctionnement

La pile à combustible PEM reçoit du dihydrogène H_2 et du dioxygène O_2 et fournit de l'eau H_2O, de l'énergie électrique et de la chaleur. Le fonctionnement (cf [11]) est présenté dans la figure 1.10. Les étapes du fonctionnement sont les suivantes :

1. le dihydrogène et le dioxygène entrent de chaque coté. Le dihydrogène est détendu dans une tuyère (cf [9]).
2. les réactifs se répandent sur la surface de l'électrode de la cellule en parcourant les canaux en régime laminaire (cf [34] et [10]).
3. les réactifs se diffusent depuis les canaux aux travers de la couche de diffusion pour atteindre la couche catalytique.
4. aux niveaux des couches catalytiques se produisent deux demies réactions électro-chimiques :
   — à l'anode : $H_2 \rightarrow 2H^+ + 2e^-$
   — à la cathode : $O_2 + 4e^- + 4H^+ \rightarrow 2H_2O$
5. du coté de l'anode, les protons H^+ passent dans la membrane et migrent vers la cathode.
6. lorsque les H^+ atteignent la cathode, ils réagissent avec les O^{2-} pour former de l'eau H_2O.
7. l'eau produite se diffuse aux travers de la couche de diffusion pour atteindre les canaux par lesquels elle sera évacuée.

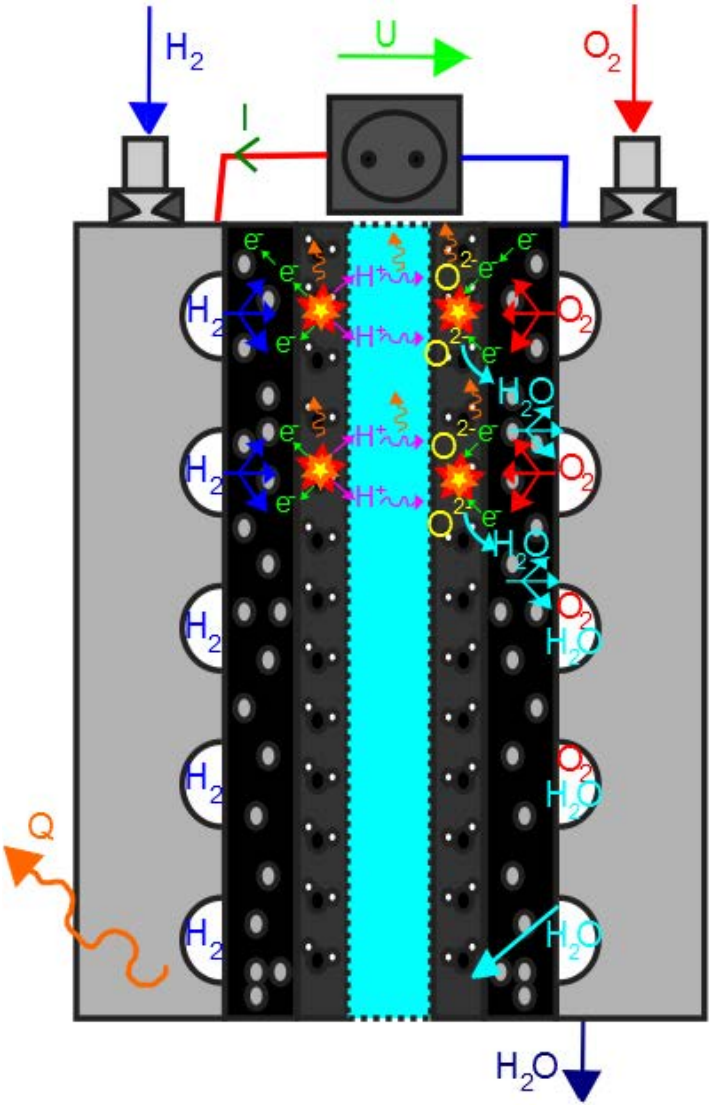


FIGURE 1.10 – Le fonctionnement de la pile à combustible PEM

1.1.3.2 La modélisation

Tous les modèles en 2D/3D de pile à combustible s'appuient sur des formules d'analyse vectorielle. Les phénomènes entrants en jeu sont fluidiques, électro-chimiques et thermiques. Ce type de phénomènes sont tous conservatifs, on a donc pour chaque phénomène une équation de la forme de l'équation 1.1.

$$\frac{\partial X}{\partial t} + div\left(f(X)\right) = 0 \tag{1.1}$$

Où :

— X est la grandeur physique que l'on veut déterminer ;
— $f(X)$ est une équation physique qui détermine un flux en fonction de X.

Quand on consulte dans les journaux scientifiques, on se rend compte que les équations utilisées dans les modèles de pile à combustible en 2D/3D pour calculer les températures, les pressions, et parfois les potentiels peuvent être revues sous le formalisme de l'équation 1.1 en lui ajoutant des termes. Il y a beaucoup de phénomènes entrants en jeu dans le fonctionnement de la pile à combustible et ils ont été modélisés un par un avant d'être introduits dans des versions remodelées de l'équation 1.1. En fonction des couches et des modèles où s'appliquent les calculs, on n'a pas les même phénomènes à modéliser. On a donc plusieurs équations modulées avec plusieurs phénomènes et qui sont différentes d'un modèle à l'autre. Tout cela est très complexe, si par exemple on regarde une formule de conservation des espèces chimiques classique (tirée de l'article [4]) : $-\left(D_l^\alpha \nabla \rho_l^\alpha + D_g^\alpha \nabla \rho_g^\alpha\right) - \sum_k (D_k^\alpha \nabla (\frac{\rho_k \rho_k^\alpha}{\rho} - \frac{\rho_k \rho^\alpha}{\rho}) + \nabla.(\sum_k \frac{\rho_k^\alpha}{\rho_k} j_k) = 0$, on comprend que telles que les choses sont présentées à l'état final dans les articles, il est très difficile de comprendre et de manipuler ces formules. En effet, elles se sont construites sur une série d'ajouts de modules et d'adaptations successives à de nouvelles hypothèses. Un travail d'analyse et de synthèse est donc nécessaire dans cet état de l'art. On va décomposer ce qui a été fait pour en tirer un support fonctionnel exploitable.

Commençons d'abord par séparer les domaines physiques et leur attribuer des équations de bases sur lesquelles viendront se greffer les phénomènes :

— les équations de Navier-Stockes pour le domaine fluidique (équation 1.2 et 1.3) plus des équations de conservation des espèces chimiques (équation 1.4) ;
— l'équation de Fourier pour la conduction pour le domaine thermique (équation 1.5) ;
— l'équation d'Ohm pour le domaine électro chimique (équation 1.6) et une conservation de la charge (équation 1.7).

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla}.(\rho \vec{V}) = 0 \tag{1.2}$$

$$\frac{\partial \left(\rho \vec{V}\right)}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \left(\rho \vec{V} \otimes \vec{V}\right) = -\vec{\nabla} P + \vec{F_v} \tag{1.3}$$

Où :

— ρ est la masse volumique des fluides (gaz) modélisés ;
— $\vec{V}$ est la vitesse du fluide ;
— P est sa pression ;
— $\vec{F_v}$ sont des forces volumiques qui s'applique sur le fluide

$$\frac{\partial \rho^\alpha}{\partial t} + \vec{\nabla}.(\vec{F_l^\alpha}) + F_s^\alpha = 0 \tag{1.4}$$

Où :

— $\vec{F_l^\alpha}$ est le flux molaire surfacique de l'espèce α ;
— F_s^α est une source molaire volumique de l'espèce α ;
— ρ^α est la concentration molaire de l'espèce α.

$$\rho C_{th} \frac{\partial T}{\partial t} = \vec{\nabla}.(\lambda \vec{\nabla} T + \vec{F_T}) + S_T \tag{1.5}$$

Où :

— T est la température ;
— C_{th} est la capacité thermique massique ;
— λ est la conductivité thermique massique ;
— $\vec{F_T}$ est un flux de chaleur surfacique ;
— S_T est une source volumique de chaleur.

$$\vec{j} = \kappa \left(\vec{\nabla}\phi + \vec{U} \right) \tag{1.6}$$

$$\vec{\nabla}.\vec{j} = 0 \tag{1.7}$$

Où :
— $\vec{j}$ est la densité de courant ;
— ϕ est le champs de potentiel ;
— $\vec{U}$ est un champs de tension.

Les grandeurs $\vec{F_v}$, $\vec{F_l^{\alpha}}$, $\vec{F_T}$, S_T et $\vec{U}$ sont en fait des fonctions. Ces fonctions vont recevoir une somme de termes. Chacun de ces termes est une formule qui modélise un phénomène. Dans la suite de cette section, on représentera l'ajout d'un terme à une de ces fonctions comme ci après : $\vec{F_v} \leftarrow X \times Y + Z$.

1.1.3.3 La localisation des phénomènes

En projetant les phénomènes sur le fonctionnement de la pile, il est possible de les localiser. Le tableau 1.2 donne le résultat de cette projection. Ajoutons à cela que les phénomènes électriques comme le potentiel thermodynamique et les pertes par activations ne s'appliquent que sur la couche catalytique.

Couche	Fluidique espèce 1.2	Fluidique mouvement 1.3	Thermique 1.5
Canaux	La diffusion	La gravité	L'effet Joule La convection La condensation
Couche de diffusion	La diffusion La capillarité	La gravité Les frottements en matériaux poreux	L'effet Joule La convection La condensation
Couche catalytique	La diffusion La capillarité	Les frottements en matériaux poreux	L'effet Joule La convection La condensation Les pertes par entropie
Membrane	La back diffusion L'électro-osmose		L'effet Joule

TABLE 1.2 – Bilan des positions des phénomènes à modéliser dans la pile à combustible

1.1.3.4 Les phénomènes fluidiques

1.1.3.4.1 La diffusion

Si on prend deux gaz différents : du dioxygène (O_2) et du diazote (N_2) par exemple. On les met l'un a coté de l'autre, ils vont se mélanger spontanément. Cela vient de la deuxième loi de la thermodynamique qui dit que l'entropie augmente spontanément. En effet, l'entropie étant une valeur qui quantifie le désordre, la nature à tendance à aller de l'ordre vers le désordre. Chaque mouvement des molécules va contribuer à mélanger un peu plus les deux gaz, jusqu'à ce que le mélange soit totalement uniforme. La figure 1.11 illustre ce phénomène.

Il est possible d'analyser ce phénomène en estimant que le gaz de gauche migre vers la droite lors du mélange et vice versa. On appelle ce déplacement la diffusion et un modèle permet de calculer ce déplacement sous forme de débit volumique, c'est le modèle de Fick : équation 1.8 (cf [84]).

$$N_{O_2} = D_{O_2,N_2} \vec{\nabla} \rho_{O_2} \tag{1.8}$$

Où :
— N_{O_2} est le débit molaire surfacique d'oxygène allant de gauche à droite ;

— D_{O_2,N_2} est le coefficient de diffusion du dioxygène dans le diazote ;
— ρ_{O_2} est la densité molaire du dioxygène.

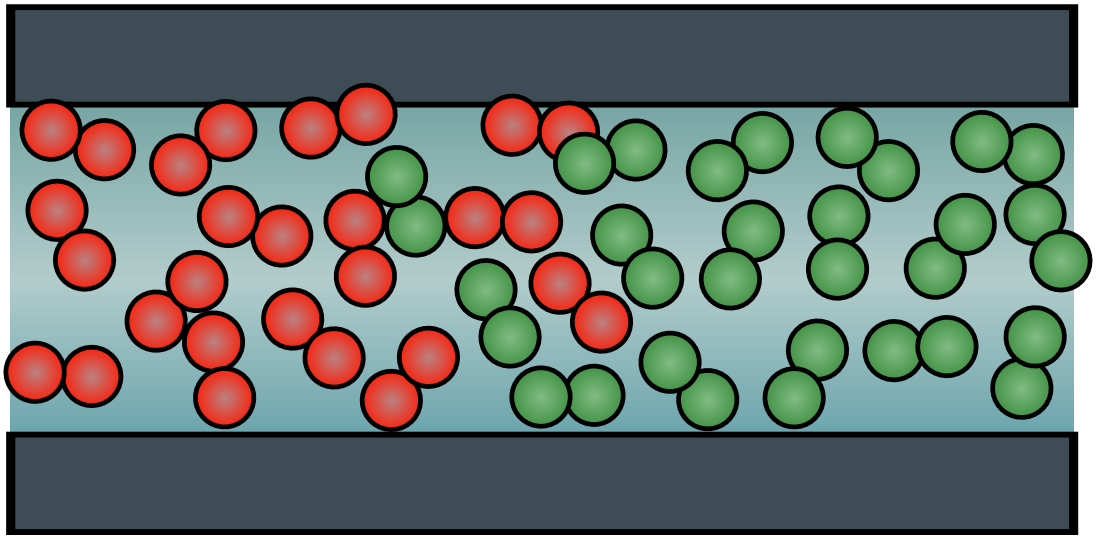


FIGURE 1.11 – Le mélange de deux gaz

Pour calculer le coefficient de diffusion D_{O_2,N_2}, on peut utiliser la formule de Stattery-Bird : l'équation 1.9 (cf [6]).

$$D_{i,j} = \frac{10.1325}{P_{tot}} a \left(\frac{T}{\sqrt{T_{crit,i} T_{crit,j}}} \right)^b \left(\frac{P_{crit,i} P_{crit,j}}{101325^2} \right)^{1/3} \times (T_{crit,i} T_{crit,j})^{5/12} \left(\frac{10^{-3}}{M_i} + \frac{10^{-3}}{M_j} \right)^{1/2} \tag{1.9}$$

Où :
— $i = O_2$ et $j = N_2$;
— M_i est la masse molaire de i ;
— $a = 2.745 \times 10^{-4}$ et $b = 1.823$ si pas de gaz polaire, sinon $a = 3.64 \times 10^{-4}$ et $b = 2,334$;
— les variables T_{crit} et P_{crit} sont choisies en fonction des gaz dans le tableau 1.3.

Gaz	$T_{crit}(^oC)$	$P_{crit}(Pa)$
Hydrogène(H_2)	$33,3$	$12,97.10^5$
Air	$132,4$	$37,49.10^5$
Azote(N_2)	$126,2$	$33,94.10^5$
Oxygène(O_2)	$154,4$	$50,36.10^5$
Vapeur(H_2O)	$647,3$	$220,38.10^5$

TABLE 1.3 – Valeur des paramètres T_{crit} et P_{crit} pour le calcul du coefficient de diffusion

Mais comment calculer le coefficient de diffusion si on a trois gaz ou plus ? Pour ce faire, on utilise la formule de Stefan-Maxwell modifiée 1.10.

$$D_{\alpha,...} = \frac{\sum_{j=1\to n}^{j\neq\alpha} x_j M_j}{\left(\sum_{j=1\to n} x_j M_j\right) \left(\sum_{j=1\to n}^{j\neq\alpha} \frac{x_j}{D_{\alpha,j}}\right)} \tag{1.10}$$

Où :
— x_j est le ratio molaire de j ;
— M_j est la masse molaire de j.

1.1.3.4.2 La gravité

Certains modèles très complets sont biphasiques, cela veut dire qu'ils prennent en compte l'existence d'eau sous forme liquide dans la pile à combustible. L'eau liquide a une densité suffisante pour que l'interaction gravitationnelle influence son mouvement.

L'interaction gravitationnel est une force qui se calcule avec l'équation 1.11.

$$\vec{F} = G\frac{m_1 m_2}{d^2} \tag{1.11}$$

Où :

- F est la force ;
- G est la constante gravitationnelle ;
- m_1 et m_2 sont les masses des deux objets qui s'attirent ;
- d est la distance entre ces deux objets.

Comme le monde a une masse et un rayon très grand devant les distances parcourue à la surface, on peut poser l'équation 1.12.

$$g = G\frac{m_{terre}}{R_{terre}^2} = 9.81 \tag{1.12}$$

Où m_{terre} et R_{terre} sont respectivement les masse et rayon de la terre. On approxime alors la force de gravité par la relation 1.13.

$$F = gm_2 \Longleftrightarrow \vec{F_v} \leftarrow g\rho\vec{y} \tag{1.13}$$

Cependant il y a un autre phénomène : la poussée d'Archimède. Le poids des gaz est donc négligé. Le phénomène de gravité ne sera pris en compte que pour l'eau liquide qui a une masse volumique 1000× supérieure à celle de l'atmosphère.

1.1.3.4.3 La condensation

Ce phénomène entre aussi en compte dans les modèles biphasiques. L'eau peut prendre plusieurs états (solide, liquide, gaz) et ces états dépendent à la fois de la pression et de la température. La figure 1.12 montre la répartition de ces états pour l'eau. Dans la pile à combustible, on a de la vapeur d'eau. Si la

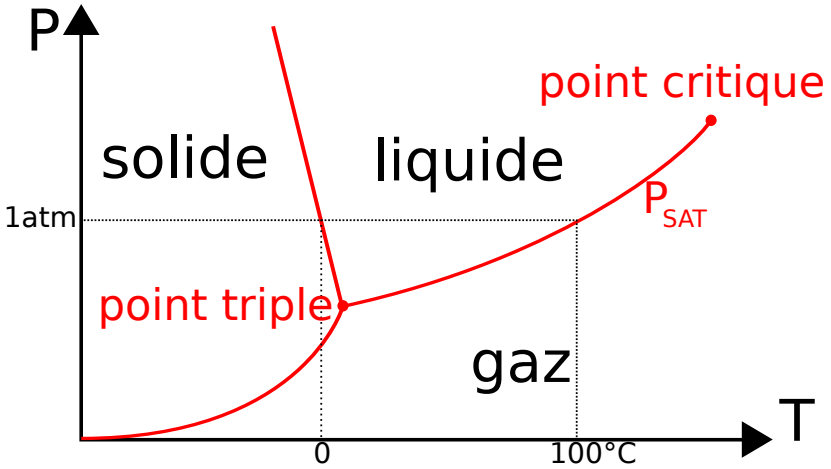


FIGURE 1.12 – Diagramme d'état de l'eau

vapeur se retrouve à une pression supérieure à P_{SAT}, de l'eau liquide se formera. Une formule interpolée permet d'évaluer P_{SAT} en fonction de T, c'est l'équation 1.14.

$$log_{10}P^{SAT} = -2.1794 + 0.02953(T-273.15) - 9.1837\times10^{-5}(T-273.15)^2 + 1.4454\times10^{-7}(T-273.15)^3 \tag{1.14}$$

Il est possible de calculer le débit molaire volumique de vapeur d'eau qui se transforme en eau liquide en utilisant la formule 1.15.

$$F_s^{H_2O,liquide} \longleftarrow \frac{k_c \rho_g}{2RT}\left(1 + \frac{\mid P^v - P^{SAT} \mid}{P^v - P^{SAT}}\right) + \frac{k_e \rho_l}{2}\left(1 - \frac{\mid P^v - P^{SAT} \mid}{P^v - P^{SAT}}\right)(P^v - P^{SAT}) \tag{1.15}$$

Où :

- P^v est la pression partielle de la vapeur d'eau ;
- k_c et k_e sont respectivement des coefficients empiriques de condensation et d'évaporation ;
- ρ_g et ρ_l sont respectivement la masse volumique effective du gaz et du liquide ;
- R : constante des gaz parfait.

Il faut aussi remarquer que le passage de l'eau d'un état gazeux à un état liquide se fait en libérant de l'énergie. Cette énergie sera sous forme thermique, il faut donc ajouter la relation 1.16.

$$S_T \longleftarrow F_s^{H_2O,liquide} \times M_{H_2O} \times L_{evap} \tag{1.16}$$

Où :

- M_{H_2O} est la masse molaire de l'eau ;
- L_{evap} est la chaleur latente massique d'évaporation de l'eau qui doit être choisie en fonction de l'état initial de l'eau.

Enfin, comme ce phénomène se produit dans les deux sens de façon réversible, on ajoute que : $F_s^{H_2O,liquide} = -F_s^{H_2O,gaz}$.

1.1.3.4.4 La capillarité

Ce phénomène ne sera aussi considéré que dans les modèles biphasiques.

Ce phénomène peut se produire entre un liquide et un matériau poreux tel que celui de la couche de diffusion. Il existe une formule permettant de calculer les flux molaires surfaciques dus à la capillarité : l'équation 1.17 (cf [49] et [85]).

$$F_l^{H_2O\vec{},liquide} \longleftarrow \frac{K\lambda_l\lambda_g}{\nu}(\vec{\nabla}P_c + (\rho_l - \rho_g)g) \tag{1.17}$$

Avec :

$$P_c = \sigma\left(\frac{\varepsilon}{K}\right)^{1/2} J(s) \tag{1.18}$$

et

$$J(s) = 1.417(1-s) - 2.120(1-s)^2 + 1.263(1-s)^3 \tag{1.19}$$

Où :

- σ est ce que l'on appelle la tension de surface ;
- $J(s)$ est une fonction empirique appelée Fonction de Leveret (équation 1.19) ;
- λ_l et λ_g sont des coefficients de correction de vitesse relative entre les liquides et les gaz (nous ne développerons pas ici) ;
- ρ_l et ρ_g sont respectivement les masse volumique du liquide et du gaz présents ;
- ν est la viscosité cinématique du fluide ;
- K est la perméabilité du milieu poreux ;
- ε est sa porosité ;
- s est la proportion du liquide sur le gaz.

On constate que le calcul des flux liés à la capillarité est complexe et basé sur beaucoup de gandeurs empiriques.

1.1.3.4.5 Les frottements en matériaux poreux

L'eau et les gaz passent au travers de la couche poreuse de diffusion, mais ils sont ralentis par cette couche. En effet, pendant qu'ils passent au travers de la GDL (la couche de diffusion (Gaz diffusion layer)), ils frottent contre les parois de ses alvéoles et subissent donc une force qui va dans le sens opposé à leur passage. Il est possible d'estimer cette force grâce à l'équation de Darcy : l'équation 2.2.

$$\vec{F_v} \longleftarrow -\varepsilon^2 \frac{\mu}{K}\vec{V} \tag{1.20}$$

Où μ est la viscosité dynamique du fluide qui traverse la couche poreuse, que ce soit un liquide ou un gaz.

1.1.3.4.6 L'électro-osmose (membrane)

Les protons H^+ migrent au travers de la membrane. En migrant au travers de la membrane, ils vont entraîner des molécules d'eau avec eux et les faire migrer de l'anode vers la cathode. C'est un courant qui déplace de la matière, on appelle ce phénomène l'électro-osmose. Il est possible de calculer ce flux avec l'équation 1.21.

$$F_l^{\vec{H_2O}} = n_d \frac{\vec{j}}{F} \tag{1.21}$$

Où n_d est le coefficient d'électro-osmose que l'on peut calculer grâce à une formule empirique donnée dans l'équation 1.22.

$$n_d = \frac{2.5}{22}\lambda_w \tag{1.22}$$

Où λ_w est le contenu en eau de la membrane.

1.1.3.4.7 La back diffusion (membrane)

La back-diffusion est un phénomène de diffusion un peu spécial qui se produit dans la membrane. La membrane n'est pas un milieu comme les autres. Ainsi, on va utiliser une autre grandeur empirique : le contenu en eau λ^{H_2O} (cf [12]) qui correspond à la concentration molaire d'eau dans la membrane. Le contenu en eau λ^{H_2O} est déterminé en fonction de l'activité a avec une formule empirique : l'équation 1.23 (cf [79]).

$$\begin{array}{lll} \text{si } a < 1.0 & : & \lambda^{H_2O} = 0.043 + 17.81a - 39.85a^2 + 36.0a^3 \\ \text{si } a \geq 1.0 \text{and} a < 3.0 & : & \lambda^{H_2O} = 14 + 1.4(a - 1.0) \\ \text{sinon } a \geq 3.0 & : & \lambda^{H_2O} = 16.8 \end{array} \tag{1.23}$$

Où $a = \frac{P^v}{P^{SAT}}$ avec :

- P^v, la pression partiel d'eau ;
- P^{SAT} la pression de saturation de l'eau que l'on peut calculer avec la formule : $P^{SAT} = 10^{-2.1794+0.02953(T-273.15)}$

Le coefficient de diffusion est lui aussi calculé grâce à la formule 1.24.

$$D_{membrane} = 1.3 \times 10^{-10} exp\left(2416\left(\frac{1}{303} - \frac{1}{T}\right)\right) \tag{1.24}$$

On réutilise ici la loi de Fick avec le contenu en eau λ^{H_2O} 1.25.

$$\vec{F_l} \longleftarrow D_{membrane}\vec{\nabla}\lambda^{H_2O} \tag{1.25}$$

1.1.3.5 Les phénomènes thermiques

1.1.3.5.1 La convection thermique

Ce que l'on appelle convection, c'est le déplacement des gaz. Les conséquences fluidiques de ces déplacements sont déjà prises en compte dans l'équation 1.2. Cependant, il y a des conséquences thermiques qui ne sont pas prises en compte dans les équation fluidiques.

D'abord, les gaz emportent leur chaleur avec eux en se déplaçant. Il faut donc considérer la convection comme un flux thermique, d'où la relation 1.26.

$$\vec{F_T} \longleftarrow C_{th}\rho\vec{V} \tag{1.26}$$

Ensuite, lorsqu'un gaz se déplace au contact d'un solide, il va refroidir ou réchauffer ce solide. C'est comme cela que fonctionne les radiateurs. La loi de Newton permet de calculer la quantité de chaleur échangée entre le gaz et le solide (voir l'équation 1.27).

$$\vec{F_T} \longleftarrow h\left(T_{solide} - T_{gaz}\right)\vec{u} \tag{1.27}$$

Où :

- h est le coefficient de convection adapté à la situation ;
- T_{solide} et T_{gaz} sont respectivement les températures de la partie solide et de la partie gazeuse ;
- $\vec{u}$ est un vecteur de norme 1 dont la direction et perpendiculaire à la surface de contact et allant du solide vers le gaz.

1.1.3.5.2 Les pertes thermiques dans la réaction

La réaction qui a lieu dans la pile à combustible est exothermique donc irréversible. Ainsi, il y a augmentation de l'entropie selon le deuxième principe de la thermodynamique, cela engendre des pertes thermiques. Il est possible de calculer ces pertes avec la variation d'entropie comme dans l'équation 1.28 (cf [24]).

$$S_T \longleftarrow \frac{-T\Delta S}{nF} j \tag{1.28}$$

Où ΔS est la variation d'entropie provoquée par la réaction pour une mole de réactif (conformément au nombre d'électrons de réaction).

1.1.3.5.3 L'effet Joule

Quand un courant électrique traverse une résistance, de la chaleur est produite. Il est possible d'intégrer cette chaleur aux fonctions comme dans l'équation 1.29.

$$S_T \longleftarrow \frac{1}{\kappa} j^2 \tag{1.29}$$

La perte de potentiel associée à cette création de chaleur est déjà prise en compte dans l'équation 1.6.

1.1.3.6 Les phénomènes électrochimiques

1.1.3.6.1 Le potentiel thermodynamique

Imaginons que l'on mette une électrode de cuivre et une électrode de zinc dans une solution électrolytique appropriée. Si on met une tension entre l'électrode de cuivre et l'électrode de zinc, l'une des deux électrodes va s'ioniser dans un sens et la seconde dans l'autre comme dans les équations 1.30 et 1.31 et illustré dans la figure 1.13.

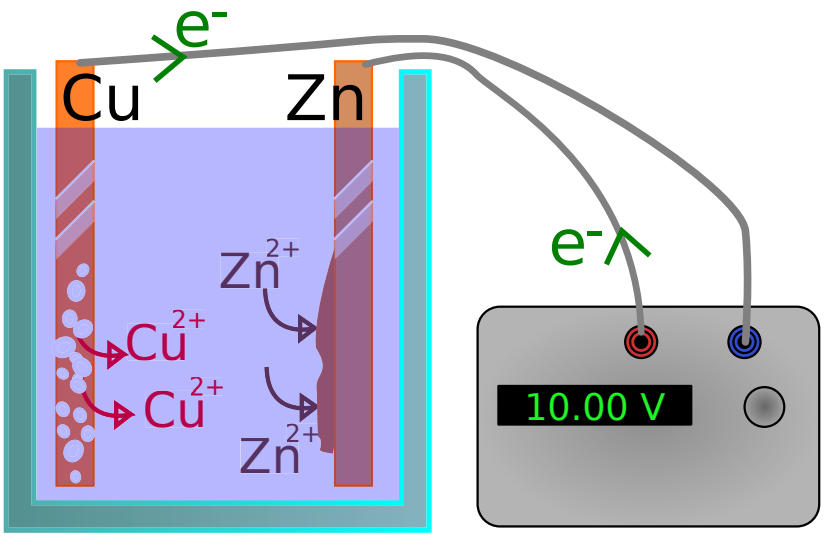


FIGURE 1.13 – Réaction électrochimique forcée

$$Cu = Cu^{2+} + 2e^- \tag{1.30}$$

$$Zn^{2+} + 2e^- = Zn \tag{1.31}$$

L'électrode de zinc va devenir de plus en plus lourde en récupérant les ions Zn^{2+} qui vont venir se fixer dessus en Zn et l'électrode de cuivre va au contraire devenir de plus en plus légère car ses atomes Cu vont se diluer dans la solution électrolytique sous forme de Cu^{2+}. Imaginons maintenant que l'on inverse les polarités, au lieu de mettre $2V$ (le double du potentiel naturel que l'on peut mesurer aux électrode quand il n'y a rien de connecté), on met $-2V$ par exemple. Il se produira alors l'inverse, l'électrode de cuivre deviendra de plus en plus grosse et celle en zinc se diluera.

Si maintenant, on augmentait lentement la tension de $-2V$ à $2V$, le phénomène irait de plus en plus lentement jusqu'à atteindre un équilibre où les masses des électrodes arrêtent de changer, puis il se reproduirait dans l'autre sens à nouveau. La tension à laquelle on atteindrait cet équilibre n'est pas égale à zéro. Cette même tension d'équilibre est fournie par les électrodes lorsque l'on n'applique pas de tension, c'est la propriété sur laquelle s'appuie le fonctionnement des piles alcalines.

Dans la pile à combustible, on peut calculer cette tension naturelle grâce à l'équation de Nernst : l'équation 1.32 (cf [51]).

$$\vec{U} \longleftarrow \left(1.23 - 0.85 \times 10^{-3}(T - 298) + \frac{RT}{4F} ln \frac{[H^+]^4[O_2]}{[H_2O]^2}\right) \vec{u} \tag{1.32}$$

Où :

- F est la constante de Faraday ;
- $[H^+]$, $[O_2]$ et $[H_2O]$ sont respectivement les concentrations molaires en H^+, O_2 et H_2O au nivau de la couche catalytique ;
- $\vec{u}$ est un vecteur placé perpendiculairement à la cellule dans le sens de la tension.

1.1.3.6.2 Le phénomène d'activation

Si l'on reprend notre exemple des deux électrodes, on sait qu'à la tension d'équilibre, les courants allant dans un sens et dans l'autre se compensent. C'est seulement quand une tension est ajoutée dans un sens ou dans l'autre qu'un courant commence à passer d'une électrode à l'autre en faisant grossir une et en réduire une autre. Plus on cherche à obtenir un courant important, plus on s'éloigne du point d'équilibre et un coût énergétique supplémentaire est alors nécessaire.

Dans le cas où l'on n'applique pas de tension sur nos électrodes, mais où on tire un courant grâce à la tension naturelle d'équilibre, cette même tension fournie par les électrodes va diminuer pour compenser ce surplus d'énergie nécessaire à l'augmentation du courant. C'est pourquoi, il y a une perte de tension dans la pile à combustible qui dépend du courant qu'on lui demande. On appelle cette perte, la perte par activation que l'on peut calculer grâce à la relation de Butler-Volmer : l'équation 1.33 (cf [33] et [26]).

$$j = j_0 \times A \left(exp\left(\frac{\alpha n F}{RT} U_{act}\right) - exp\left(\frac{-(1-\alpha) nF}{RT} U_{act}\right)\right) \tag{1.33}$$

Où :

- j est le courant ;
- j_0 est le courant surfacique de référence, c'est un paramètre empirique qui peut être calculé pour la pile avec la formule : $j_0 = K1 \left(\frac{P_{ox}}{101325}\right)^{K2} exp\left(-\frac{Ec}{RT}\left(1 - \frac{T}{298.15}\right)\right)$;
- P_{ox} est la pression partielle d'oxygène dans la couche catalytique ;
- $K1$ et $K2$ sont des coefficients empiriques ;
- Ec est un coefficient énergétique lié au catalyseur, dans le cas du platine ;
- α est un coefficient de symétrie entre l'anode et la cathode ;
- n est le nombre d'électrons entrant en jeu dans la réaction électrochimique ;
- A est la surface de l'électrode.

Cette équation doit être adaptée pour calculer le U_{act} dans une zone infinitésimale avant de l'injecter comme dans l'équation 1.34.

$$\vec{U} \longleftarrow -U_{act}\vec{u} \tag{1.34}$$

Cette équation est difficile à résoudre, c'est pourquoi une formule approximée et plus simple a été développée : la formule de Tafel (équation 1.35 (cf [25])).

$$U_{act} = \frac{RT}{\alpha F} \times ln\left(\frac{j}{I_{0ref} A} \times \frac{P_0}{P_{ox}}\right) \tag{1.35}$$

Où :

- I_{0ref} est une densité de courant d'échange de référence (un coefficient empirique en $A \cdot m^{-2}$) ;
- P_0 est la pression des réactifs de référence.

1.1.3.6.3 La conduction ionique (membrane)

C'est dans la membrane que les pertes par effet Joule sont les plus importantes. La résistance électrique de la membrane dépend en grande partie de son contenu en eau λ^{H_2O}. La conductivité électrique de la membrane peut être déterminée grâce à l'équation empirique 1.36 (cf [66]).

$$\kappa = (0.5139\lambda^{H_2O} - 0.326)exp\left(1268.0\left(\frac{1}{303} - \frac{1}{T}\right)\right) \tag{1.36}$$

1.1.3.6.4 La capacité de double couche

La réaction chimique globale ayant lieu dans la pile à combustible est séparée en deux demies réactions qui ont chacune lieu de part et d'autre de la membrane. Ces demies réactions génèrent des ions, on se retrouve donc avec des gradients de charges au niveau des lieux de ces demies réactions (aux couches catalytiques). En fonction du courant et de la température, ces gradients de charges sont plus ou moins importants et occupe une "surface" plus ou moins épaisse dans la direction transversale d'une cellule de la pile. Ainsi, lorsque le courant varie dans la pile, il y a une phase de changement dans ces gradients ioniques. Ces phases de changement vont donner à la pile un comportement dynamique similaire à celui d'un condensateur. On parle donc de capacité de double couche. L'article [32] propose une étude de ce comportement.

1.1.3.7 La correction de Bruggemann

Si une plaque de métal conduit la chaleur et l'électricité avec ses propres coefficients de conductivités κ et λ, une plaque poreuse du même métal ne conduira pas la chaleur aussi bien. En effet, la chaleur et l'électricité ne peuvent pas être conduites dans les bulles se trouvant dans cette mousse mais uniquement dans la matière autour. Donc il faut calculer des coefficients de conductions équivalents pour les matériaux poreux comme ceux de la GDL, soit les équations 1.37 et 1.38.

$$\kappa^{poreu} = \kappa\varepsilon \tag{1.37}$$

$$\lambda^{poreu} = \lambda\varepsilon \tag{1.38}$$

Où :

— ε est toujours la porosité du matériau poreux exprimée comme le taux de matière sur le volume total ; Pour la diffusion il faut utiliser la correction de Bruggemann, soit l'équation 1.39.

$$D^{poreu}_{\alpha,...} = D_{\alpha,...}\varepsilon^{\xi} \tag{1.39}$$

Où :

— ξ est un coefficient empirique appelé la Tortuosité.

1.1.4 Vieillissement de la pile à combustible

1.1.4.1 Les différents dommages

Les dommages que peuvent subir les piles à combustible au cours de leur vie sont nombreux et divers. La figure 1.14 montre schématiquement tous les types de dommages que l'on peut observer.

Ces dommages peuvent être classés en 4 familles :

— la corrosion,
— la pollution,
— la réorganisation du platine,
— les dommages structuraux.

Les numéros en jaune dans la figure 1.14 serviront de référence dans les sections suivantes pour savoir à quelle partie du schéma on fait allusion.

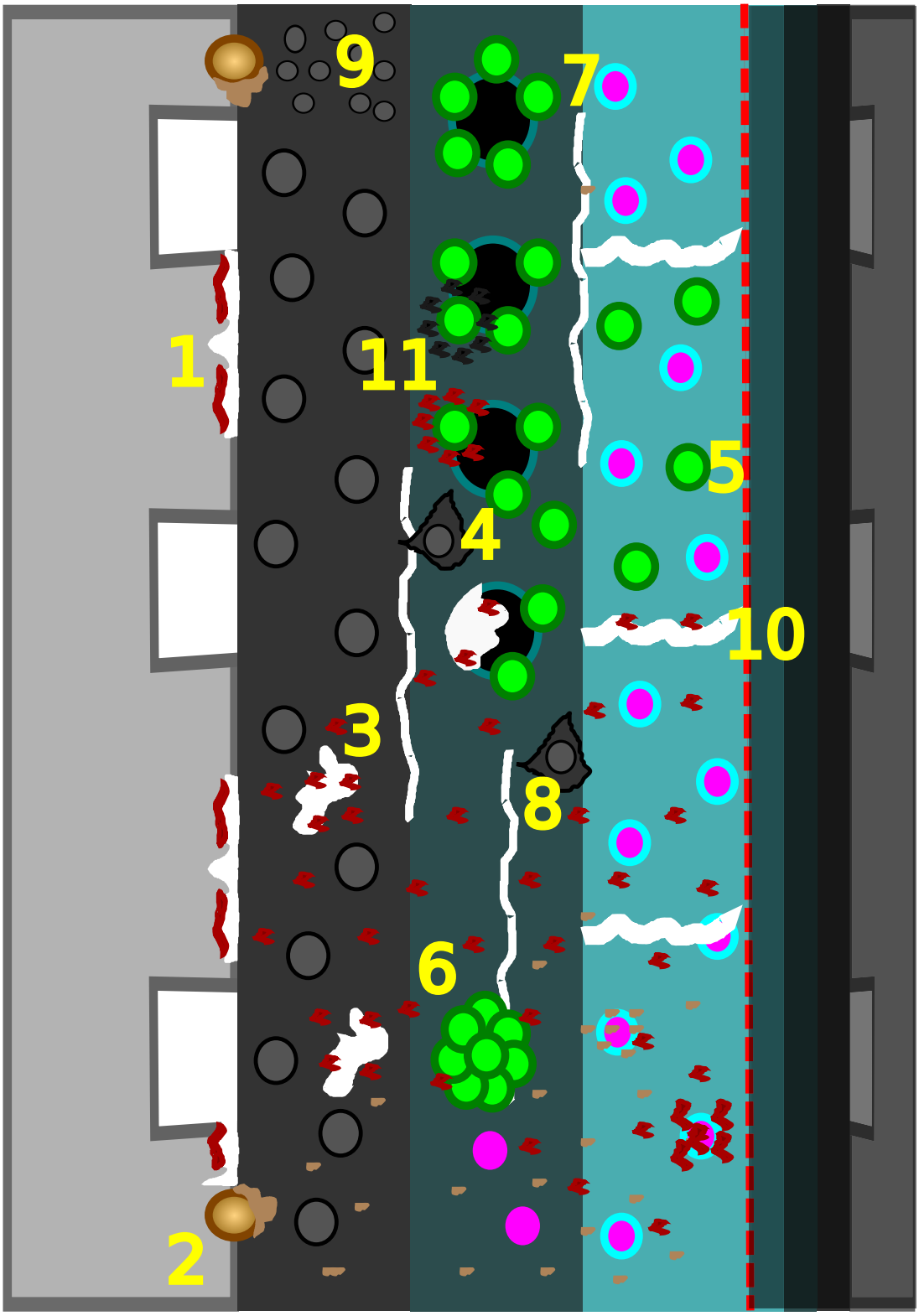


FIGURE 1.14 – Représentation schématique des types de dommages dans une demie cellule de pile à combustible

1.1.4.1.1 La corrosion

La corrosion intervient presque à tous les nivaux.

Au niveau de l'électrode (numéro 1) Au niveau de l'électrode comme on peut le voir dans la figure 1.15. Cette figure montre la corrosion inter-granulaire sur une électrode en métal vue par un microscope optique. Les métaux sont composés de cristaux agglomérés, les endroits les plus faibles chimiquement dans ces matériaux sont au niveau des jonctions entre cristaux, d'où le fait que c'est à ces endroits que la corrosion intervient en premier.

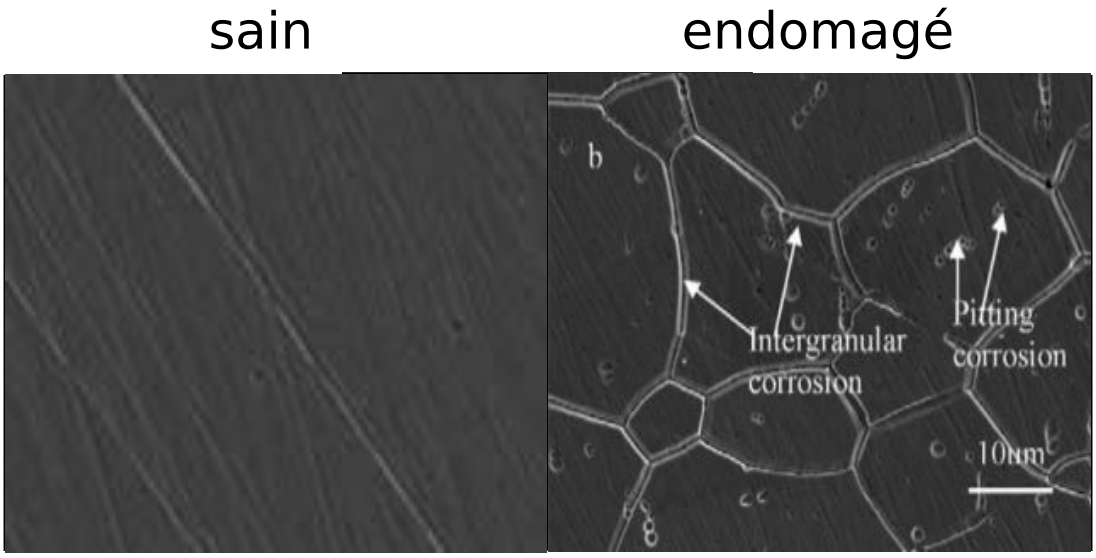


FIGURE 1.15 – La corrosion sur l'électrode au microscope optique [80]

Des essais ont été réalisés dans l'article [76] pour constater l'influence de la corrosion sur la résistance de contact électrique avec la couche de diffusion pour plusieurs matériaux et plusieurs sections de canaux. Les résultats de cette étude sont exposés dans le tableau 1.1.4.1.1.

Matériau	ICR ($m\Omega \cdot cm^2$)	P_{ass} ($N \cdot cm^{-2}$)	corrosion
SS 304	51	220	avant
SS 304	140	140	avant
SS 316	37	220	avant
SS 316	44	220	après
SS 316	200	140	avant
SS 316	320	140	après
SS 316L	160	140	avant
SS 304	2929	140	avant
SS 304	232	140	après
SS 316 L	1244	140	avant
SS 316 L	238	140	après

TABLE 1.4 – Résultats de l'étude sur les résistances de contact entre l'électrode et la couche de diffusion avant et après corrosion pour différents alliages et pour différents pressions d'assemblage [76]

Cette étude montre que la résistance de contact pour un matériau peut être multipliée par 60 comparée à celle d'un autre matériau après la corrosion. Donc c'est un dommage dont les conséquences dépendent beaucoup du type de matériau, mais aussi de la pression d'assemblage et de la forme de section des canaux.

Au nivaux des joints (numéro 2) Les joints sont aussi victimes de la corrosion. Beaucoup d'études ont été faites sur ce thème, et notamment dans [45], [73], [46], [72] et [46]. La figure 1.16 est une photographie de joint corrodé.

C'est un sujet traité car l'état des joints est critique pour éviter des accidents liés à une fuite de carburant. Par ailleurs, leur corrosion a d'autres conséquences. Elle entraîne la production de polluants qui a été étudiée dans [45]. La figure 1.17 montre l'apparition de polluants lors de la corrosion d'un joint. Cette figure est un spectrographe, le fluide dans lequel la corrosion a lieu se voit traversé par une lumière et on mesure les

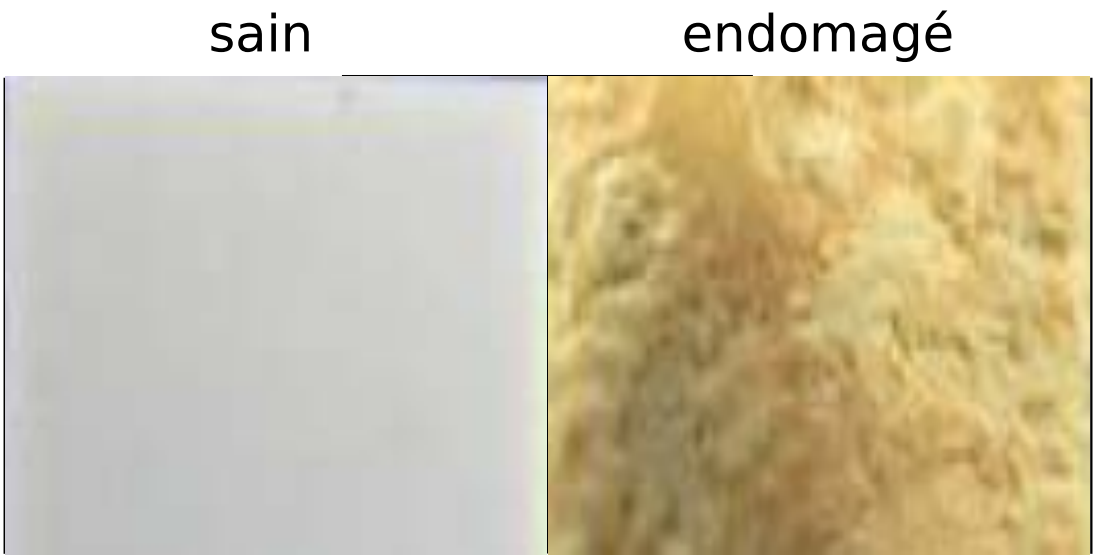


FIGURE 1.16 – Graphie de joint en silicone corrodé [45]

couleurs qui sont les plus absorbées. Les pics des courbes révèlent la présence d'un élément chimique, on voit que ces éléments chimiques sont plus ou moins présents pour différents états d'avancement de la corrosion.

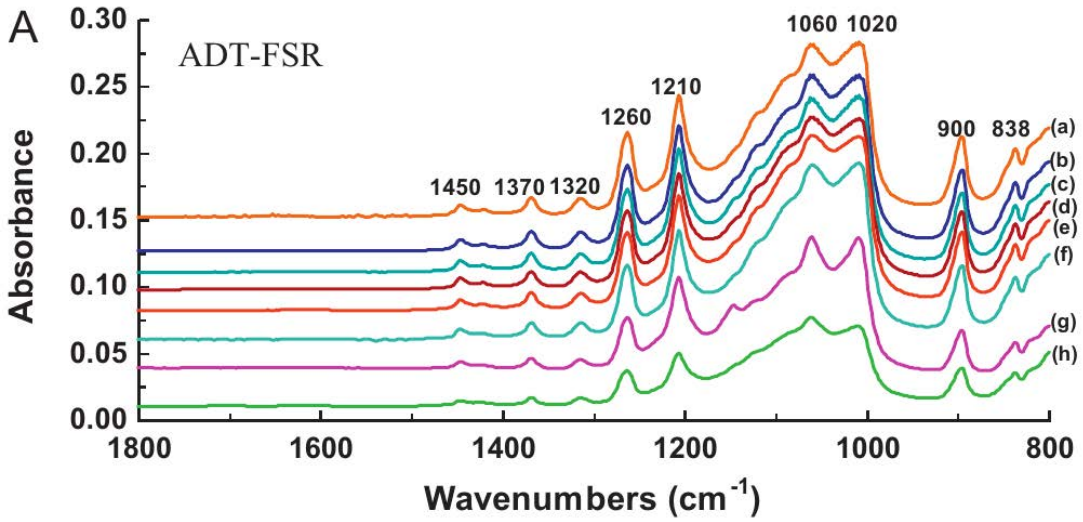


FIGURE 1.17 – Spectrographie sur les polluants générés par la corrosion progressive d'un joint en silicone [45]

La corrosion de la couche de diffusion et de la couche catalytique (numéro 3) Il y a corrosion du carbone présent dans la couche catalytique et dans la couche de diffusion. Cette corrosion a de graves conséquences directes et indirectes sur le fonctionnement de la pile. La figure 1.18 montre une photographie au microscope électronique d'une couche catalytique endommagée par la corrosion du carbone. On constate dans la photographie qu'il y a moins de carbone et qu'une part des particules de platines se sont coagulées car n'étant plus tenues par leur support en carbone.

Ce type de dommage a été étudié dans l'article [58]. Ses conséquences sont une augmentation de la résistance interne de la cellule, donc des pertes par effet Joule. Par ailleurs, le pouvoir catalytique aussi diminue, ce qui a pour effet d'augmenter les pertes par activation. Pour estimer ce type de vieillissement on fait souvent un test qui consiste à appliquer différentes tensions à la cellule tout en mesurant le courant qui la traverse et que l'on nomme "cyclic voltanometry" (voir figure 1.19). On voit que plus le carbone est corrodé et la couche catalytique endommagée, plus la courbe de mesure de la figure 1.19 à tendance à s'aplatir. En effet, le courant dans cette courbe est un indicateur révélant la présence de réactions chimiques dans la cellule pour différents potentiels appliqués. Lorsque le pouvoir catalytique est perdu, ces réactions ne sont

plus catalysées, ainsi elles se produisent plus lentement et donc le courant mesuré tend vers 0.

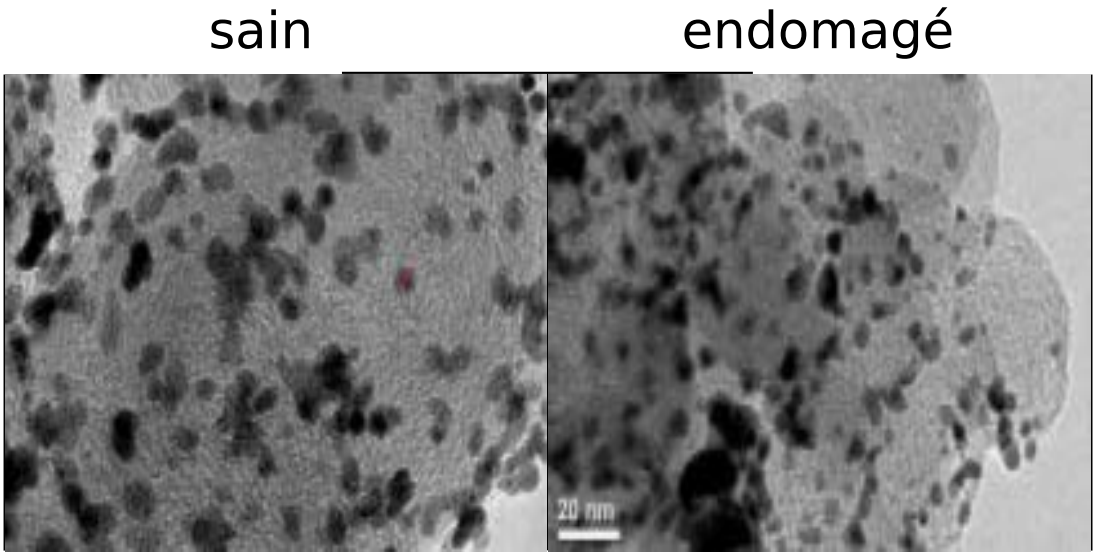


FIGURE 1.18 – Couche catalytique endommagée au microscope électronique

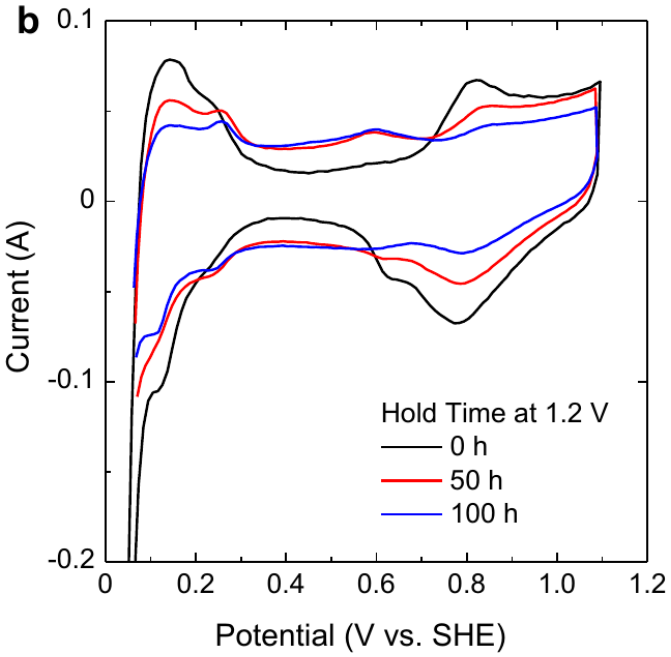


FIGURE 1.19 – Voltamogramme appliqué sur une cellule à différents stades de corrosion [58]

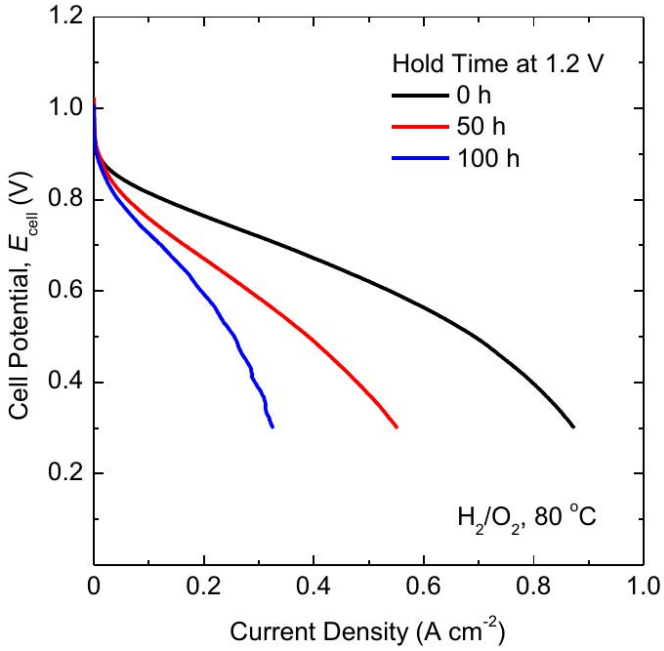


FIGURE 1.20 – Évolution de la courbe de polarisation d'une cellule lors de la corrosion du carbone [58]

Par ailleurs, pour bien mesurer l'impact de cette dégradation, la figure 1.20 montre trois courbes de polarisation de cellule pour différents stades d'endommagement.

Attention, les heures indiquées ici ne correspondent pas à un vieillissement à vitesse normale. La détérioration a été accélérée.

1.1.4.1.2 La pollution

On appelle ici pollution, les déplacements d'éléments chimiques à des endroits où ils vont perturber le fonctionnement de la cellule. Toute la cellule est victime de la pollution, mais c'est la couche catalytique qui est la plus sensible à cette pollution. Viennent ensuite la membrane et la couche de diffusion.

Les problèmes liés à la pollution de la couche catalytique ont été étudiés pour ce qu'on appelle l'empoisonnement (numéro 11). Mais ces études ne traitent que des éléments chimiques venant de l'extérieur comme

le monoxyde de carbone (CO). Comme les autres phénomènes de pollution sont toujours liés à des phénomènes de corrosion, il est difficile d'évaluer les conséquences exactes de ces pollutions. On peut néanmoins s'attendre à ce que :

- La couche de diffusion devienne moins poreuse. La forme et la surface de ses pores changent en étant recouvertes par des polluants. Une étude réalisée dans [57] montre que la géométrie des pores dans la couche de diffusion contribue aux pertes par concentration.
- La surface de la couche de diffusion change de propriété vis à vis de l'eau ; elle peut devenir d'avantage hydrophile. Ce phénomène peut entraîner des dysfonctionnements liés à l'évacuation de l'eau que l'on appelle "flooding". Les articles [18] et [57] s'intéressent à la diminution de l'hydrophobie.
- Des effets d'empoisonnement pour le platine. L'article [14] montre que la présence de polluants dans la couche catalytique affecte de manière importante les performances de la pile à combustible. L'article [60] montre que le CO n'est pas le seul élément à pouvoir se fixer dans la couche catalytique et à la polluer.
- Des effets sur les pores de la membrane réduisant ainsi sa conductivité électrique ce qui augmenterait les pertes par effet Joule.

L'article [18] montre aussi que la conductivité thermique diminue très peu en comparaison à l'hydrophobie.

Les principales formes de pollutions, sont des ions ou tout autres produits de corrosion, mais il y a aussi une pollution des particules de platine qui viennent de la couche catalytique et qui vont migrer dans la membrane. Ce phénomène a été traité dans les articles [71], [29]. La figure 1.21 montre au microscope électronique une membrane victime de cette pollution (numéro 5).

Par ailleurs, d'autre études qui seront abordées plus loin révèlent l'influence de la pollution sur d'autres mécanismes de détérioration.

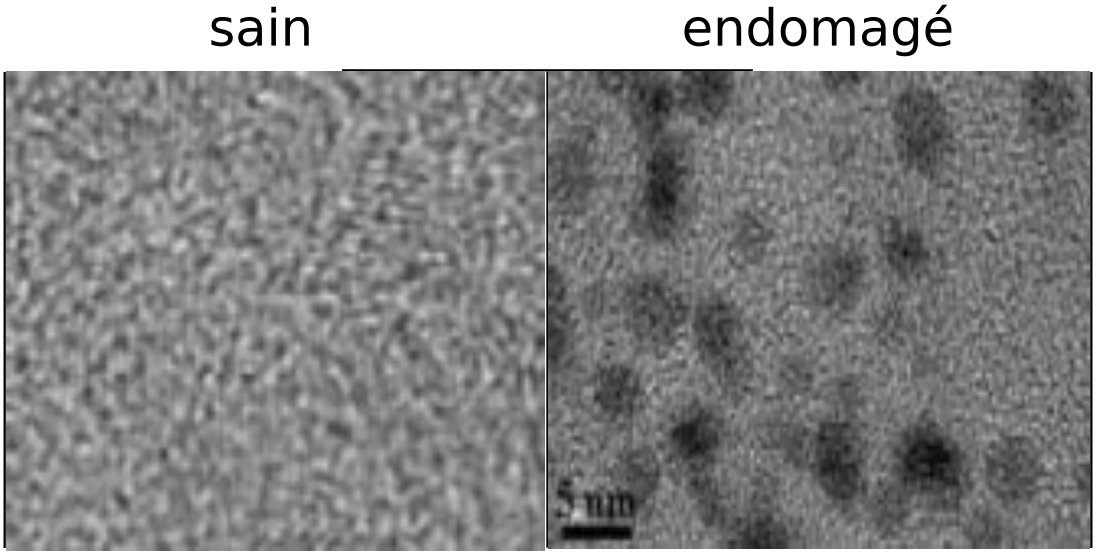


FIGURE 1.21 – Photographie au microscope électronique d'une membrane polluée par des particules de platine [71]

1.1.4.1.3 La réorganisation du platine

Le platine contenu dans la couche catalytique a un comportement suffisamment complexe pour être traité dans une partie spécifique. La manière dont le platine se réorganise au cours du temps le rend moins efficace voir totalement inefficace à catalyser la réaction électrochimique de la cellule. Le platine peut quitter la couche catalytique et devenir un polluant. Il peut aussi simplement se détacher du carbone en restant dans la couche catalytique et ainsi perdre son contact électrique. Enfin, le platine peut se réorganiser en agglomérats de platine que l'on appelle "cluster" (numéro 6). Ces agglomérats possèdent automatiquement une surface extérieure inférieure à celle que l'on avait avant. Par ailleurs, le fait de changer la taille des particules de platine en formant des clusters change les propriétés catalytiques du platine. La figure 1.22 montre un cluster de platine au microscope électronique.

Une étude plus approfondie et plus spécialisée sur cette réorganisation est présentée dans [67].

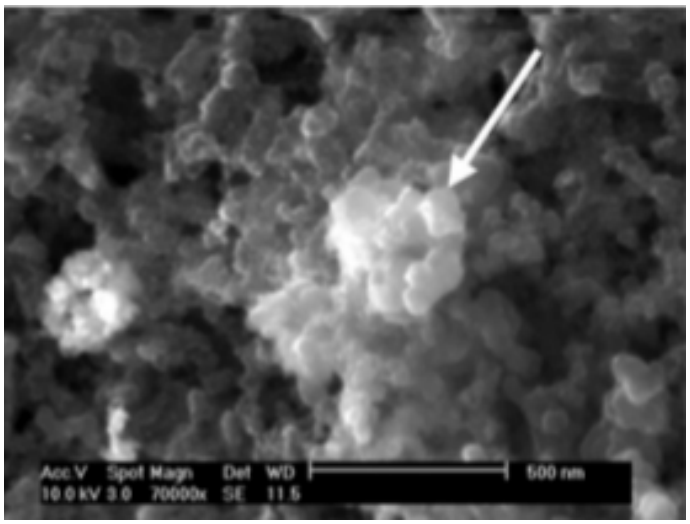


FIGURE 1.22 – Cluster de platine au microscope électronique [71]

1.1.4.1.4 Les dommages structuraux

Ce qui est nommé ici dommages structuraux regroupe tous les dommages de type fissurations et destructions mécaniques.

On distingue 5 types de dommages structuraux :

- Les délaminations (numéro 7). Pour une cellule de pile à combustible, c'est la désolidarisation d'une couche par rapport à ses voisines.
- Les fissurations. Des fissurations peuvent apparaître le long des couches mais aussi dans d'autres plans. On peut voir dans la figure 1.23 des dommages de fissurations et de délaminations sur l'assemblage couche de diffusion-couche catalytique-membrane-couche catalytique-couche de diffusion (MEA).
- L'inclusion de débris de couche de diffusion dans la membrane et la couche catalytique (numéro 4, ce dommage a principalement lieu pendant l'assemblage de la cellule). On peut voir au microscope ces débris dans la figure 1.24.
- La compression de la couche de diffusion (numéro 9) qui a aussi lieu lors de l'assemblage à cause des contraintes résiduelles d'assemblage. Un exemple de couche de diffusion compressée pour une technologie en fibre est donnée dans la figure 1.25. La mesure de ce type de dommages sur la couche de diffusion est compliquée ; l'article [7] propose une revue des méthodes de caractérisation de la couche de diffusion.
- Des "pinholes" dans la membrane (numéro 10). Ce sont des petits trous qui apparaissent dans la membrane. La figure 1.26 montre quelques un de ces "pinholes". Ce type de dommage engendre à partir d'un certain seuil la destruction rapide de la cellule par combustion directe des gaz séparés par la membrane qui vont ainsi se mélanger.

Les conséquences de ces dommages structuraux sont des baisses locales de conductance électrique et thermique. Les zones fissurées et délaminées ne conduiront plus la chaleur et l'électricité comme avant. Des inhomogénéités supplémentaires de courant et de température sur la surface de la cellule apparaissent donc suite à ces dommages. Pour les pinholes, on mesurera une baisse de potentiel comme s'il y avait un courant de fuite.

1.1.4.2 Les mécanismes d'endommagement

Les mécanismes d'endommagements sont plus ou moins rapides. Une figure est proposée dans l'article [69] pour illustrer l'influence des différents mécanismes de détérioration sur la résistance interne de la cellule (ou ses pertes résistives), c'est la figure 1.27. Le "drying" et le "flooding" sont des phénomènes liés à un assèchement ou un trop plein d'eau dans la cellule ; il s'agit plus d'accidents que de phénomènes de vieillissements. Le "poisoning" (empoisonnement) est à la frontière entre les deux, c'est un type de pollution très critique. Le "H_2 Crossover" devient plus important quand il y a des "pinholes" dans la membrane. Les "Other irreversibilities" correspondent aux autres mécanismes de vieillissement.

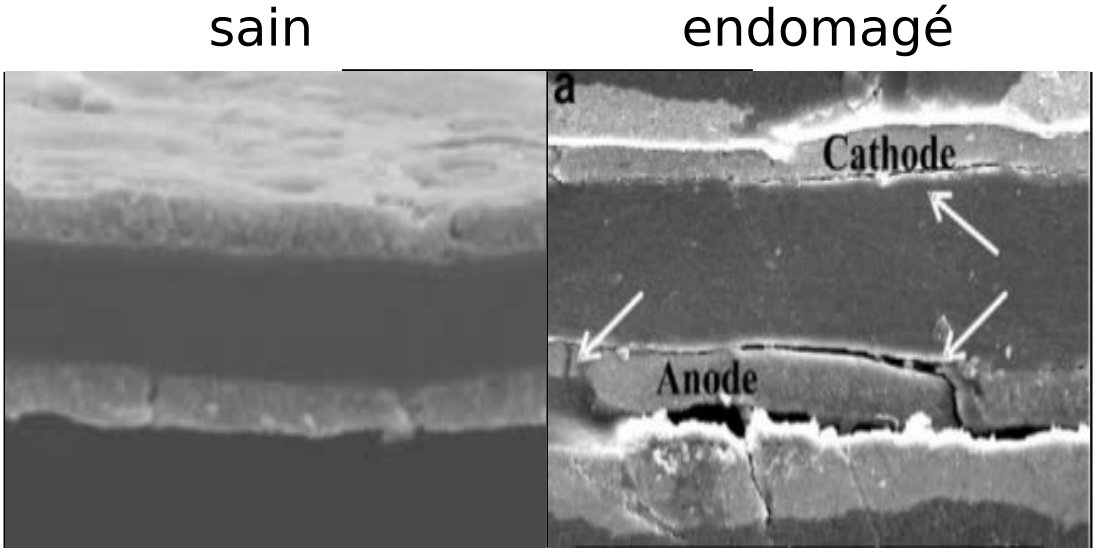


FIGURE 1.23 – Photographie réalisée au microscope électronique de délamination et fissuration dans une cellule [71]

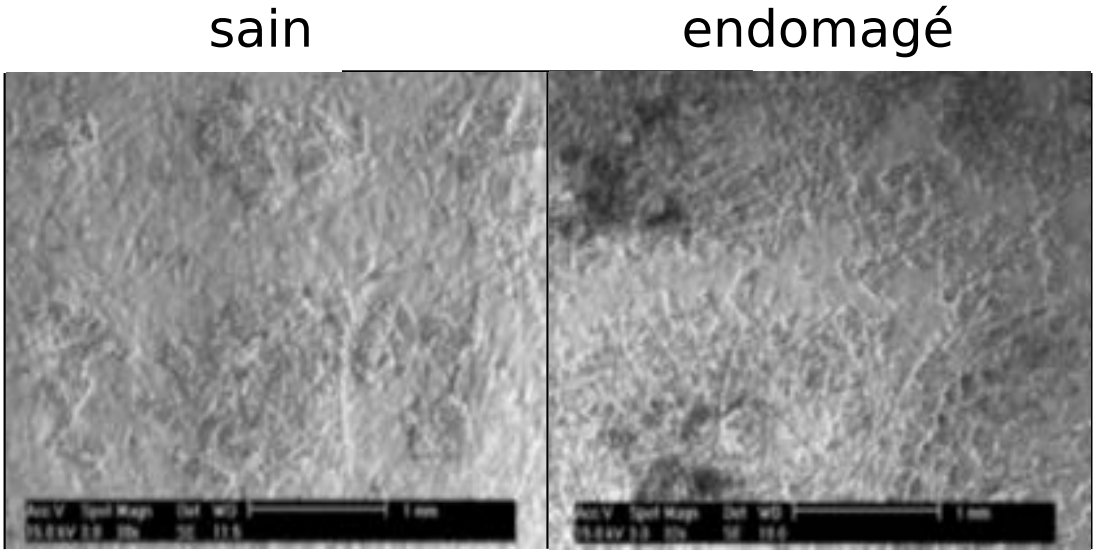


FIGURE 1.24 – Photographie réalisée au microscope des débris de couche de diffusion sur la membrane et la couche catalytique[71]

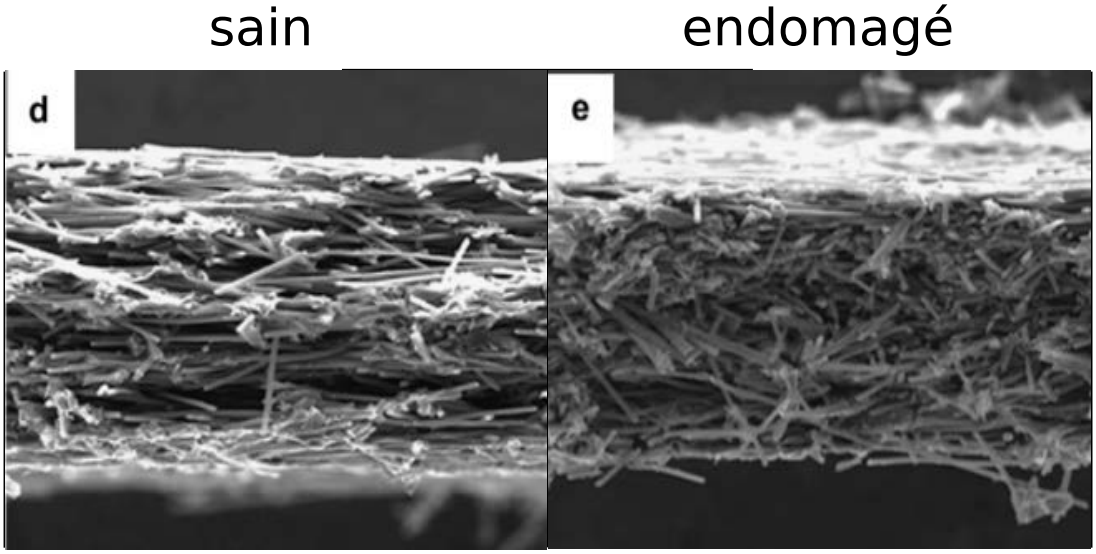


FIGURE 1.25 – Photographie réalisée au microscope électronique d'une couche de diffusion en fibres compressée [63]

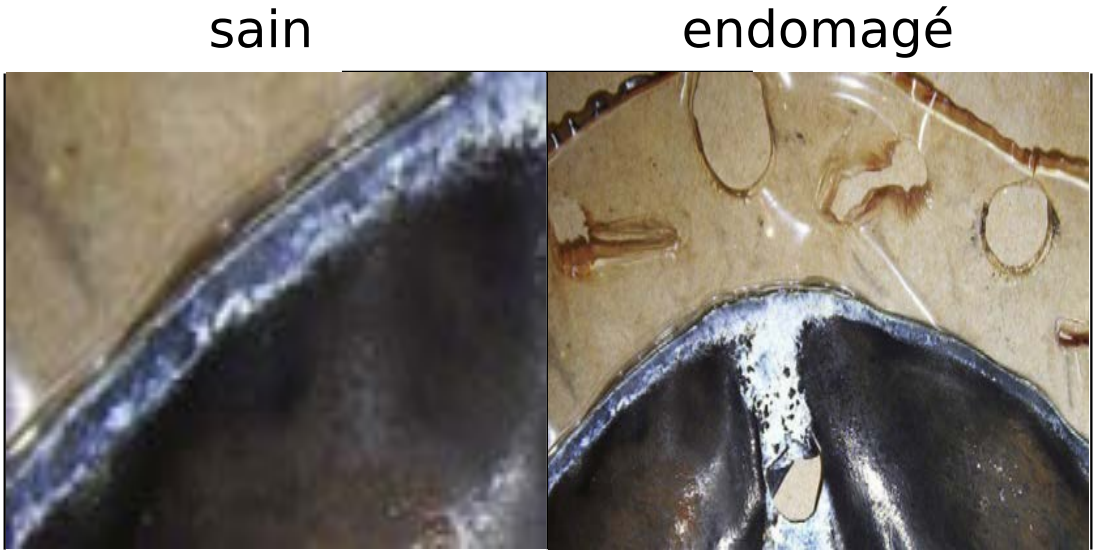


FIGURE 1.26 – Photographie des conséquences des "pinholes" sur une membrane [53]

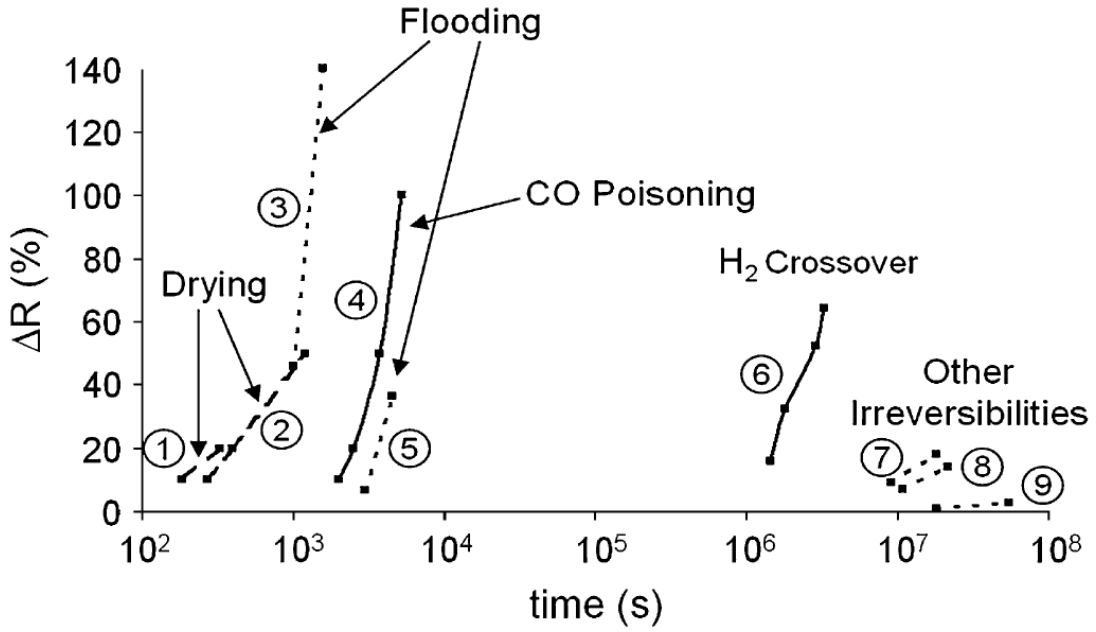


FIGURE 1.27 – Figure illustrant les vitesses relatives des différents mécanismes endommageant la pile à combustible [69]

Ces informations doivent être prises à titre illustratif car les dynamiques de vieillissement sont très dépendantes des conditions de fonctionnement des piles comme cela est montré dans l'article [78].

1.1.4.2.1 La physiologie chimique de la cellule

Ce qui est appelé ici la physiologie chimique de la cellule est le système chimique qui permet la production d'acide et de polluants provoquant des dommages liés à la corrosion et à la pollution.

La production d'acide La production d'acide dans la cellule suit un schéma compliqué qui permet plusieurs voies de production qui se catalysent les unes les autres. On distingue principalement les réactions suivantes issues de l'article [3] :

$R_f - CF_2COOH + \bullet OH \longrightarrow R_f - CF_2 + CO_2 + H_2O$
$R_f - CF_2 + \bullet OH \longrightarrow R_f - CF_2OH \longrightarrow R_f - COF + HF$
$R_f - COF + H_2O \longrightarrow R_f - COOH + HF$
$CO_2 + H_2O \longrightarrow H^+ + HCO_3^-$
$Pt^{2+} + H_2O \longrightarrow PtO + 2H^+$
$H_2O_2 + HO\bullet \longrightarrow HO_2\bullet + H_2O$

et pour les électrodes contenants du fer :

$H_2O_2 + Fe^{2+} \longrightarrow HO\bullet + OH^- + Fe^{3+}$
$Fe^{2+} + HO\bullet \longrightarrow Fe^{3+} + OH^-$
$Fe^{2+} + HO_2\bullet \longrightarrow Fe^{3+} + HO_2^-$
$Fe^{3+} + HO_2\bullet \longrightarrow Fe^{2+} + H^+ + O_2$

La figure 1.28 illustre l'imbrication de ces réactions dans le système. Les points représentent les réactions. Les losanges des éléments catalysant et permettant les réactions. Les rectangles des produits intermédiaires et les ronds sont les acides finalement produits.

Le fer peut venir de l'électrode, le platine vient de la couche catalytique, les pores de la membrane fournissent du fluor (F), le CO_2 peut venir de l'approvisionnement en air, le H_2O vient de la réaction. Les radicaux $-OH$ et l'eau oxygénée H_2O_2 qui sont des sources essentielles pour déclencher les réactions apparaissent lorsque :

— Il y a un problème avec l'approvisionnement en réactifs et qu'ils sont consommés trop vite. Donc pour une hausse de courant importante et rapide et quand le compresseur qui fournit l'air n'arrive pas à assurer le débit nécessaire.

— L'eau produite par la réaction n'est pas évacuée assez vite et l'humidité relative augmente. Donc lors du "flooding" ou de manière générale quand on demande un courant trop important ou que l'évacuation de l'eau se fait mal.
— La température de la cellule augmente. Ici aussi, le courant peut être un facteur ou alors un refroidissement pas assez performant.
— Le potentiel de l'électrode joue également un rôle important.

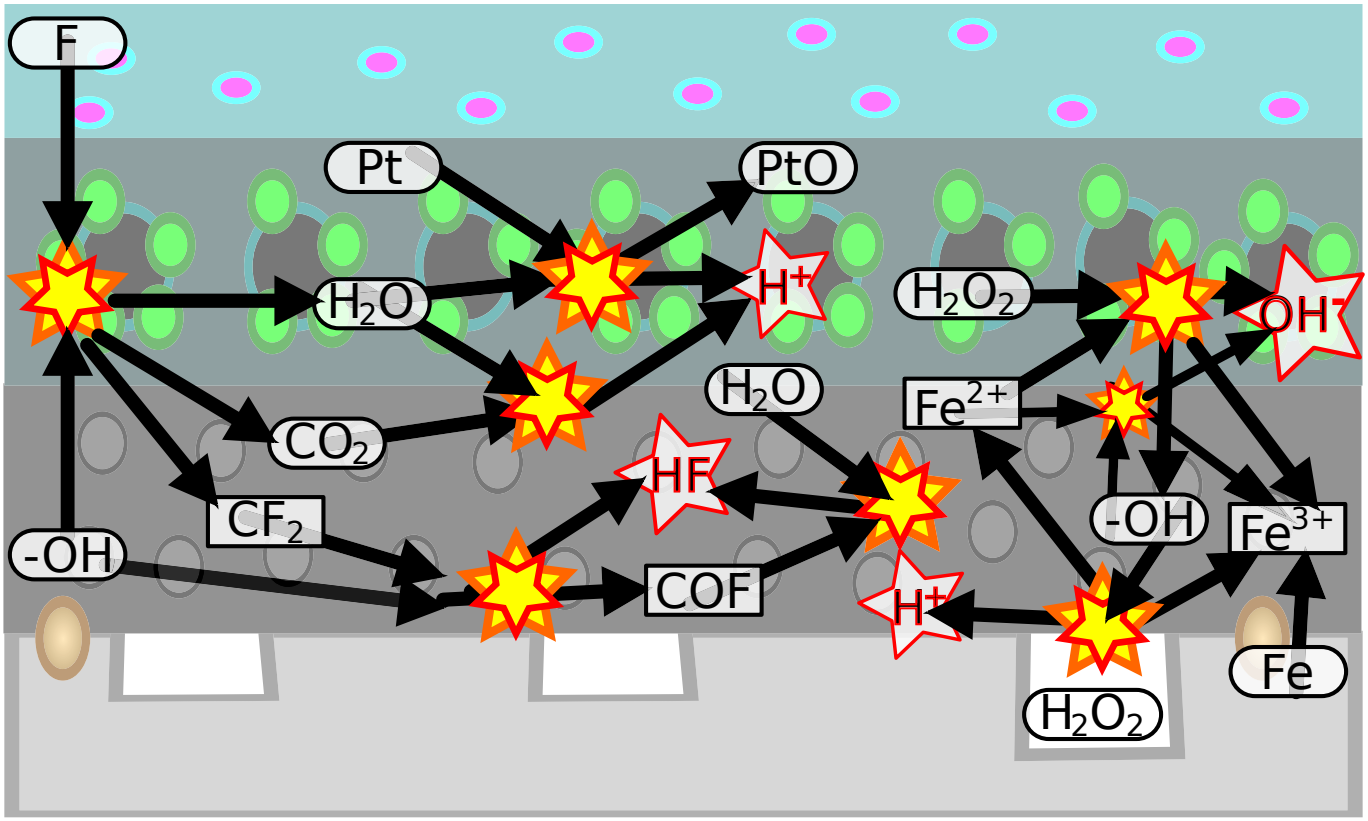


FIGURE 1.28 – La production d'acide dans la pile à combustible

Bien sûr, tous les dommages qui auront ces effets augmenteront aussi la formation d'acide. L'article [2] qui étudie les variations du pH en sortie de la pile à combustible en fonction des variations énumérées plus haut prouve leurs liens de causalité. Un modèle développé dans [83] a aussi permis d'observer que ces variations brutales peuvent créer des inhomogénéités dans la cellule et notamment au voisinage de l'entrée des réactifs dans l'électrode. On peut donc s'attendre à ce que ces productions d'acide se fassent préférentiellement dans certaines zones de la cellule.

Enfin, le rôle de la température a été prouvé par des méthodes statistiques dans [59]. La tension de la pile pour un même courant est décomposée comme la somme de plusieurs facteurs. Parmi ces facteurs, la température est présentée comme influençant à 33% et le temps à 51%.

La corrosion et la pollution La formation d'acide entraîne la corrosion de l'électrode, du carbone de la couche catalytique et des joints. Ainsi, des ions métalliques peuvent être diffusés par la corrosion de l'électrode et des éléments chimiques divers peuvent aussi venir des joints en fonction du type de joint.

Une étude réalisée dans l'article [47] montre ce déplacement de polluants. La figure 1.29 montre la répartition de trois éléments chimiques avant et après pollution :

— Le carbone (C) qui est présent dans la membrane, dans la couche catalytique et dans la couche de diffusion et qui va venir s'accumuler dans la couche catalytique du coté anode (là ou l'hydrogène va vers la membrane) et disparaître de la couche catalytique du coté cathode (là ou l'eau est évacuée de la membrane vers l'extérieur).
— Le fluor (F) qui est présent dans les pores de la membrane et se perd à l'extérieur de cette membrane.
— Le platine (Pt) qui est présent dans la couche catalytique et qui va se diffuser un peu partout (en incluant la membrane).

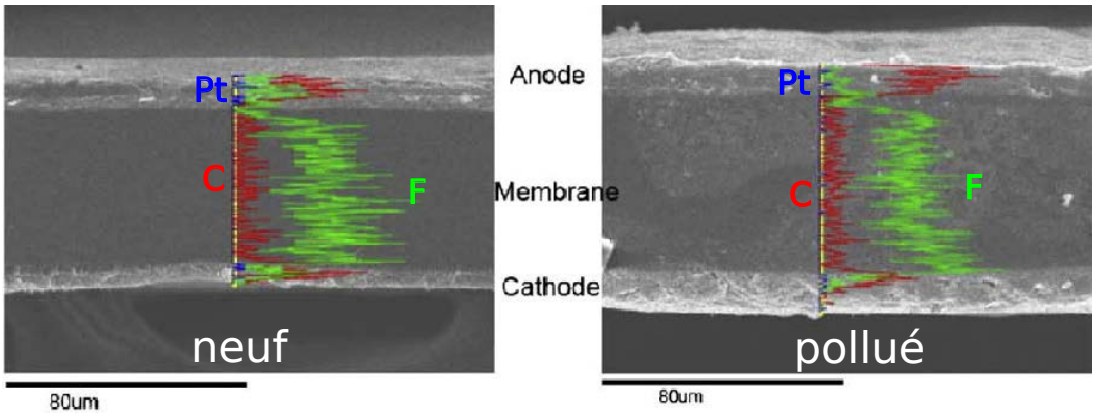


FIGURE 1.29 – Le déplacement des espèces chimiques due à la corrosion puis la pollution [47]

Ces polluants peuvent permettre la production de plus d'acide, c'est le cas des polluants venant de la corrosion du carbone ou d'éventuels ions de fer (Fe^{2+}).

Ces polluants peuvent aussi fragiliser d'autres composants comme c'est étudié dans l'article [39]. La figure 1.30 montre l'influence des polluants ioniques sur la solidité de la membrane.

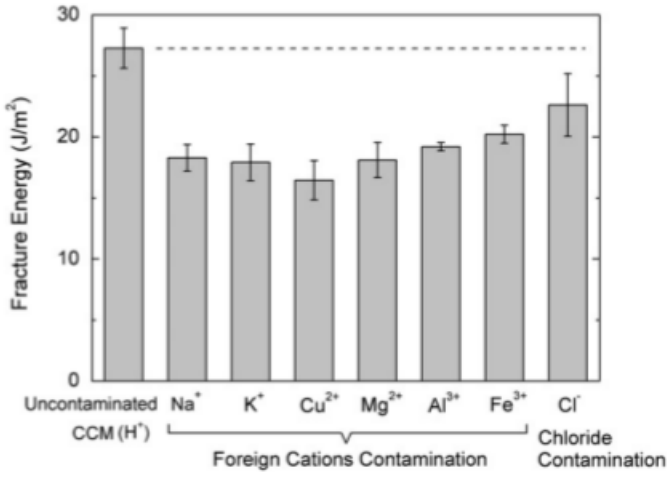


FIGURE 1.30 – L'influence de la pollution d'ions métalliques sur la résilience (solidité) de la membrane [39]

Il faut parler aussi des possibilités d'empoisonnement de la couche catalytique associées à ces polluants. L'étude [61] montre comment un empoisonnement a lieu et dépend de la nature de la couche catalytique ainsi que d'autres facteurs comme la pression et la température.

Le comportement du platine La corrosion du carbone va libérer le platine comme c'est expliqué dans l'article [70]. Celui-ci va devenir un polluant qui va se diriger dans la membrane ou former des clusters (regroupement) de particules de platine. Ces phénomènes de détériorations sont très étudiés. L'article [15] propose d'observer la vitesse de détérioration pour différentes conditions. La figure 1.31 montre quelques uns de ses résultats sur la vitesse de dégradation du pouvoir catalytique en fonction du nombre de cycles de potentiel appliqués à une cellule et avec quelle amplitude. Un cycle de potentiel est ici simplement une tension maximum imposée à la cellule puis un retour à une tension minimum. On observe clairement que la tension favorise le vieillissent.

Mais la corrosion n'est pas la seule cause de l'apparition de ces dommages. D'autres études comme l'article [29] montrent qu'un débit de gaz important peut arracher les particules de platine et qu'on finit par les retrouver dans la membrane.

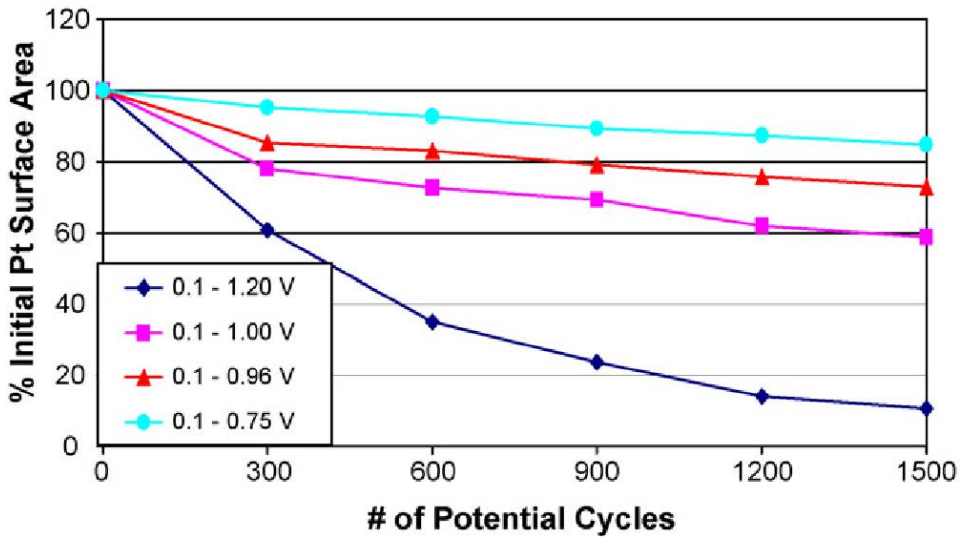


FIGURE 1.31 – La dégradation du pouvoir catalytique de la couche catalytique en fonction de cycles de potentiels appliqués [15]

1.1.4.2.2 Le vieillissement mécanique

En parallèle de la physiologie de la pile, d'autres mécanismes et dommages se produisent. Ce sont les dommages mécaniques. Bien que ces dommages soient influencés par les phénomènes de corrosion et de pollution, ils appartiennent à un système que l'on peut voir comme à part de la physiologie de la cellule.

La fatigue de la membrane Le vieillissement mécanique le plus critique est celui de la membrane. On a vu que des dommages sur la membrane entraînent une destruction rapide de la cellule.

Quand on applique une force sur un objet de manière répétée et un très grand nombre de fois, on endommage cet objet qui finit par se casser ou se fissurer. On appelle ce phénomène la fatigue.

La membrane se dilate (gonfle) pendant le fonctionnement de la pile ou pendant une phase de noyage (quand il y a trop d'eau dans la pile). Deux grandeurs physiques influent sur la dilatation de la membrane : la température et l'humidité. En se dilatant, la membrane va venir appuyer sur les couches voisines, ce qui va la soumettre à des forces (ou contraintes). Par ailleurs, comme il y a une pression d'assemblage qui appuie sur la membrane elle est aussi soumise à une force supplémentaire. Les contraintes dans la membrane peuvent donc être exprimées comme la somme de 3 contraintes présentées dans l'équation 1.42 issue de [5]

$$\pi = \pi^M + \pi^T + \pi^S \tag{1.40}$$
$$\pi^T = \varphi(T - T_{ref}) \tag{1.41}$$
$$\pi^S = \lambda_{mem}(\chi - \chi_{ref}) \tag{1.42}$$

Où :

- π^M : sont les contraintes mécaniques (assemblage, différences de pressions),
- π^T : sont les contraintes thermiques (dilatation thermique),
- π^S : sont les contraintes dues à l'humidité (gonflement de la membrane humidifiée),
- T : est la température,
- χ : est une grandeur relative au contenu en eau de la membrane (humidité relative),
- le reste : sont des paramètres intrinsèques aux phénomènes étudiés.

La figure 1.32 montre une répartition de la contrainte dans la membrane, on observe qu'il n'y a pas les mêmes contraintes partout dans la membrane, certaines zones subissent donc plus de forces.

La température et l'humidité durant le fonctionnement ne sont pas constantes, d'où une variation des contraintes au cours du temps. C'est cette variation qui va provoquer la fatigue. Un modèle est proposé pour étudier la fatigue de la membrane dans [42] montrant notamment l'influence de l'humidité et de la température sur la dilatation de la membrane. Une autre étude, cette fois-ci expérimentale est proposée dans

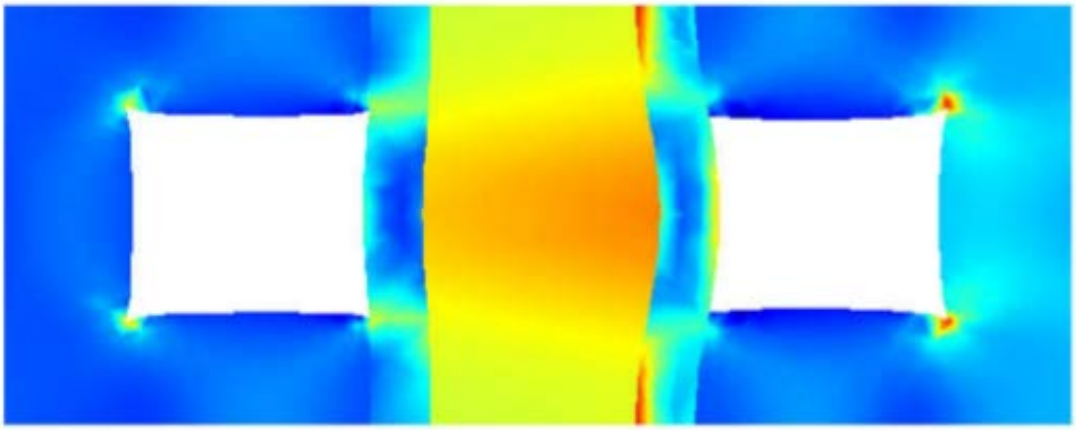


FIGURE 1.32 – Répartition de contraintes mécaniques dans la cellule calculée dans [5]

[44], elle montre qu'une membrane seule, au cours du temps, d'abord fatigue progressivement puis de plus en plus vite avant la rupture.

Cette tendance des dommages à s'aggraver de manière focalisée de plus en plus vite se retrouve bien dans l'ensemble des mécanismes de détérioration. L'article [56] observe expérimentalement une répartition de température dans une cellule saine et dans une cellule endommagée. Ses observations sont exposées sur la figure 1.33. Cependant, une autre étude dans l'article [81] montre que des inhomogénéités initiales dans une cellule saine peuvent aussi être homogénéisées par le vieillissement.

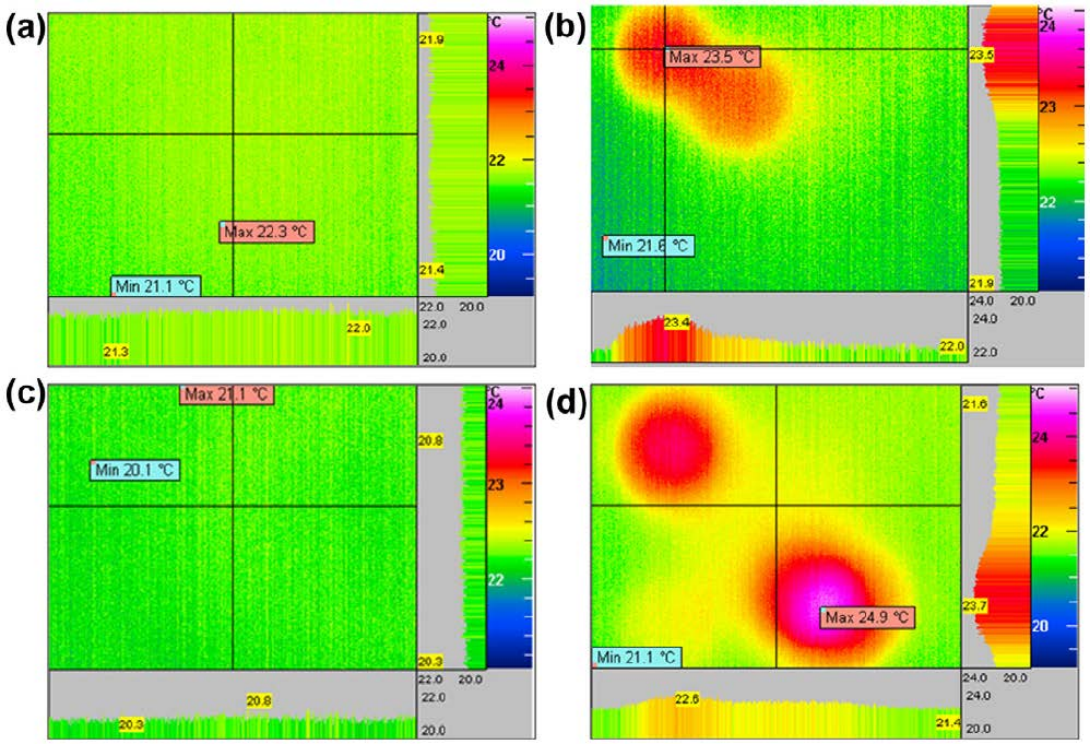


FIGURE 1.33 – Répartition de températures dans des cellules saines (à gauche) et endommagées (à droite) [56]

Une des conséquences de cette fatigue est l'apparition des "pinholes". Dans un premier temps, ces "pinholes" peuvent être assez petits pour ne pas entraîner la destruction de la cellule par mélange explosif ($H_2 + O_2$). Cependant, une fois apparus, ils vont commencer à s'agrandir de plus en plus vite sous l'effet de la fatigue et d'autres phénomènes apparaissant au fur et à mesure du développement de leur taille (combustion du mélange $O_2 + H_2$ en petite quantité). Une étude réalisée dans [35] montre les différentes conséquences liées à la taille des pinholes, et notamment qu'un petit "pinhole" ne cause pas immédiatement de pertes mais accélère l'endommagement de la cellule.

La destruction par formation de glace ou "freezing" Le "freezing" n'est pas à proprement parler un phénomène de vieillissement de la pile a combustible. Mais dans certaines applications, comme les systèmes embarqués, il contribue au vieillissement.

Dans une pile à combustible à membrane échangeuse de proton, on a de l'eau qui est produite pendant le fonctionnement. Une fois la réaction arrêtée, cette eau peut rester dans la pile. Si la pile est soumise à des températures en dessous de 0^oC, elle peut geler. La formation de cristaux (glaçons), plus gros que l'eau liquide, peut entraîner la destruction mécanique de la cellule.

Les études réalisées dans [31], [29] présentent deux types de "freezing". Un "freezing" où on a beaucoup d'eau et qui provoque des dommages catastrophiques dans la cellule tels que des fissurations et des délaminations. Un "freezing" où il y a peu d'eau et donc où les dommages vont apparaître au fur et à mesure que le phénomène se répète. Le premier "freezing" peut être considéré comme un phénomène de destruction et le deuxième de détérioration.

Les dommages causés par les vibrations Bien que l'influence des vibrations sur le vieillissement de la pile à combustible soit une étude importante pour les applications embarquées, très peu d'études ont été faites sur ce sujet.

L'étude réalisée dans l'article [68] montre que les frottements dans une cellule résultants des vibrations se situent principalement entre l'électrode et la couche de diffusion.

1.2 Quelques bases de mathématique pour faire de la simulation temps réel

Pour faire un modèle multidimensionnelle de pile à combustible en temps réel, il faut utiliser un certain nombre d'outils numériques et de notions mathématiques.

1.2.1 Les critères de qualité

1.2.1.1 Un problème bien posé

Il est possible de modéliser un système de plusieurs manières. En effet, comme les lois de physique s'appliquent sur des caractéristiques d'entités, on peut modéliser un même système en s'appuyant sur différentes entités et sur différentes caractéristiques avant de déterminer les autres.

Cependant, en fonction des entités, caractéristiques et lois que l'on choisit d'utiliser, le problème pourra être bien posé ou non. On dit qu'un système est bien posé quand :

— une solution existe ;
— cette solution est unique ;
— elle dépend d'une manière continue des données dans une topologie raisonnable.

La première phase dans la construction d'un modèle numérique consiste donc à bien choisir comment on va modéliser notre système.

1.2.1.2 Le conditionnement

Imaginons deux cas comme dans la figure 1.34. Dans le cas de gauche, la force F va faire tomber de manière discontinue et brutale du Na dans l'eau, provoquant ainsi des petites explosions. Si on essaie de modéliser directement Q en fonction de F on aura un système posé avec un mauvais conditionnement car il sera très difficile et instable de calculer Q avec F. Si en revanche, on essaie de modéliser Q en fonction de F dans le cas de droite, on aura un modèle stable et continu, on dit que le problème est bien conditionné. Il est donc important de bien choisir ses entrés, ses sorties et ses grandeurs de références pour rendre le calcul possible.

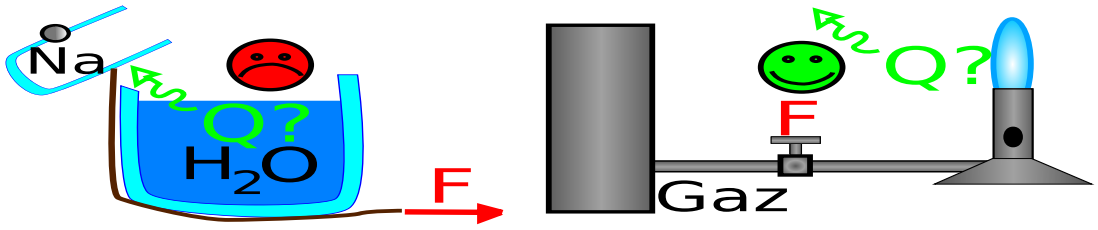


FIGURE 1.34 – Un cas avec un mauvais conditionnement (à gauche) et un autre avec un bon (à droite)

1.2.1.3 La consistance

Pour obtenir un résultat avec une méthode numérique, on doit faire des approximations plus ou moins fines. Si quand on affine ces approximations on tend bien vers le résultat voulu et non pas à coté, alors on dit que le système est consistant. Ce n'est pas une propriété que l'on peut vérifier facilement. C'est donc aussi un problème qu'il faut résoudre en amont.

1.2.1.4 La stabilité numérique

Imaginons un calcul : $C = A+B$, puis on réutilise le résultat de ce calcul dans un autre calcul : $D = C+E$, puis encore une fois on utilise le résultat : $G = D \times D$. Jusque là, tout va bien. Mais si, il y avait une erreur à chaque calcul comme c'est le cas avec les méthodes numériques, cette erreur augmenterait à chaque nouveau calcul puisque l'on réutilise le résultat à chaque fois. On appelle ça, la propagation de l'erreur. Il existe plusieurs types de propagation d'erreur et notamment :

- un transport simple de l'erreur qui va s'accumuler à chaque nouveau calcul ;
- une amplification de l'erreur qui va augmenter de manière exponentielle à chaque nouveau calcul ;
- une oscillation de l'erreur qui va tantôt augmenter, tantôt diminuer en restant aux alentours de la bonne valeur.

Dans les cas où notre propagation de l'erreur devient trop importante et notamment dans le cas de l'amplification de l'erreur, on parle d'instabilité. Pour que l'on puisse considérer un modèle comme stable, il faut que la propagation de l'erreur soit raisonnable.

1.2.1.5 La convergence

Notre modèle sera convergent si et seulement si, il est à la foi stable et consistant. C'est l'objectif final de qualité pour un modèle numérique.

1.2.1.6 La complexité

Les méthodes numériques sont des algorithmes qui permettent d'arriver à un résultat proche de celui recherché en plusieurs étapes. Si on veut calculer plus d'inconnues ou de variables en même temps, il faudra plus d'étapes dans ces algorithmes. Cependant, la quantité d'étapes supplémentaires nécessaires par rapport au nombre de variables que l'on veut calculer ne croit pas toujours linéairement. En fonction de l'algorithme choisi, on aura différentes fonctions associées qui nous donnent le nombre d'étapes en fonction du nombre de variables : on appelle ces fonctions : la complexité d'un algorithme.

En quoi c'est intéressant ? Il existe plusieurs algorithmes différents pour résoudre les mêmes problèmes. La figure 1.35 compare deux algorithmes. L'Algo 1 a une complexité en N^2 où N est le nombre de variables et l'Algo 2 a une complexité en $2 \times N$. On remarque que l'Algo 1 est plus rapide que l'Algo 2 pour moins de 4 variables, ensuite la tendance s'inverse.

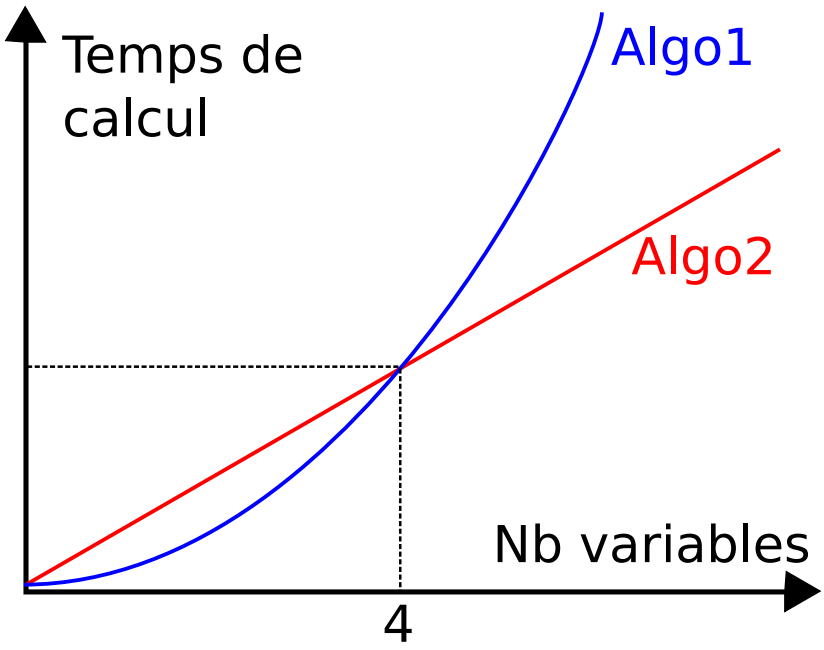


FIGURE 1.35 – Comparaison du temps de calcul en fonction du nombre de variables pour deux algorithmes

Il faut donc considérer la complexité de chaque algorithme avant d'en choisir un, de manière à avoir un modèle avec un temps de calcul optimal.

1.2.2 Les méthodes de résolution d'équation

1.2.2.1 La recherche dichotomique

Cet algorithme permet de trouver la solution d'une équation dans un certain intervalle. Le principe est simple, on recherche la solution en excluant la possibilité que la solution se trouve sur une des deux moitiés de l'intervalle. On applique cette approche de manière récurrente jusqu'à ce que l'intervalle corresponde à l'erreur que l'on est prêt à tolérer.

Soit MIN et MAX les valeurs minimum et maximum que X l'inconnue peut prendre. On cherche la solution de $F(X) = 0$. La procédure de recherche dichotomique est la suivante :

1. On calcule $F_{prec} = F(MAX)$;
2. Tans que $MAX - MIN > \varepsilon$ avec ε la précision voulue :
   (a) on calcule le milieu de l'intervalle de recherche : $M = \frac{MIN+MAX}{2}$;
   (b) si $F(M)$ n'est pas du même signe que F_{prec} alors on place $MIN = M$;
   (c) sinon $MAX = M$;
   (d) on recalcule $F_{prec} = F(M)$.

La complexité de cet algorithme est : $log(MIN - MAX)$.

1.2.2.2 La méthode de Newton

C'est un algorithme plus rapide que la recherche dichotomique, mais moins robuste. La figure 1.36 montre le parcours de la recherche sur une fonction pour trouver sa racine. La procédure de recherche est la suivante :

1. On choisit un X_p que l'on sait pas trop loin de la solution ;
2. on calcul $F(X_p)$ et $F'(X_p)$;
3. on calcul $X = X_p - \frac{F(X_p)}{F'(X_p)}$;
4. si $|X - X_p| > \varepsilon$ alors on place $X = X_p$ et on recommence à l'étape 2.

Avec cet algorithme, on double le nombre de chiffres significatifs de la solution à chaque itération.

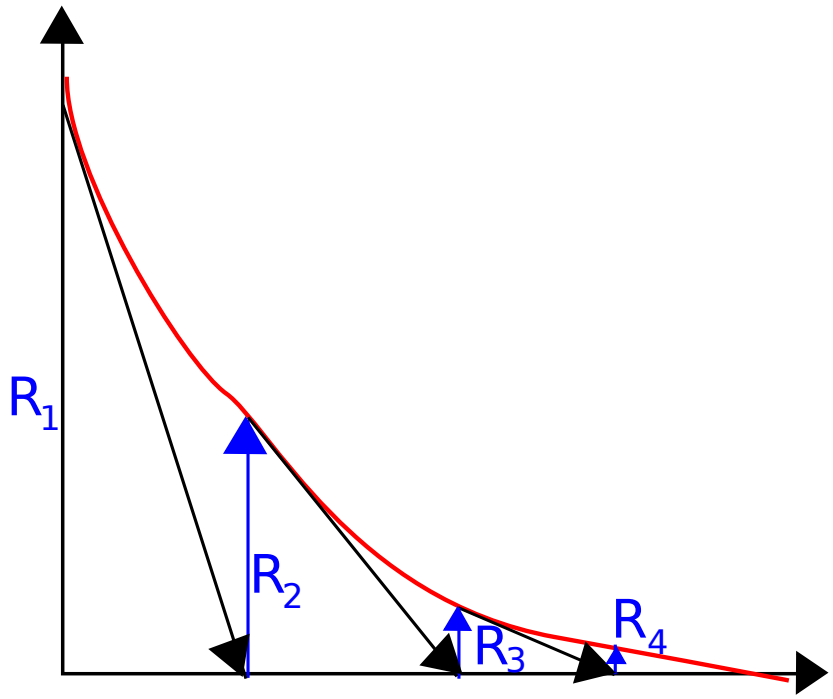


FIGURE 1.36 – Parcours d'une fonction par l'algorithme de recherche de Newton pour trouver sa racine

1.2.3 Les méthodes de résolution de systèmes

Ce sont aussi des méthodes importantes car elles sont indispensables pour les calculs par éléments finis.

1.2.3.1 La méthode de Gauss-Jordan

Cette méthode ne s'applique que sur les systèmes linéaires. Il faut d'abord mettre le système sous forme de matrice comme le montre l'équation 1.43.

$$\left\{\begin{array}{rcrcrcl} 4x & + & 5y & + & 6z & = & 12 \\ 3x & + & 1y & + & 3z & = & 10 \\ 2x & + & 6y & + & 8z & = & 8 \end{array}\right. \text{ soit } [K]\cdot\{q\}=\{F\} \Longleftrightarrow [M]=[[K]\{F\}]=\left[\begin{array}{ccc|c} 4 & 5 & 6 & 12 \\ 3 & 1 & 3 & 10 \\ 2 & 6 & 8 & 8 \end{array}\right] \quad (1.43)$$

Ensuite, on va linéariser la partie carrée de la matrice $[M]$ en utilisant le pivot de Gauss, puis résoudre le système :

1. Pour chaque ligne L_i de $[M]$ faire en partant du haut :
   (a) faire : $L_{i+k} = L_{i+k} - \frac{[M]_{i+k,i+k}}{[M]_{i,i+k}} \times L_i$ avec $1 \leq k \leq rang([M]) - i$
2. pour chaque ligne L_i de $[M]$ faire en partant du bas :
   (a) faire : $L_{i-k} = L_{i-k} - \frac{[M]_{i-k,i-k}}{[M]_{i,i-k}} \times L_i$ avec $1 \leq k < i$
3. résoudre les inconnues en calculant pour chaque ligne :
   (a) $\{q\}_i = [M]_{i,rang([M])+1} \,/\, [M]_{i,i}$

La compléxité de cette algorithme est N^3.

1.2.3.2 La méthode de Newton-Raphson

Elle est plus instable que la méthode de Gauss-Jordan, mais elle permet de résoudre des systèmes non linéaires. Soit le système de l'équation 1.44.

$$\left\{\begin{array}{rcl} f_1(x,y,z) & = & 8 \\ f_2(x,y,z) & = & 16 \\ f_3(x,y,z) & = & 24 \end{array}\right. \text{ soit : } \{F(X)\}=\{T\} \text{ avec : } X=\left\{\begin{array}{c} x \\ y \\ z \end{array}\right\}, F(X)=\left\{\begin{array}{c} f_1(X) \\ f_2(X) \\ f_3(X) \end{array}\right\}, T=\left\{\begin{array}{c} 8 \\ 16 \\ 24 \end{array}\right\} \quad (1.44)$$

Pour trouver la valeur de X, on applique la méthode suivante :

1. Choisir un X que l'on estime proche de la solution ;
2. tan que $||R|| \geq \varepsilon$:
   (a) calculer $\{F_{prec}\} = \{F(X)\}$;
   (b) calculer $\{R\} = \{T\} - \{F_{prec}\}$;
   (c) calculer le jacobien :

$$[J](X) = \begin{bmatrix} \frac{\partial F_1}{\partial X_1}(X) & \frac{\partial F_1}{\partial X_2}(X) & \cdots \\ \frac{\partial F_2}{\partial X_1}(X) & \ddots & \vdots \\ \vdots & \cdots & \ddots \end{bmatrix}$$

   (d) résoudre le système $[J] \times \{\partial X\} = \{R\}$;
   (e) mise à jour de X en lui ajoutant ∂X.

On utilise en général un algorithme de Gauss Jordan pour les résolutions de systèmes linéaires, ce qui veut dire que la complexité de cet algorithme est supérieure à celle de Gauss Jordan.

1.2.4 Une méthode d'optimisation robuste : l'algorithme génétique

On peut parfois avoir besoin de rechercher à maximiser une fonction ou en minimiser une autre qui serait l'erreur. Cela peut être particulièrement utile pour ajuster les paramètres empiriques par exemple.

Imaginons que l'on ait une fonction $F(x, y)$ dont on cherche le maximum. On va suivre les étapes suivantes :

1. On définit un code génétique : (x, y) ;
2. on génère aléatoirement Nb individus $I_1(x_1, y_1)$, $I_2(x_2, y_2)$, $I_3(x_3, y_3)$, ... ;
3. on calcule tous les $P_1 = F(x_1, y_1)$, $P_2 = F(x_2, y_2)$, $P_3 = F(x_3, y_3)$, ... ;
4. plusieurs variantes existent, mais l'idée est de supprimer les P_i les plus faibles, garder la moitié des individus avec les P_i les plus hauts ;
5. dans ceux qui restent :
   — on en prend une part et on leur ajoute des valeurs aléatoires dans leurs x et y ;
   — on en prend une autre part et on les mélange deux à deux pour créer de nouveaux individus qui remplaceront ceux que l'on a supprimé, exemple : $I_{12}(x_1, y_2)$, ...
6. on recommence à l'étape 3 Nb_2 fois ;
7. on retire comme solution le meilleur individu (celui qui a le P_i le plus haut).

C'est un algorithme très lent et assez complexe, surtout quand $F(x, y)$ est lourd. Cependant, cet algorithme à l'avantage d'être extrêmement robuste. Il s'agit juste de choisir les paramètres Nb et les ratios des parts d'individus qui donnent les meilleurs résultats et le plus vite possible.

1.2.5 Les méthodes par éléments finis

Si on a des équations aux dérivés partielles et que l'on veut modéliser un système multidimensionnel, on aura besoin d'utiliser des méthodes par éléments finis.

1.2.5.1 Les équations aux dérivés partielles

Posons l'équation aux dérivés partielles d'ordre deux générique 1.45.

$$A\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + B\frac{\partial^2 u}{\partial t \partial x} + C\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + D\frac{\partial u}{\partial t} + E\frac{\partial u}{\partial x} + Fu = 0 \tag{1.45}$$

En fonction des valeurs que l'on donne aux paramètres A, B, C, D, E et F, on obtient des équations aux dérivés partielles spécifiques que l'on peut ré-exprimer avec des symboles d'analyse vectorielle.

Et notamment :
— si $B^2 - AC < 0$, on dit que l'équation est parabolique, soit : $\frac{\partial u}{\partial t} = c\Delta u + f$, une équation type qui modélise un phénomène équivalent à la propagation d'une contrainte par exemple ;
— si $B^2 - AC = 0$, on dit que l'équation est hyperbolique, soit : $\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = c^2\Delta u + f$, une équation type qui modélise un phénomène équivalent à une diffusion de chaleur ou de matière par exemple ;
— si $B^2 - AC > 0$, on dit que l'équation est elliptique, soit : $-c\Delta u = f$, une équation qui modélise un équilibre statique.

On sait que la méthode des volumes finis s'applique bien sur les équations hyperboliques ou de conservation. La méthode des différences finies est quant à elle très simple à mettre en place et très polyvalente.

1.2.5.2 La méthode de la différence finie

La méthode de la différence finie s'appuie sur une approximation des dérivés. On sait que les dérivés sont définies par l'équation 1.46.

$$f'(x) = lim_{h \longrightarrow 0} \frac{f(x+h) - f(x)}{h} \tag{1.46}$$

On reprend simplement la définition de l'équation 1.46 mais en remplaçant h par une valeur finie et petite. Ainsi, on peut ré-exprimer sans les limites les calculs des dérivés. Il en existe de trois sortes :
— les approximations par différence avant 1.47 ;
— les approximations par différence arrière 1.48 ;
— les approximations par différence centré 1.49.

$$\frac{d^n f}{dx^n}(x) = \frac{\Delta_h^n[f](x)}{h^n} + O(h) \tag{1.47}$$

$$\frac{d^n f}{dx^n}(x) = \frac{\nabla_h^n[f](x)}{h^n} + O(h) \tag{1.48}$$

$$\frac{d^n f}{dx^n}(x) = \frac{\delta_h^n[f](x)}{h^n} + O(h^2) \tag{1.49}$$

Où les valeurs des variables $\Delta_h^n[f](x)$, $\nabla_h^n[f](x)$ et $\delta_h^n[f](x)$ sont exprimées dans les équations 1.50,1.51 et 1.52.

$$\Delta_h^n[f](x) = \sum_{i=0}^{n} (-1)^i \binom{n}{i} f(x + (n-i)h) \tag{1.50}$$

$$\nabla_h^n[f](x) = \sum_{i=0}^{n} (-1)^i \binom{n}{i} f(x - ih) \tag{1.51}$$

$$\delta_h^n[f](x) = \sum_{i=0}^{n} (-1)^i \binom{n}{i} f\left(x + \left(\frac{n}{2} - i\right)h\right) \tag{1.52}$$

Les $O(h)$ expriment à quoi sont rattachées les erreurs de ces approximations. Elles sont bien entendu directement dépendantes de h. Une erreur de l'ordre de $O(h^2)$ sera d'autant plus faible qu'une erreur en $O(h)$ car h est petit. Mais l'approximation en $O(h^2)$ en différence finie d'ordre 1 s'accompagne souvent d'instabilités oscillantes, raison pour laquelle on préférera la différence avant. L'équation 1.53 donne un exemple d'approximation de formule avec les différences finies.

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \lambda \frac{\partial T}{\partial x} \mapsto \frac{T(x, t+h_t) - T(x,t)}{h_t} = \lambda \frac{T(t+h_x, t) - T(x,t)}{h_x} \tag{1.53}$$

1.2.5.3 La méthode des volumes finis

La méthode des volumes finis s'applique sur les équations faisant entrer en jeu des propriétés de conservations. Ces équations peuvent toujours être décomposées avec une équation contenant un $\nabla\cdot$ ou *div* comme l'équation si courante 1.54.

$$C\frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \cdot \vec{Q} + f \tag{1.54}$$

L'approximation de volume fini revient à considérer que les fonctions T et f sont constantes sur un volume de maille. Ainsi, on intègre facilement sur le volume de maille V (voir équation 1.55).

$$\int_V \left(C \frac{\partial T}{\partial t} \right) dV = \int_V \left(\nabla \cdot \vec{Q} + f \right) dV \tag{1.55}$$

soit l'équation 1.56.

$$V \times C \frac{\partial T}{\partial t} = \int_V \nabla \cdot \vec{Q} dV + f \times V \tag{1.56}$$

Hors, le Théorème de Stokes est exprimé dans l'équation 1.57.

$$\int_V \nabla \cdot \vec{Q} dV = \int_S \vec{Q} \cdot d\vec{S} \tag{1.57}$$

Où S est la surface autour du volume V et $d\vec{S}$ est un vecteur de norme dS et de direction normale à la surface S. Donc on peut déduire l'équation 1.58.

$$V \times C \frac{\partial T}{\partial t} = \int_S \vec{Q} \cdot d\vec{S} + f \times V \tag{1.58}$$

Lorsque nos mailles sont carrées par exemple, l'intégrale $\int_S \vec{Q} \cdot d\vec{S}$ devient très simple à calculer. Sans aller plus loin dans le détail, on peut retenir que chaque fois qu'un terme en $\nabla\cdot$ apparaît, il peut être considéré comme un bilan des flux qui entrent et qui sortent et être directement calculés comme tel dans chaque maille.

1.2.6 Sur les systèmes dynamiques

1.2.6.1 Les systèmes multi-agents

Un système multi-agents est un système composé d'un ensemble d'agents dans un environnement. Dans l'article [23] sont présentés beaucoup de paradigmes différents sur ces systèmes ainsi que l'existence d'une classification des agents. On parle d'agents cognitifs et d'agents réactifs. Les agents cognitifs sont les agents "cognitifs" qui collaborent entre eux. Ce sont plutôt les agents "réactifs" qui nous intéressent ici. L'idée des agents réactifs, c'est qu'ils sont simples, peu intelligents (donc peu gourmants en puissance de calcul) mais lorsqu'on en prend plusieurs et qu'on les met ensemble dans un même environnement, il se produit l'**émergence** d'un comportement intelligent. Cette idée est d'autant plus intéressante qu'elle montre la possibilité de faire des opérations complexes à partir de systèmes simples que l'on peut éventuellement faire tourner en même temps (calcul parallèle).

1.2.6.2 La théorie du chaos

La figure 1.37 donne une idée de ce qu'est un système chaotique par rapport à un système non chaotique. Dans le cas d'un système chaotique, le résultat dépend tellement des conditions initiales que l'on ne peut pas le prédire. Dans le livre [13] il est expliqué que l'un des principaux problèmes des systèmes de calcul parallèle, c'est leur caractère imprévisible. En effet, en fonction des conditions initiales du lancement du programme, les calculs parallèles s'enchevêtrent de manière légèrement différentes pendant le calcul. Les infimes différences qui en résultent sont suffisantes pour faire apparaître ou pas des erreurs d'une fois à l'autre en lançant un même programme plusieurs fois sur le même ordinateur.

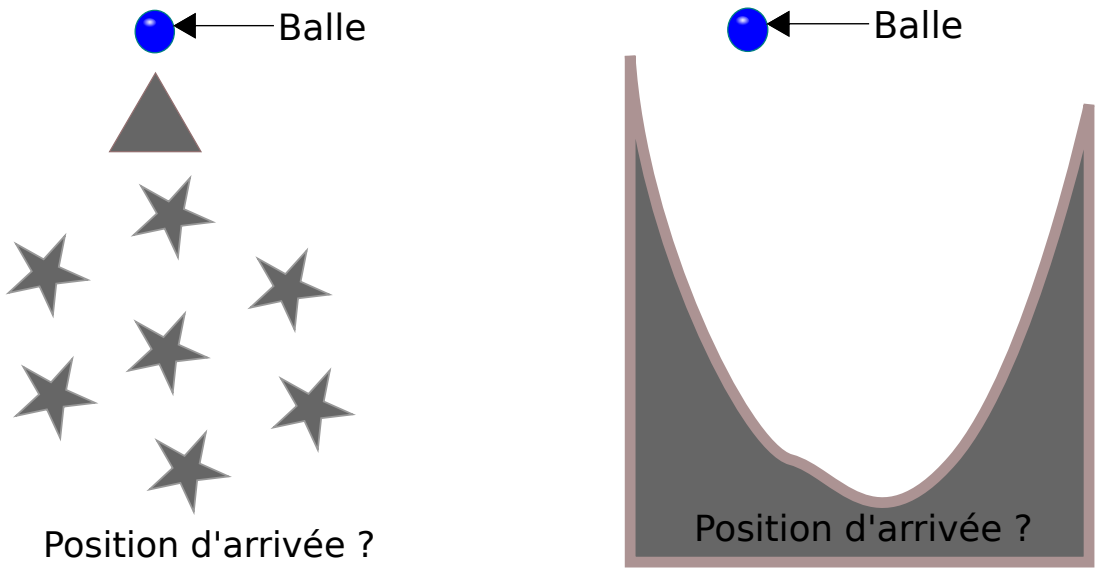


FIGURE 1.37 – Système chaotique (à gauche) et système non chaotique (à droite)

1.2.6.3 La prédiction dynamique

La prédiction dynamique est une théorie très audacieuse et idéaliste sur laquelle s'appuie pourtant tous les modèles dynamiques. L'idée est que si on connaît exactement tout ce qui est à un instant t, comme on connaît les règles physiques déterministes associées, on peut prédire l'avenir avec exactitude à partir de ces données. Dans la pratique, c'est impossible actuellement à l'échelle de l'univers ou du monde, mais dans un système bien connu et bien délimité, cela reste plausible.

Si il existe des états vers lesquels un système finit systématiquement (comme le creux dans la figure 1.37), ces états sont des "attracteurs". Le système devient alors grandement prévisible. Dès l'instant où un système possède un régime permanent que l'on peut calculer, il possède un attracteur et ne peut plus être chaotique. Bien que la pile à combustible soit un système en interaction constante avec l'extérieur (variation du courant demandé, de la température extérieur, ...), elle peut subir des phases de régime permanent pendant son fonctionnement (en fonction des conditions d'utilisations). Lorsque ces phases de régime permanent sont atteintes, l'erreur de prédiction dynamique est annulée, c'est ce qui permet à ce système de ne pas être impossible à prédire sur une longue durée. Cependant, si les paramètres d'entrées varient de manière trop arbitraire et rapide, la situation physique devient de plus en plus imprévisible. Ainsi, il y a un champs limité d'application pour un modèle physique en temps réel. Même un modèle physique à priori "parfait" ne peut pas prédire de manière fiable à long terme le comportement d'un système physique qui n'aurait jamais le temps de s'approcher d'un régime permanent.

1.2.6.4 La méthode explicite

La méthode la plus simple et la plus rapide de calculer ce qui va se passer à l'avenir est d'appliquer une approximation de différence finie sur le temps. Ainsi, une fois que les $\frac{\partial F}{\partial t}$ ont été calculées, on peut appliquer un intervalle régulier de Δt à l'opération 1.59.

$$F(t + \Delta t) = F(t) + \frac{\partial F}{\partial t} \times \Delta t \tag{1.59}$$

L'erreur dépend de la durée Δt et s'accumule au cours du temps entre deux régimes permanents. Il existe plusieurs méthodes de calcul utilisant la méthode explicite, certaines gardent le pas de temps Δt constant, d'autre le font varier en fonction des circonstances du calcul.

1.2.7 Le calcul multidimensionnel optimisé en vitesse

Les méthodes vues précédemment sont des méthodes "classiques". Mais d'autres méthodes optimisées ont été développées pour le calcul multidimensionnel en temps réel. On peut citer la plus récente : la méthode

PGD (Décomposition générale propre) issue de [20] que nous allons expliquer rapidement. Nous partons d'un problème typique, la résolution d'une équation physique dynamique de champs avec des conditions aux limites : le système 1.60.

$$\begin{cases} \frac{\partial u(x,y,z,t)}{\partial t} + expression(u(x,y,z,t)) = f(x,y,z,t) \\ u(\overrightarrow{ccl}) = CCL \end{cases} \tag{1.60}$$

On exprime ensuite la solution du problème comme une forme séparée (voir équation 1.61).

$$u(x,y,z,t) \simeq u_m(x,y,z,t) = \sum_{k=1}^{m} a_k(t)\phi 1_k(x)\phi 2_k(y)\phi 3_k(z) \text{ ou } \phi_k(x,y,z) \tag{1.61}$$

On peut ainsi poser le problème en réinjectant les formes séparées de ses éléments, ce qui va nous donner l'équation 1.62.

$$\begin{array}{l} \frac{\partial}{\partial t}\left(\sum_{k=1}^{m} a_k(t)\phi 1_k(x)\phi 2_k(y)\phi 3_k(z)\right) + expression\left(\sum_{k=1}^{m} a_k(t)\phi 1_k(x)\phi 2_k(y)\phi 3_k(z)\right) \\ = f(x,y,y,t) \end{array} \tag{1.62}$$

La procédure de calcul est un algorithme itératif avec le schéma suivant :

1. Initialisation de $\overrightarrow{u_m} = \overrightarrow{u_1}$
2. Enrichissement : $u_{m+1} = \sum_{i=1}^{m} \alpha_i \times \overrightarrow{\phi 1_i} \otimes \overrightarrow{\phi 2_i} \otimes \ldots + \overrightarrow{\phi 1_{m+1}} \otimes \overrightarrow{\phi 2_{m+1}} \otimes \ldots$
   - détermination des $\overrightarrow{\phi 1_{m+1}}, \overrightarrow{\phi 2_{m+1}}, \ldots$
   - normalisation des $\overrightarrow{\phi 1_{m+1}}, \overrightarrow{\phi 2_{m+1}}, \ldots$
3. Projection : on détermine les nouveaux α_i
4. Estimation de la convergence : on calcul le résidu Res_{m+1}
5. Retour au départ si le résidu n'est pas toléré.

Les différentes étapes sont expliquées ci-après.

1.2.7.1 L'enrichissement

On pose le système composé de 1.63 et 1.64.

$$\begin{array}{l} \sum_{k=1}^{n_e} \left([Exp_{x,k}] \overrightarrow{\phi 1_{m+1}} \otimes [Exp_{y,k}] \overrightarrow{\phi 2_{m+1}} \otimes \ldots \right) = \\ \sum_{j=1}^{n_f} \left(\overrightarrow{f_{x,j}} \otimes \overrightarrow{f_{y,j}} \otimes \overrightarrow{f_{z,j}} \otimes \ldots \right) - \sum_{k=1}^{n_e} \sum_{i=1}^{m} \alpha_i \left([Exp_{x,k}] \overrightarrow{\phi 1_i} \otimes [Exp_{y,k}] \overrightarrow{\phi 2_i} \otimes \ldots \right) + Res_m \end{array} \tag{1.63}$$

$$\overrightarrow{\phi 1_{m+1}} \perp Res_m, \overrightarrow{\phi 2_{m+1}} \perp Res_m, \ldots \tag{1.64}$$

Pour résoudre le système, on va suivre la sous procédure suivante :

1. Il faut projeter l'équation 1.63 sur tout les $\overrightarrow{\phi 1_{m+1}}, \overrightarrow{\phi 2_{m+1}}, \ldots$
2. On obtient une liste de formules du type : $\overrightarrow{\phi i_{m+1}} = Fo\left(\overrightarrow{\phi 1_{m+1}}, \overrightarrow{\phi 2_{m+1}}, \ldots\right)$
3. Les $\overrightarrow{\phi i_{m+1}}$ peuvent être trouvés par la méthode du point fixe.

1.2.7.2 La normalisation

Il s'agit simplement de normaliser les vecteurs $\overrightarrow{\phi 1_{m+1}}, \overrightarrow{\phi 2_{m+1}}, \ldots$, ce qui peut être fait avec la formule 1.65

$$\overrightarrow{\phi i_{m+1}} = \frac{\overrightarrow{\phi i_{m+1}}}{\left\| \overrightarrow{\phi i_{m+1}} \right\|} \tag{1.65}$$

1.2.7.3 La projection

La sous procédure de projection est la suivante :

1. On prend l'équation $\sum_{k=1}^{n_e}\sum_{i=1}^{m}\alpha_i\left([Exp_{x,k}]\,\overrightarrow{\phi 1_i}\otimes[Exp_{y,k}]\,\overrightarrow{\phi 2_i}\otimes\ldots\right)=\sum_{j=1}^{n_f}\overrightarrow{f_{x,j}}\otimes\overrightarrow{f_{y,j}}\otimes\overrightarrow{f_{z,j}}\otimes\ldots+Res_m$ où $m=m+1$
2. On la projette sur les $\overrightarrow{\phi 1_{m+1}},\overrightarrow{\phi 2_{m+1}},\ldots$ en prenant $Res_m=0$
3. On met cela sous forme d'un système $[M]\,\overrightarrow{\alpha}=\overrightarrow{b}$ où ${}^t\overrightarrow{\alpha}=[\alpha_1\alpha_2\ldots]$
4. On résout le système pour avoir tous les α_i

1.2.7.4 L'estimation de la convergence

Pour savoir quand arrêter les itérations, on calcule l'erreur avec la formule 1.66

$$Res_m=\sum_{k=1}^{n_e}\sum_{i=1}^{m}\alpha_i\left([Exp_{x,k}]\,\overrightarrow{\phi 1_i}\otimes[Exp_{y,k}]\,\overrightarrow{\phi 2_i}\otimes\ldots\right)-\sum_{j=1}^{n_f}\overrightarrow{f_{x,j}}\otimes\overrightarrow{f_{y,j}}\otimes\overrightarrow{f_{z,j}}\otimes\ldots \tag{1.66}$$

Si $\|Res_m\|>$ erreur tolérée, on recommence.

1.2.7.5 Son utilisation

On observe que le développement et l'utilisation de cette méthode est complexe. Par ailleurs, c'est une méthode mathématique pure qui efface le sens physique des équations. Le développement d'un modèle multi-physique multidimensionnel est une tache complexe. Qui dit complexité dit erreurs de développement et débogage. Nous avons donc choisi de ne pas utiliser cette approche mais plutôt de rester proche de la physique qui permet de garder une meilleur compréhension du fonctionnement du modèle et donc si besoin d'agir dessus pour le corriger.

1.3 Les possibilités matérielles

1.3.1 CPU

Le CPU (Central Processing Unit) ou processeur est une machine capable de réaliser le travail d'une autre machine en exécutant les instructions d'un programme informatique. C'est donc un système très flexible qui peut faire tout ce qu'on lui demande.

1.3.1.1 La programmation pour CPU

Pour construire un programme informatique, on écrit une série d'instructions dans un langage qui sera lu par le processeur : l'assembleur. Mais il y a plusieurs moyens d'obtenir ce programme informatique, et notamment :

1. le programmer directement en assembleur ;
2. utiliser un compilateur qui transformera un programme écrit en un autre langage (C, C++, Pascal, ...) en assembleur ;
3. passer par un logiciel (Basic, Java, Matlab, ...) qui interprète en temps réel un programme écrit en un autre langage étape par étape.

Ces moyens sont classés de celui qui donne les programmes les plus rapides à celui qui donne les programmes les plus lents. En effet, l'assembleur peut permettre de faire un programme qui sera exécuté plus rapidement que les autres si on connaît bien le processeur. A l'inverse, un programme interprété étape par étape par un logiciel sera exécuté beaucoup plus lentement car il faudra lire et comprendre chaque étape avant de pouvoir l'exécuter. Alors pourquoi tout n'est pas fait en assembleur ? Car il est difficile de construire des choses complexes en assembleur. Plus un langage de programmation est proche de la machine, moins il est ergonomique.

1.3.1.2 La représentation des nombres dans la machine

C'est une question importante, car elle conditionne la précision des calculs. Il existe deux méthodes principalement utilisées pour représenter les nombres réels dans un processeur :

— la représentation à virgule fixe (voir figure 1.38) ;
— la représentation à virgule flottante (voir figure **??**).

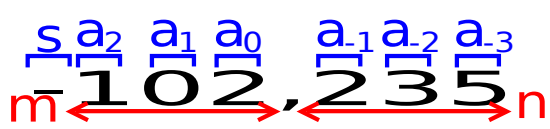


FIGURE 1.38 – Nombre exprimé en virgule fixe

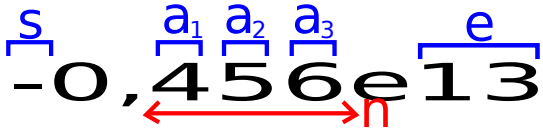


FIGURE 1.39 – Nombre exprimé en virgule flottante

Tout est codé en base deux sur des bits. Par exemples, pour une représentation en virgule flottante, on aura une organisation des bits comme dans la figure 1.39. Ainsi, les valeurs réelles représentées dans ces bits



FIGURE 1.40 – Représentation des nombres à virgule flottante sur des bytes

peuvent être respectivement calculées pour la virgule fixe et la virgule flottante avec les formule 1.67 et 1.68.

$$x_\beta = (-1)^s \left(\sum_{k=-m}^{n} a_k \beta^k \right) \text{ avec } \beta = 2 \text{ la base} \tag{1.67}$$

$$x_\beta = (-1)^s \left(\sum_{k=0}^{n} a_k \beta^{e-k} \right) \text{ avec } \beta = 2 \text{ la base} \tag{1.68}$$

Ainsi, c'est le nombre de chiffres significatifs qui est limité. C'est pourquoi la somme d'un nombre très grand avec un nombre très petit donnera seulement le nombre très grand sans aucun ajout. Il en résulte la nécessité d'avoir des nombres d'amplitude assez proches les un des autres lors des calculs pour ne pas créer des erreurs importantes.

1.3.1.3 Les technologies de processeur

Aujourd'hui, les technologies de processeurs sont quasiment toutes électroniques. Un CPU se présente donc comme un composant électronique intégré. Il y a trois caractéristiques génériques qui renseignent sur leur performance :

— leur fréquence qui indique leur puissance de calcul en Hz ;
— la mémoire vive ou interne dont ils disposent qui limite la taille et la quantité des informations qui peuvent être traitées par les programmes qui tournent sur ces processeur ;
— le nombre de cœurs qui indique combien de procédures le processeur peut faire en même temps. C'est ce nombre de cœurs qui donne le nombre d'agents pouvant tourner simultanément de manière optimale.

Ce qui est notable avec les CPU c'est la diversité de modèles et d'application qui leurs sont associés. Il peut y avoir des processeurs miniatures avec des puissances de calcul et une mémoire vive interne très faible que l'on appellera microcontrôleur jusqu'à des processeurs multicœurs ultra puissant de l'ordre du GHz accompagnés d'une mémoire vive importante que l'on trouvera dans les ordinateurs. Ainsi, en fonction des besoins en puissance de calcul et en mémoire vive du modèle, il peut aussi bien tourner sur un ordinateur sur puissant que sur une carte électronique embarquée avec un microcontrôleur. Cela est à prendre en compte pour les applications embarquées.

1.3.2 GPU

Le GPU (Graphics Processing Unit) est un processeur spécial qui a été initialement conçu pour gérer des opérations graphiques en temps réel. On en trouve dans toutes les cartes graphiques.

1.3.2.1 Structure

Le GPU est composé d'une matrice de CPU comme on peut le voir dans la figure 1.41. Ainsi, un GPU est capable de réaliser une grande quantité d'opérations simples en même temps. C'est un processeur spécialisé dans les calculs massivement parallèles. Sur certaines applications où le calcul suivant ne nécessite pas d'avoir fait le calcul précédent, sa puissance de calcul est considérablement plus importante que celle d'un CPU.

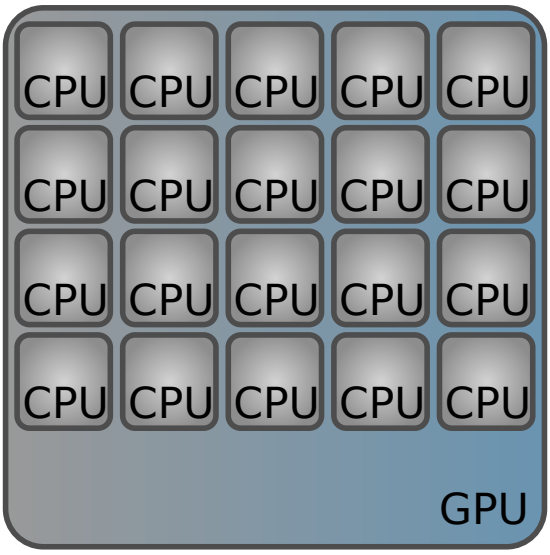


FIGURE 1.41 – Structure d'un GPU

1.3.2.2 Un type spécial de programmation

Pour un GPU, on ne va pas programmer une procédure à suivre dans l'ensemble, mais une procédure à suivre pour chaque case d'une matrice. Ainsi, les GPU sont fait pour ne travailler que sur des matrices où chaque terme de la matrice sera traité en même temps. La figure 1.42 illustre le fonctionnement d'un programme tournant sur GPU.

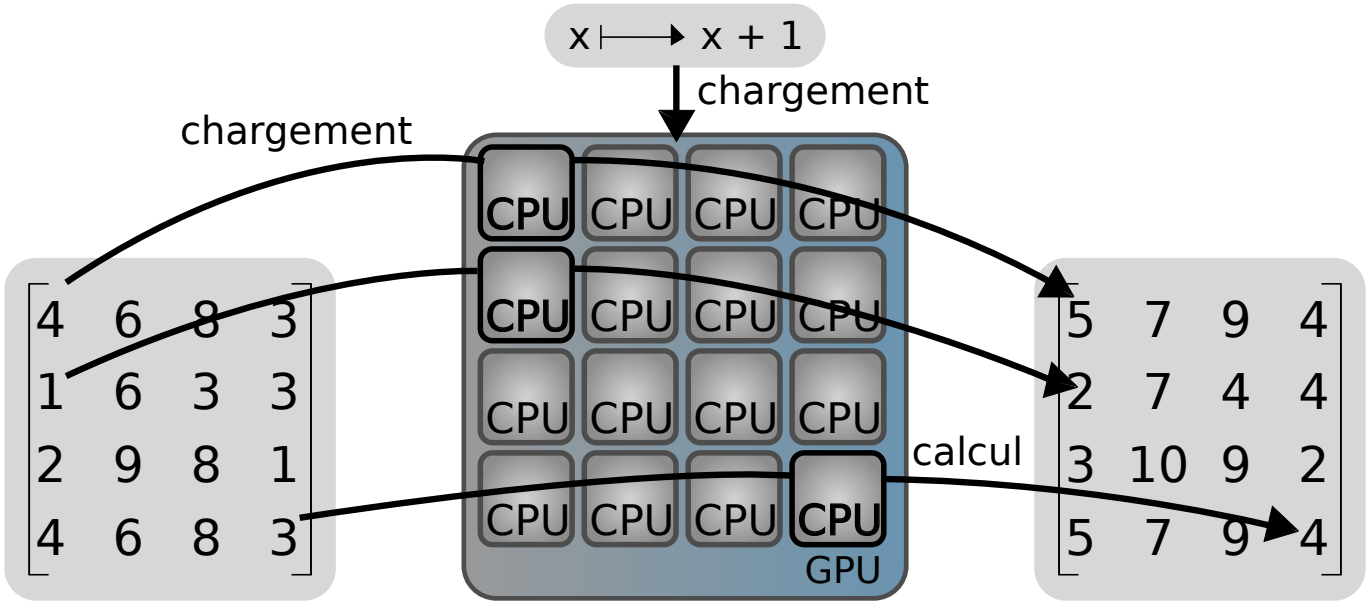


FIGURE 1.42 – programme de calcul sur GPU

Par ailleurs, les programmes utilisés par les GPU sont en général chargés par un programme présent dans un CPU qui doit aussi lui fournir les matrices sur lesquelles il va travailler. Ainsi, il faut prendre en compte les temps d'échanges CPU/GPU lorsqu'ils sont conséquents pour s'assurer que l'usage d'un GPU en support soit vraiment intéressant pour une application donnée.

On passera par des libraries pour utiliser un GPU. Il en existe plusieurs, certaines dépendent des marques de GPU comme la librarie CUDA et d'autres sont universelles comme la librarie OpenCL.

1.3.3 FPGA

Un FPGA est un composant spécial qui contient des portes logiques programmables. On peut lui faire prendre la forme du circuit électrique que l'on veut. C'est très intéressant car cela ouvre la possibilité de concrétiser un programme informatique directement en un circuit électrique. Cette forme de programmation peut créer des programmes 10000× plus rapide car il n'y a plus aucune forme d'émulation, tout se fait directement au nivau électrique. Certaines applications l'utilise déjà en vision artificielle.

Cependant, la programmation d'un FPGA est d'un niveau très bas (proche machine), elle est donc très peu ergonomique pour faire des programmes complexes. On utilise en général un langage descriptif appelé VHDL pour faire ces programmes. C'est une difficulté supplémentaire que le VHDL ne soit pas un langage de programmation classique, mais un langage descriptif qui décrit une structure. Ainsi, il faut repenser son programme différemment pour en faire un programme pour FPGA.

Une autre limite du FPGA c'est la complexité maximale des programmes que l'on peut mettre dedans. Un FPGA contient une quantité de portes logiques limitée, ce qui veut dire que le programme ne peut pas dépasser une certaine taille. Malheureusement des opérations telles que les multiplications utilisent beaucoup de portes logiques. Ainsi, si l'on veut profiter de la performance d'un FPGA en faisant tous nos calculs en direct, il nous faut rapidement une quantité importante d'interrupteurs.

1.4 Les problématiques liées à la gestion du projet

La construction d'un modèle de pile à combustible sur plusieurs dimensions en temps réel est un travail difficile. Mais la problématique va au delà. Prenons comme exemple la construction d'un château de cartes. Si on construit un château de cartes à deux étages, on aura une certaine difficulté à le mettre en place. Si maintenant on construit un château de cartes de quatre étages ; la difficulté de construction est-elle deux fois supérieur à celle du château de deux étage ? La réponse est non, chaque ajout de cartes est rendu plus difficile par la présence des cartes précédentes sur lesquels il faut s'appuyer. On a donc une difficulté qui croit en exponentiel au fur et à mesure que l'on augmente la taille de notre château de carte. Il en va de même pour la modélisation d'une pile à combustible, chaque formule, chaque solution mathématique ou informatique sert de support aux formules suivantes. Ainsi, il est impossible (ou très difficile) de construire ce type de modèle sans une réflexion stratégique et une organisation appropriée.

Dans la suite, les différentes problématiques liées au développement de ce modèle sont exposées afin de justifier les stratégies de développement utilisées.

1.4.1 La modélisation temps réel, un espace pluridisciplinaire d'innovation

Il y a un triple défi dans ce sujet :
- faire un modèle précis de pile à combustible ;
- obtenir un modèle en plusieurs dimensions (2D/3D) pouvant faire apparaître des phénomènes locaux ;
- obtenir un modèle qui tourne en temps réel.

Il faut donc de la physique, des mathématiques, de l'informatique mais aussi de la gestion de projet et d'organisation.

C'est donc un problème d'innovation pluridisciplinaire. Dans l'ouvrage de synthèse sur les sciences cognitives [22], le fonctionnement de la pensé humaine est modélisé en laissant apparaître une grande dépendance entre les facultés de perception et les connaissances. On peut penser que le fait d'utiliser une personne combinant ces domaines de compétences résout le problème, mais il n'en est rien. En effet, si on en croit la PNL (programmation neuro-linguistique), on ne peut pas penser à tout en même temps, alors notre attention se fixe naturellement sur certains détails et sur certaines procédures. Ces différentes manières de percevoir les choses sont, comme les connaissances, des caractéristiques intrinsèques des spécialistes. Ainsi, une personne

ayant des connaissances en physique et en mathématique qui se focalisera sur la partie modèle physique ne sera pas ou peu capable de remarquer des éléments clés mathématiques au même moment et les bonnes idées de mathématiques auront moins de chance de lui venir en même temps.

C'est pourquoi, dans la suite, on considérera la situation comme si on avait une équipe de trois spécialistes :
— un physicien qui connaît la pile à combustible ;
— un mathématicien spécialisé dans les méthodes numériques ;
— un informaticien spécialisé dans la programmation temps réel.

Notons que la séparation du mathématicien et de l'informaticien implique que l'on ne considère pas aujourd'hui qu'il y ait une discipline à part entière de programmation de calcul numérique multidimensionnel en temps réel.

Notre problème devient un problème d'ingénierie simultanée ou de combinaison de schémas mentaux.

1.4.1.1 La place de chacun

Chaque spécialiste a un rôle à jouer et dispose de tactiques pour le remplir. On propose de répartir les taches entre nos trois spécialistes de la manière suivantes.

1.4.1.1.1 Le physicien

Le physicien dit ce qu'il faut modéliser et ce qui peut ne pas l'être. Ainsi, le raisonnement part de son opinion sur ce qu'il faut faire. Il résout des problématiques telles que :
— Que va-t-on modéliser ? (le choix des phénomènes pertinents)
— Quel niveau de précision faut-il ? (pour assurer la stabilité physique et garder un comportement cohérent)
— Peut-on négliger tel aspect d'un phénomène ? (les hypothèses simplificatrices)
— Quel est le comportement de modèle auquel on peut s'attendre ? (des prévisions sur les résultats pour la validation et le débogage)

1.4.1.1.2 Le mathématicien

Le mathématicien a une fonction très transverse :
— il aide les autres à y voir plus clair dans les réponses à leurs problématiques (Le problème est-il bien posé ?) ;
— il propose des méthodes et des outils face à des cas (éléments finis, prédictions dynamiques, etc) ;
— il évalue la justesse de certaines idées (l'algorithme de calcul est-il juste ? qu'implique l'hypothèse physique ?).

1.4.1.1.3 L'informaticien

L'informaticien est un générateur de contraintes et de solutions :
— il refuse des solutions proposées par le mathématicien en raison de leurs complexités (contraintes liées au fonctionnement en temps réel) ;
— il propose, comme le mathématicien, des méthodes et des outils face à des cas (des algorithmes de calculs spéciaux pour le temps réel).

1.4.1.2 L'organisation du travail

Le défi de l'ingénierie simultanée, c'est d'obtenir la synergie. Imaginons les trois résultats de combinaison de puissance de travail nommés ci après :
— en conflit : $1 + 1 + 1 = 2$
— en masse : $1 + 1 + 1 = 3$
— en synergie : $1 + 1 + 1 = 4$

La synergie, c'est quand on obtient plus que la somme des puissances de travail de chacun. C'est ici un problème très important, car l'innovation de solutions nouvelles en découle souvent. En effet, si les méthodes numériques ont été adaptées pour les problèmes physiques, ce n'est pas aussi évident pour l'adaptation des méthodes numériques multidimensionnelles aux contraintes de la programmation temps réel. Seules certaines

méthodes spécifiques existent (comme la méthode PGD) mais elles ne sont plus alors adaptées à la physiques... Ainsi, pour innover dans de nouvelles solutions adaptées, il faut faire cohabiter ces disciplines d'une nouvelle manière.

1.4.1.2.1 L'organisation par la recherche heuristique

On peut imaginer une méthode de travail où on réfléchit sur le modèle physique avant de développer un modèle mathématique, puis, où on réfléchit ensuite à sa programmation et à si le programme sera assez rapide. Si tel n'est pas le cas, on réfléchit à nouveau sur les mathématiques. Si les mathématiques n'apportent pas d'idée que l'on peut programmer en un programme assez rapide, on revient à la physique pour chercher une autre manière de modéliser qui soit un peu moins précise etc. Ce problème peut être perçu comme un problème de recherche heuristique. A chaque étape, il est possible de faire des choix, à la fin un certain cheminement mène au résultat voulu. La figure 1.43 montre cette procédure. Cette possibilité revient à un travail en difficulté ($1 + 1 + 1 = 2$) car un certain nombre de tentatives sont nécessaires avant que le travail soit fait. Par ailleurs, on obtiendra qu'un assemblage d'idées.

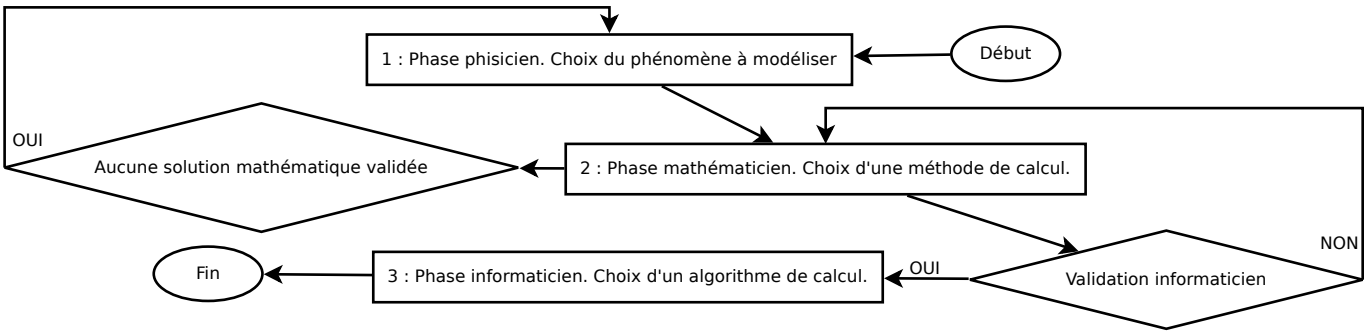


FIGURE 1.43 – Algorithme d'organisation de la phase de conception

Dans la discipline des intelligences artificielles, on utilise parfois des méthodes pour optimiser la recherche du bon cheminement grâce à l'application de règles locales. L'exemple le plus simple, c'est l'algorithme qui permet de calculer le chemin le plus court entre deux villes. Dans ce cas, au lieu d'essayer toutes les possibilités d'itinéraires, de les mesurer et de les comparer pour choisir la plus courte, on va se concentrer sur les itinéraires qui se rapprochent le plus d'un vol d'oiseau. Ainsi, sans avoir la garantie du meilleur résultat possible, on sera sûr d'en avoir un suffisamment bon. L'application de ce genre de règles peut se faire dans notre algorithme 1.43. On peut faire :

1. Phase physicien :
   — si ce type de phénomène mène à des programmes de calcul trop complexes, en choisir un autre.
2. Phase mathématicien :
   — si ce type de méthode mène à des programmes de calcul trop complexes, en choisir un autre.
3. Phase informaticien :
   — faire le programme connu qui donne les meilleurs performances.

Mais pour cela, il faudrait déjà avoir de l'expérience. Une sorte d'archive statistique qui nous dirait par exemple 80% des fois où on a fait cela dans de telles circonstances, la solution s'est avérée adaptée. Il est aussi possible d'utiliser une approche plus formelle et moins intuitive :

1. Phase physicien :
   — choisir la possibilité la plus simple.
2. Phase mathématicien :
   — choisir la possibilité la plus simple.
3. Phase informaticien :
   — faire le programme connu qui donne les meilleurs performances.

Mais cela donne un résultat peu optimal. Ou alors, il faut faire un compromis dans ses choix en disant je suis près à prendre tant de risques que ça ne marche pas pour essayer d'avoir quelque chose de plus précis, etc. Ces méthodes permettent de s'approcher d'une combinaison en masse ($1 + 1 + 1 = 3$). Mais elles ne

garantissent pas de trouver les solutions inattendues les plus optimales que l'on considéreraient équivalentes à des solution de synergie ($1 + 1 + 1 = 4$) et qui ne découlent pas d'un simple assemblage d'idées séparées.

1.4.1.2.2 La nécessité d'une démarche créative

Pour pouvoir avoir des solutions de type $1 + 1 + 1 = 4$, il faudrait qu'il existe une science ou un art de la modélisation temps réel qui dise : pour tel type de groupes de phénomènes il faut utiliser telles méthodes mathématiques et informatiques, etc. Ensuite, ces règles pourraient changer en fonction des nouvelles découvertes de la même manière que pour les autres domaines scientifiques. Mais les domaines de ces trois spécialités restent bien séparés car elles sont utilisées ailleurs indépendamment. Ainsi, les idées de solutions innovantes pluridisciplinaires produites dans cette thèse sont issues d'une approche créative.

1.4.2 Un développement "infernal"

Les développements sont toujours accompagnés d'un travail de débogage important (on parle parfois de 90% du temps de développement). Dans cette section, on cherche à modéliser cette problématique pour en tirer des solutions visant à optimiser la vitesse de développement du modèle.

1.4.2.1 Problématique

Un modèle physique programmé n'est pas une entité entièrement théorique car c'est un programme. Un programme est un objet virtuel qui a pourtant une existence réelle, il faut l'écrire. L'exécution du programme se fait sur une machine avec les contraintes et les imperfections déjà citées. De plus, on avait utilisé la comparaison de la construction d'un modèle temps réel à la construction d'un château de cartes. La construction d'un château de cartes a cette autre propriété qu'elle est en un sens un procédé récurrent en cascade qui cumule des erreurs et peut influer le comportement des ajouts suivants. Enfin, lorsque qu'il y a une innovation, il y a des surprises. On ne peut pas être totalement sûr que quelque chose de nouveau va fonctionner avant de l'avoir essayer. Finalement, lorsque l'on construit quelque chose, il y a toujours des problèmes.

Ainsi, dans ce projet, les erreurs peuvent être à un niveau simple comme des erreurs de codage ou à des nivaux plus compliqués comme une erreur dans une formule physique ou mathématique. Certaines erreurs sont simple à localiser mais d'autres peuvent rester discrètes pendant longtemps avant de générer des problèmes lors de l'ajout d'un module supplémentaire.

Pour toutes ces raisons, il n'est tout simplement pas possible en pratique de prédire ce qui va se passer lorsque l'on va lancer notre programme pour la première fois. Donc, on ne peut pas vraiment faire de planification de manière rigoureuse car le développement est infernal.

Ainsi, concevoir entièrement le modèle avant de le programmer entièrement revient à construire un château de cartes les yeux fermé. On ne peut donc pas optimiser le développement du modèle par une bonne planification.

1.4.2.2 Conséquences et solutions

Comme on ne peut pas prédire les résultats en pratique, il faut avancer par petit pas successifs de conception, programmation, débogage. Ainsi, pour gagner en vitesse, il faut optimiser le cycle de débogage.

Voici un morceau de programme du modèle en C dont le sens est $NC = -dx...$ et $NG = \frac{-I}{2F \times 200}...$:

```
conf->NC[i+0+(j+0)*conf->L+(k+0)*conf->L*conf->l]=-conf->dx[i+0+(j+0)*conf->L ...
conf->NG[i+0+(j+0)*conf->L+(k+0)*conf->L*conf->l]=-conf->I[0]/2./conf->F[0]/200 ...
```

On remarque que c'est un code assez peu praticable, il est difficile de visualiser ce qui se passe vraiment pour faire des modifications. La première mesure à prendre et donc de construire un compilateur qui permettra de modifier le modèle rapidement avec un langage plus simple.

Par ailleurs, pour pouvoir déboguer un modèle il faut pouvoir voir ses résultats. Il faudra donc aussi développer une interface homme/machine qui permettra de visualiser rapidement ce qui se passe lors des essais. C'est pourquoi une interface d'affichage graphique 2D en temps réel a été développée et que tous les paramètres du modèle sont initialisés à partir d'un fichier de configuration où on peut les retrouver et les éditer facilement pour des tests.

Enfin, comme on sait que le débogage est une part importante du temps de développement, il serait intéressant de ne jamais avoir à déboguer plusieurs fois les mêmes parties. Ainsi, on programme les parties par modules que l'on débogue séparément avant de les utiliser et de les réutiliser. Outre le temps gagné en ne déboguant pas plusieurs fois les mêmes parties, cela facilite pendant les débogages la localisation des erreurs complexes.

1.4.3 Spéculation sur les investissements techniques judicieux

On se pose maintenant la question, quels sont les modules les plus pertinents à développer ? On est ici face à un problème de finance. Le meilleur investissement et celui qui maximise le résultat de l'équation 1.69.

$$P = \frac{Gain_{future}}{Cout_{present}} \tag{1.69}$$

L'estimation des coûts présents $Cout_{present}$ se fait simplement en fonction de la complexité et des ressources du moment. Ce qui est difficile à estimer ce sont les gains futurs $Gain_{future}$ associés à la réalisation d'un module. Pour se faire, on propose d'estimer la probabilité qu'un type de raisonnement soit utilisé plusieurs fois dans le modèle.

Il est possible de classer toutes les formules et phénomènes selon des critères choisis pour former des groupes et des sous groupes. La modulation d'un morceau de programme qui vient d'être programmé doit se faire pour être paramétrable sur un des groupes ou des sous groupes déjà définis. Plus un groupe ou un sous groupe de phénomènes est peuplé et plus les gains futurs ont de chances d'être importants. Cependant, il faudra valider l'utilité potentielle pour chaque individu du sous groupe choisi en fonction des autres groupes auxquels il appartient.

Une fois qu'un nouveau module est produit, il est débogué. Ensuite, un programme spécial va générer une fonction capable de réécrire ce module. Cette fonction s'appuiera sur un code dans un langage plus simple pour réécrire le module différemment en fonction des besoins des autres cas. Cela permet de grandes économies de temps qui sont indispensables à l'obtention de résultats dans un délais raisonnable malgré les phases d'essais/erreurs.

1.5 Conclusion partielle

La pile à combustible est un générateur électrique qui s'appuie sur une réaction électrochimique. Il existe une panoplie de technologie. Nous avons choisi de travailler sur la technologie PEM. Une pile à combustible peut être vue à trois nivaux :

— son nivau globale qui est le stack ;
— le niveau de la cellule qui est l'organe de base où a lieu la transformation énergétique ;
— les layers qui sont les différentes couches fonctionnelles de la cellule.

En fonction du courant qu'une pile à combustible fournit, ils y a trois types de pertes qui dominent :

— les pertes par activation pour les faibles courants ;
— les pertes par effet Joule pour les courants intermédiaires ;
— les pertes par concentration pour les courants importants.

La pile à combustible devient un peu plus intéressante d'un point de vue économique à cause de la hausse du prix du pétrole, d'un point de vue politique pour respecter le protocole de Kyoto et pour réduire sa dépendance aux énergies fossiles. Bien que d'un point de vue purement énergétique et durable la pile à combustible soit un engrenage d'une chaîne énergétique presque 10 fois plus efficace que la chaîne classique de consommation d'énergies fossiles, cette technologie n'est pas intéressante économiquement parlant. En effet, la présence de stocks naturels de pétrole que l'on a pas besoin de produire à partir d'énergies durables le rend beaucoup plus attractif. Par ailleurs, les technologies de combustion sont mieux maîtrisés et beaucoup plus abordables. Ainsi, sans les implications politiques, le développement de la pile à combustible est un investissement à très long terme. Cependant, la pile à combustible reste une technologie intéressante à court terme pour certaines applications spécifiques telles que les systèmes électriques nécessitant une haute autonomie énergétique.

Il y a déjà beaucoup de modèles réalisés sur la pile à combustible et la modélisation multi physique multidimensionnelle en temps réel apparaît comme une étape suivante logique pour poursuivre ces travaux. Tous

les phénomènes connus dans la pile peuvent être modélisés en étant ajoutés à des équations différentielles, et notamment :

— les équations de Navier-Stockes pour les phénomènes fluidiques ;
— l'équation de Fourier pour les phénomènes thermiques ;
— l'équation d'Ohm pour le domaine électrochimique.

Ces formules sont en général composées de termes de source et de termes de flux. Grâce au travail déjà réalisé dans les autres modèles, il a été possible d'extraire et de reformuler toutes les expressions mathématiques des phénomènes et de les associer à ces termes.

On remarque que le vieillissement fait intervenir des phénomènes de corrosion, de pollution, de déplacement de matière et des détériorations mécaniques. La chaleur, l'humidité, la tension et le courant sont des facteurs catalyseurs directs ou indirects de ces mécanismes. Il peut donc être utile de connaître leur répartition.

Afin de réaliser les calculs nécessaires, il faut passer par des méthodes numériques. Le problème doit être bien posé et la solution numériquement stable. Mais il y a aussi un problème de complexité à gérer car le programme qui fera les calculs doit tourner en temps réel. Des outils classiques tel que la recherche dichotomique, la méthode de Gauss-Jordan, les méthodes de calculs par éléments finis et la prédiction dynamique sont retenus bien qu'il existe d'autres méthodes plus performantes, en raison de leur caractère modulaire et simple qui peuvent faciliter la réalisation et le débogage. Il est aussi important de considérer les limites mathématiques possibles telles que celles définies par la théorie du chaos.

Ensuite, il faut étudier les supports de calculs qui peuvent être utilisés pour faire tourner le programme et notamment :

— le CPU qui est universel, flexible mais plus lent ;
— le GPU qui permet un calcul massivement parallèle mais qui est moins flexible et plus rare ;
— le FPGA qui est potentiellement le plus rapide mais dont l'implémentation de programmes compliqués pose problème.

Pour conclure, on peut dire que la problématique de ce projet est pluridisciplinaire. On cherche à combiner des idées et des concepts venant de différentes spécialités pour produire un système nouveau. Bien que des analogies avec l'ingénierie simultanée et les systèmes d'intelligence artificielle soient tentées pour s'attaquer à cette problématique de la combinaison des idées, aucune méthode de travail spécifiquement liée à cette combinaison n'a pu être retenue. Ainsi, cette problématique reste ouverte. Cependant, analyser les contraintes potentielles du projet permet de s'organiser en amont et adopter une technique de travail facilitant les essais/erreurs et diminuant ainsi le temps de développement des prototypes.

Chapitre 2

Conception du modèle

2.1 Le modèle

2.1.1 Le type de modèle

Les modèles physiques sont catégorisés selon certains critères qui font des catégories auxquelles ils appartiennent (voir [28]) :

— la dimension spatiale (0D,1D,2D,3D) ;
— la nature temporelle (statique ou dynamique) ;
— le type de formules utilisées (analytique, semi-empirique ou empirique) ;
— l'espace modélisé (le stack, la cellule, les couches individuelles).

Comment peut-on catégoriser le modèle de cette thèse ? En aucune manière en lui attribuant une ou plusieurs de ces étiquettes. En effet, l'objectif de créer un modèle qui soit à la fois multidimensionnel et en temps réel est un défit technologique qui met en défaut les principes classiques de la modélisation.

Comme il a été expliqué avant, ce modèle est issu d'un espace pluridisciplinaire d'innovations. Si un choix semble cohérent au physicien, rien ne dit que l'informaticien soit d'accord, ni même le mathématicien. Ainsi, le physicien n'est plus libre de choisir si son modèle (entité de base du physicien) aura telle ou telle autre caractéristique car la décision doit être discutée avec l'informaticien et le mathématicien pour qui les entités de bases sont bien différentes. Ainsi, il faut des compromis pour chaque partie du modèle. La conséquence est un modèle morcelé selon les exigences des trois disciplines. Certaines parties seront statiques, d'autres dynamiques, elles seront calculées à différentes échelles et en utilisant des formules de toutes natures en fonction des contraintes des autres disciplines. Certaines parties du modèle seront en 2D et d'autres en 3D.

2.1.2 La structure du modèle

Le modèle est à l'échelle d'une cellule de pile à combustible, car c'est l'unité physique de base du système. Il est possible de calculer la tension de la pile à combustible en multipliant la tension d'une cellule par le nombre de cellules dans le stack. Il est aussi possible de modéliser chaque cellule une par une et de sommer leur tension. La structure du modèle n'a pas été pré définie à cause de son "développement infernal". Elle s'est formée naturellement au fur et à mesure des réalisations avec des phases de restructurations et de débogages successives. La figure 2.1 donne un aperçu de la structure générale finale obtenue.

Les flèches rouges représentent les paramètres venants de l'environnement :

— T_{cool} représente la température d'entrée du fluide de refroidissement ;
— N_{cool} représente le débit d'entrée du fluide de refroidissement ;
— IN représente le débit d'entrée des gaz réactifs (anode(H_2) et cathode(O_2)) ;
— I représente le courant tiré de la pile à combustible.

Ensuite, on a les températures fournies par le modèle thermique :

— T_{fluid}, la répartition (le champs) de température des réactifs dans les canaux et la couche de diffusion ;
— T_m, la répartition de température de la membrane ;
— T_{ca}, la répartition de température de la couche catalytique.

Puis les grandeurs fluidiques calculées par le modèle fluidique :

— ρ_{ca}, la répartition des densités molaires de réactifs dans la couche catalytique ;
— N, la répartition des flux de gaz dans les canaux et la couche de diffusion.

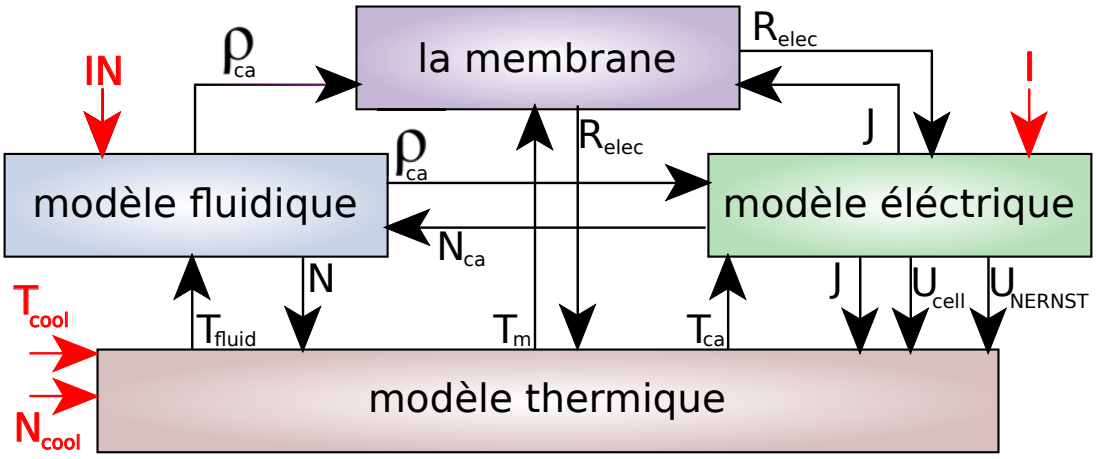


FIGURE 2.1 – Structure générale du modèle

Le modèle de la membrane est particulier car il est majoritairement empirique et contient des phénomènes très spécifiques qui lui sont propre et qui doivent être modélisés avec d'autres approches numériques et informatiques. Il permet d'avoir la répartition des résistances électriques R_{elec}.
Enfin, le modèle électrique renseigne :

- J la répartition des courants électriques au nivau des couches catalytiques ;
- U_{cell}, la tension électrique aux bornes de la cellule ;
- U_{NERNST}, le potentiel thermodynamique de la cellule.

2.1.3 L'intégration du modèle

2.1.3.1 L'intégration au stack

Comme le modèle est un modèle de cellule de pile à combustible, il ne peut pas être utilisé en l'état comme émulateur de pile à combustible. Dans la thèse [27], deux solutions sont proposées pour parer à cette difficulté et calculer la tension du stack :

- prendre un modèle de cellule et multiplier sa tension par le nombre de cellules dans le stack ;
- faire tourner autant de modèles de cellules qu'il y a de cellules dans le stack et sommer leur tension.

Dans notre cas, le modèle étant déjà assez lourd, on est obligé de choisir la première de ces deux solutions (à moins d'être prêt à faire tourner un grand nombre d'ordinateurs en même temps). Il est cependant à déplorer une erreur due au fait que la température des cellules sur les extrémités du stack est plus basse que dans les cellules du centre. La figure 2.2 reprend les résultats de la thèse [27].

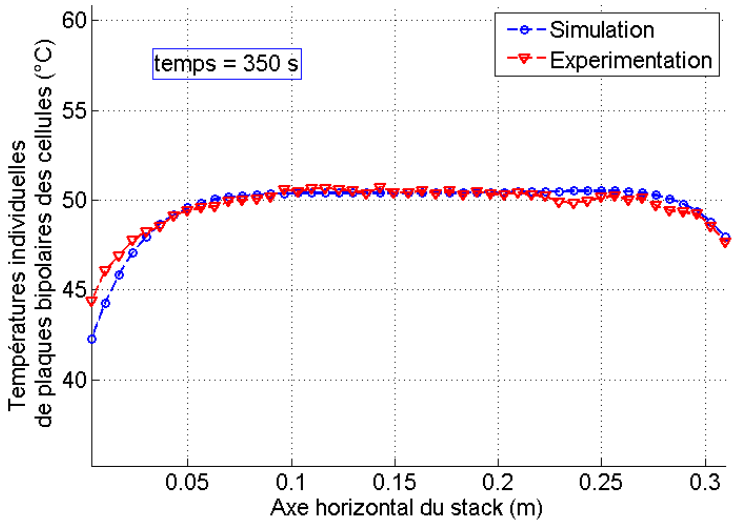


FIGURE 2.2 – Répartition de la température des cellules le long d'un stack [27]

Cependant, plus le stack comporte de cellules, plus il est long et donc moins l'erreur de cette hypothèse est importante. C'est dans cette même idée que l'on gère les circuits de refroidissement. Pour chaque cellule, le circuit de refroidissement du coté anode et du coté cathode sera considéré comme un seul et même circuit de refroidissement. En effet, comme toutes les cellules sont considérées comme identiques, la cathode d'une cellule voisine partageant le même canal de refroidissement que l'anode de la cellule adjacente, et, est identique à la cathode de cette même cellule.

2.1.3.2 L'intégration des modules auxiliaires

Les modules auxiliaires sont soit modélisés par des modèles simples (des formules de calcul direct liées au courant) lorsque le modèle tourne librement, soit les grandeurs qu'ils manipulent sont directement prélevées sur le système réel lors d'une validation expérimentale ou d'un accompagnement de la simulation en parallèle d'une pile réelle en fonctionnement. Les modèles de ces auxiliaires varient beaucoup d'une pile à combustible à l'autre. On a dans la thèse [27] l'équation 2.1 pour modéliser le débit volumique en $m^3 \cdot s^{-1}$ de gaz entrant dans la cathode d'une cellule en fonction du courant I pour une pile Ballard Nexa $1.2kW$. Un autre modèle plus récent sur ce même compresseur a été développé avec des réseaux de neurones dans [86].

$$Nin = \left(6.04e-5I^4 - 4.71e-3I^3 + 9.65e-2I^2 + 1.05I + 16.1\right)\frac{1.2}{60000} \tag{2.1}$$

Les autres auxiliaires, tel que le module assurant le débit du fluide de refroidissement, répondent généralement à une stratégie simple basée sur des intervals de températures.

2.2 Modèle fluidique

2.2.1 Vue d'ensemble

Le modèle fluidique permet de considérer les phénomènes de diffusion et de convection des gaz de part et d'autre de la membrane. Il a été séparé en deux modèles fluidiques dans une cellule de pile à combustible : un pour l'anode et un pour la cathode. Ils sont très proches car ils s'appuient sur les mêmes phénomènes. Dans chacun de ces sous modèles, on distingue deux modules qui viennent naturellement de la différence des prédominances des phénomènes en jeu : les canaux et la couche de diffusion. Dans les canaux, la convection est prédominante et incluse dans le plan de la cellule. Dans la couche de diffusion, c'est la diffusion qui est prédominante et principalement transversale au plan de la cellule.

La figure 2.3 représente ces deux modules et la manière dont ils interagissent entre eux et avec l'extérieur du système.

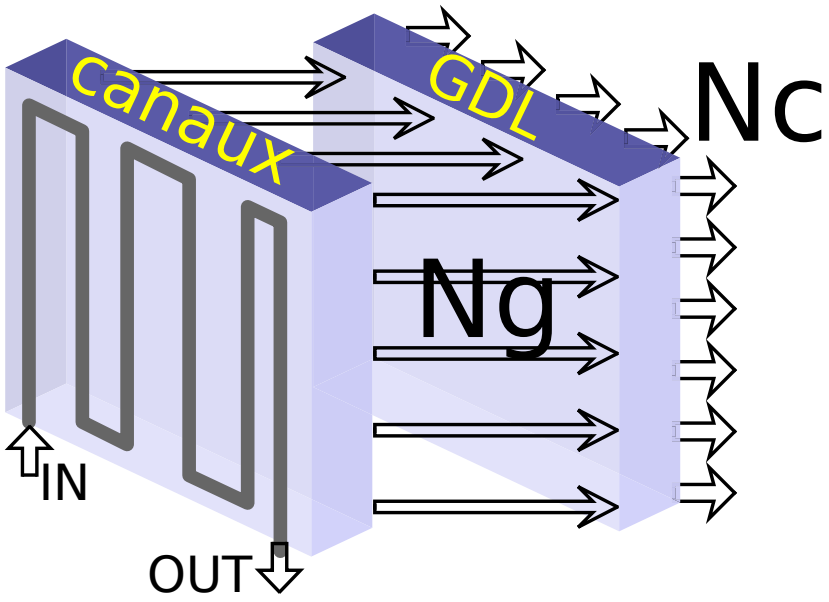


FIGURE 2.3 – Schéma des modules internes aux modèles fluidiques d'une cellule de pile à combustible

N_g est la répartition de flux de gaz qui vont des canaux vers la couche de diffusion (GDL). **IN** le flux de gaz entrant dans la cellule. **OUT** le flux de gaz sortant de la cellule. $N_c = N_{ca}$ est fournie par le modèle électrique.

La dynamique des phénomènes fluidiques de ces deux modules est rapide (de l'ordre de la μs). Il est donc délicat de tenter une modélisation dynamique pour une application en temps réel. C'est pourquoi, on décide que nos modèles fluidiques seront statiques.

Le déplacement des gaz dans la cellule de pile à combustible influence la distribution de la chaleur et des concentrations en réactifs au niveau de la couche catalytique où a lieu la réaction électrochimique. La concentration en réactifs et la température dans la couche catalytique influencent la répartition des courants et le potentiel de la cellule.

2.2.2 Canaux

2.2.2.1 Répartition de pression

L'équation classique pour simuler l'écoulement d'un fluide tel que les gaz dans une cellule de pile à combustible est l'équation de **Navier-Stokes**. Mais pour une application temps réel, ce n'est pas envisageable car cela demanderait dans notre cas un maillage très fin (voir [52]). Un maillage fin engendrerait un système avec un nombre de variables et d'équations n important. Comme la résolution d'un système linéaire est d'une complexité en n^3, le temps de calcul serait trop important. La figure 2.4 montre les résultats en pression et en vitesse d'une simulation utilisant l'équation de Navier-Stokes de l'écoulement d'un fluide circulant dans un tube.

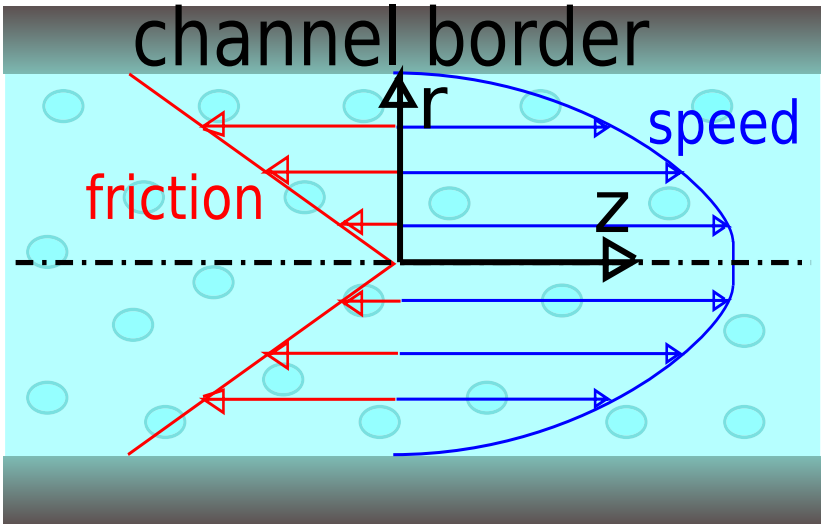


FIGURE 2.4 – Résultat de simulation utilisant l'équation de Navier-Stokes de l'écoulement d'un fluide circulant dans un tube

Dans la plupart des applications temps réel, cette précision n'est pas nécessaire. En effet, la pression moyenne classique dans une pile à combustible PEM est de $1atm$ à $2atm$ et la variation de la pression à une distance de l'ordre du diamètre d'un canal de la pile est négligeable devant cette pression. On peut ajouter à ceci la fonction de la couche de diffusion qui va uniformiser la répartition de la pression dans la couche catalytique. Ainsi, ce qu'il nous faut c'est d'avantage une tendance de la répartition de pression sur l'ensemble de la surface de la cellule qu'une carte détaillée incluant ce qui se passe à l'intérieur de chaque canal.

Si on regarde ce qui se passe dans les canaux en se concentrant sur le phénomène d'écoulement, on observe un écoulement de fluide dans un réseau de tuyaux avec des fuites comme illustré dans la figure 2.5. En régime statique, les canaux sont "pleins" et les molécules se déplacent d'une manière similaire à des voitures dans un bouchon (le vide créé par les molécules qui s'échappent induit le déplacement des molécules précédentes, etc).

On sait que l'écoulement dans les canaux est très majoritairement **laminaire** comme le dit le livre [28].

Il existe une formule permettant de calculer l'écoulement d'un fluide dans un tuyau, c'est la formule de

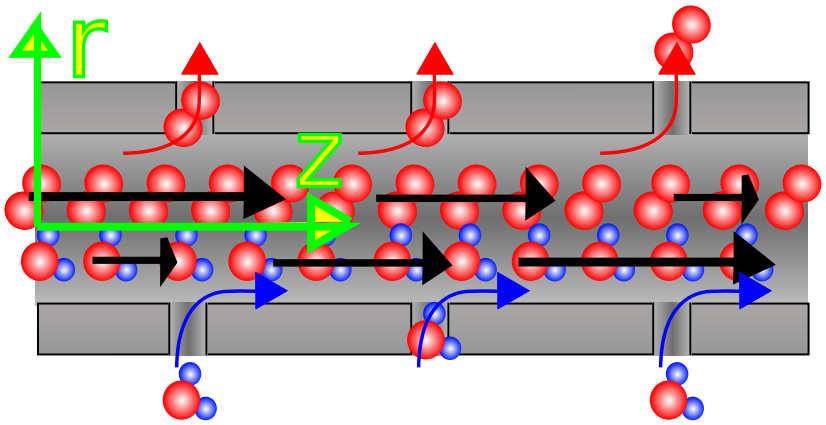


FIGURE 2.5 – Schéma présentant l'écoulement des gaz dans un canal de cellule

Darcy-Weisbach (équation 2.2) :

$$\Delta P = f_D \frac{L}{D_h} \rho \frac{V^2}{2} \tag{2.2}$$

Où :
- f_D est le coefficient de perte de charge de Darcy ;
- L est la longueur du tuyau ;
- D_h est le diamètre hydraulique du tuyau ;
- ρ est la masse volumique du fluide s'écoulant dans le tuyau ;
- V est la vitesse d'écoulement du fluide.

Pour les écoulements laminaires, on peut utiliser la relation de Hagen-Poiseuille (équation 2.3) :

$$f_D = \frac{64}{Re} \tag{2.3}$$

Où Re est le **nombre de Reynolds** que l'on peut calculer avec l'équation 2.4 :

$$Re = \frac{V D \rho}{\mu} \tag{2.4}$$

Où :
- D est le coté équivalent de notre canal ;
- μ est la viscosité dynamique du fluide.

pour le diamètre hydraulique, on peut utiliser l'équation 2.5 :

$$D_h = \frac{4A}{P} \tag{2.5}$$

Où :
- A est l'aire de la section du tuyau ;
- P est le périmètre de la section du tuyau.

Lorsque l'on intègre les équations 2.3, 2.5 et 2.4 dans l'équation 2.2, on obtient la nouvelle équation 2.6 :

$$\Delta P = \left(\frac{K \mu L}{D^2} \right) \times V \tag{2.6}$$

Où $K = 32$ sera considéré comme un coefficient empirique aux alentours de 32 pour ajuster le modèle.

Maintenant, il faut adapter l'équation 2.6 pour l'utiliser dans notre problème. Pour avoir un système de maillage simple et rapide (voir figure 2.7), on va mailler nos canaux avec des mailles rectangulaires et on va projeter l'équation 2.6 dans les deux directions pour chaque rectangle. On obtient alors pour chaque maille les équations 2.7 et 2.8 :

$$P(i+1,j) - P(i,j) = \left(\frac{K\mu\Delta X V_{mol}}{\Delta Y h}\right) \times Nx \tag{2.7}$$

$$P(i,j+1) - P(i,j) = \left(\frac{K\mu\Delta Y V_{mol}}{\Delta X h}\right) \times Ny \tag{2.8}$$

Où :

— V_{mol} est le volume molaire du gaz ;
— Nx et Ny sont respectivement les débits molaires surfaciques dans les directions $\overrightarrow{x}$ et $\overrightarrow{y}$;
— h est la profondeur du canal (constante en principe) ;
— ΔX et ΔY sont respectivement les longueurs et largeurs des mailles.

On remarque que le volume molaire des gaz dans les canaux dépend de la pression (voir équation 2.9 construite à partir de la loi des gaz parfait).

$$V_{mol} = \frac{R \times T}{P} \tag{2.9}$$

Notre système d'équation devient non-linéaire si on réinjecte l'équation 2.9 dans les équations 2.7 et 2.8, on obtient les équations de mailles 2.10 et 2.11.

$$P(i+1,j) - P(i,j) = \left(\frac{K\mu\Delta X \times RT}{P(i,j)\Delta Y h}\right) \times Nx \tag{2.10}$$

$$P(i,j+1) - P(i,j) = \left(\frac{K\mu\Delta Y \times RT}{P(i,j)\Delta X h}\right) \times Ny \tag{2.11}$$

Il y a un produit direct entre la pression et le débit ($P^{-1} \times Nx$). Les systèmes non linéaires sont difficiles et longs à résoudre. Pour les résoudre il faut résoudre plusieurs fois des systèmes linéaires de manière itérative (méthode de Newton-Rhaphson). Il a été difficile de stabiliser cette méthode pour notre problème d'autant plus qu'il faut partir d'une solution proche.

Pour contourner ce problème, on considère dans un premier temps un volume molaire constant dans la cellule ($V_{mol} = Cste$), calculé à partir de la pression moyenne. Ainsi, les équations 2.7 et 2.8 donnent un système linéaire.

Après la résolution du système linéaire, le volume molaire est recalculé pour chaque maille à partir des pressions calculées par le système. Ensuite, le calcul et relancé ainsi jusqu'à converger vers la solution. On a alors un calcul itératif beaucoup plus stable qu'avec la méthode de **Newton-Raphsone** car la grandeur itérée qui est choisie est toujours très proche de la solution. En effet, le volume molaire V_{mol} ne varie pas beaucoup relativement à lui même puisque la pression absolue tourne autour de $1-2atm$ et que les différences de pression entre l'entrée et la sortie de la cellule sont beaucoup plus faibles.

Ainsi, il y a trois variables inconnues : P, Nx et Ny. Il faut donc trois équations. La troisième équation sera une équation de conservation de la matière comme l'équation 2.12 :

$$Div\left(\overrightarrow{N}\right) = 0 \Leftrightarrow \frac{Nx}{\partial x} + \frac{Ny}{\partial y} + N_{gdl} = 0 \tag{2.12}$$

On approxime cette formule avec la méthode des volumes finis qui nous donne un bilan des débits autour de chaque maille, soit l'équation 2.13

$$\Delta X \times h \times Nx_W - \Delta X \times h \times Nx_E + \Delta Y \times h \times Ny_S - \Delta Y \times h \times Ny_N + \Delta X \Delta Y \times N_{gdl} = 0 \tag{2.13}$$

Où :

— les sigles W, E, N et S signifient respectivement aux frontières de maille gauche, droite, haut et bas comme l'illustre la figure 2.6 ;
— N_{gdl} représente le flux molaire surfacique entrant dans les canaux par la couche de diffusion.

Le système linéaire global permettant de calculer la répartition des pressions et des flux se construit en combinant les systèmes 2.14 de chaque maille.

$$\begin{cases} P(i+1,j) - P(i,j) = \left(\frac{K\mu\Delta X V_{mol}}{\Delta Y h}\right) \times Nx \\ P(i,j+1) - P(i,j) = \left(\frac{K\mu\Delta Y V_{mol}}{\Delta X h}\right) \times Ny \\ \Delta X \times h \times Nx_W - \Delta X \times h \times Nx_E + \Delta Y \times h \times Ny_S - \Delta Y \times h \times Ny_N + \Delta X \Delta Y \times N_{gdl} = 0 \end{cases} \tag{2.14}$$

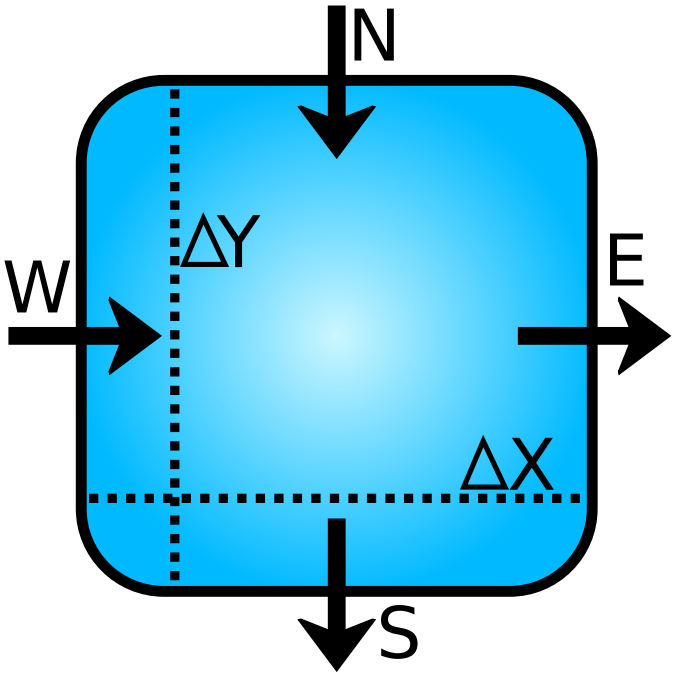


FIGURE 2.6 – Convention de nomenclature des bords de maille

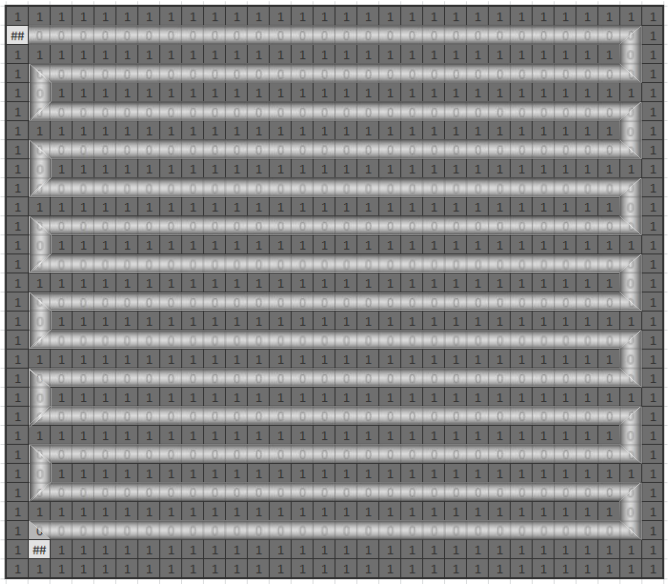


FIGURE 2.7 – Exemple de maillage pour les canaux

On pourrait maintenant y ajouter des conditions aux limites qui conditionneraient là où se trouve la matière et là où se trouve les canaux comme dans la figure 2.7. Une frontière fermée (un coté de bord de canal) engendrerait un ajout d'équation dans le système principale : $N_{bord} = 0$.

Mais, non seulement il n'est pas utile de calculer un flux Ny dans un canal allant dans la direction $\overrightarrow{x}$, mais en plus, le considérer augmente inutilement la taille du système à résoudre. Si on considère que seulement les pressions dans les canaux ont besoin d'être calculées et que seuls les flux allant dans la direction des canaux sont utiles, on peut au mieux diviser par deux le nombre des variables dans notre système. Comme la complexité est en n^3 cela représente une optimisation du temps de calcul en $2^3 = 8$ fois plus court.

2.2.2.2 Calcul de la variation des fractions molaires pour chaque espèce chimique

Dans l'anode, on a seulement du dihydrogène (en négligeant l'humidité) donc le problème ne se pose pas, en connaissant la pression et la température, on connaît directement la concentration molaire de notre gaz. Mais pour la cathode, le problème est différent, il y trois espèces chimiques présentes :

— le diazote (N_2) ;
— le dioxygène (O_2) ;
— la vapeur d'eau(H_2O).

Notons qu'il y a aussi 1% d'autres gaz qui seront négligés dans le modèle.

Il faut donc, en plus du calcul des flux et des pressions, être capable de déterminer individuellement pour chaque espèce chimique sa fraction molaire. Refaire un système du calcul des pressions en remplaçant l'équation de conservation par des équations de conservation pour chaque espèce chimique serait coûteux en calculs à cause de la complexité en n^3 de la résolution des systèmes linéaires.

Le calcul des pressions nous donne aussi les flux, les flux des espèces chimiques au travers de la couche de diffusion nous sont passés en paramètre d'entrée dans le module. Il est donc assez simple quand on connaît la concentration dans un volume de contrôle (maille) d'un canal de calculer la concentration dans le volume de contrôle voisin. La figure 2.8 illustre cette problématique.

Soit :

— C_{ox}^{in} et C_{ox}^{out} étant respectivement les ratios molaires de l'oxygène dans les flux de gaz entrants et sortants du volume de contrôle ;
— Nx_{in} et Nx_{out} étant respectivement les flux molaires totaux entrant et sortant ;
— N_{gdl}^{ox} étant le flux molaire d'oxygène partant du volume de contrôle vers la couche de diffusion.

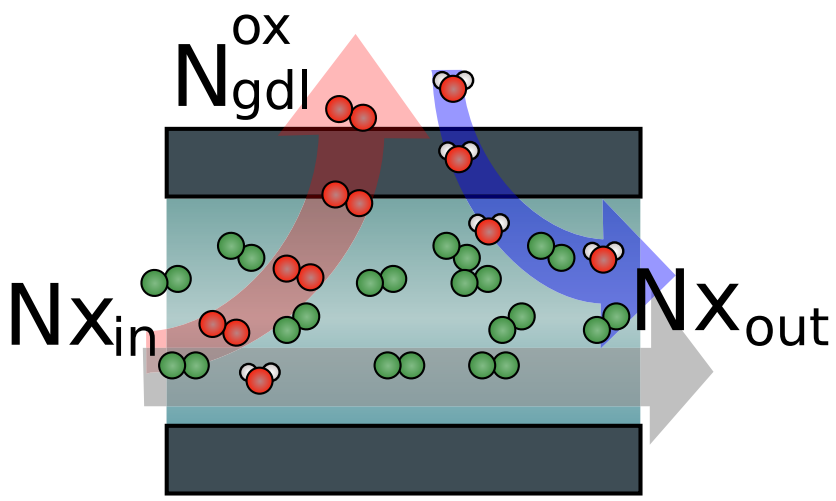


FIGURE 2.8 – Problématique du calcul explicite des concentrations

Comme il y a ici conservation de l'espèce chimique (pas de réaction chimique au niveau des canaux) on peut poser l'équation 2.15.

$$C_{ox}^{in} \times Nx_{in} - N_{gdl}^{ox} - C_{ox}^{out} \times Nx_{out} = 0 \tag{2.15}$$

On peut donc déduire de l'équation 2.15 la formulation explicite 2.16.

$$C_{ox}^{out} = \frac{C_{ox}^{in} \times Nx_{in} - N_{gdl}^{ox}}{Nx_{out}} \tag{2.16}$$

Il est donc possible de déterminer toutes les concentrations de manière explicite en suivant les flux de gaz totaux précédemment calculés. Cependant, il y a un problème. La plupart des configurations ont des jonctions et donc pour que la maille suivante puisse être calculée, il faut que toutes les mailles précédentes aient été calculées aussi. Pour se faire, on propose un système multi-agents.

Un système multi-agents est un système qui utilise plusieurs agents pour arriver à un résultat final qui résulte de leur travail joint. Ici, l'agent sera comme une fonction qui sera appliquée à un endroit des canaux et qui pourra changer d'endroit d'application. Ainsi, notre agent sera doté de :

— une position d'application dans les canaux ;
— une capacité à observer autour de lui et à se déplacer ;
— une formule à appliquer en fonction de ce qui l'entoure.

Les règles que suivra chaque agent sont simples :

1. Si je suis sur un simple canal, je calcul la maille suivante (en suivant le flux) du canal et je me place sur elle.
2. Si je suis à une séparation, je choisis une des voie, je la calcule avant de m'y placer, et je crée un double de moi que je place sur l'autre voie et qui fait la même chose.
3. Si j'arrive à un rassemblement, j'attends que toutes les autres voies entrantes soient occupées par un agent et quand ça arrive, je tue tous les autres agents autours de ma jonction de rassemblement et je calcule la prochaine case seul à partir des résultats des cases des flux entrant.

La figure 2.9 illustre le comportement général des agents. On voit que si on fait appliquer à chaque agent les règles précédemment citées, toutes les concentrations dans les canaux auront étés calculées correctement à la fin.

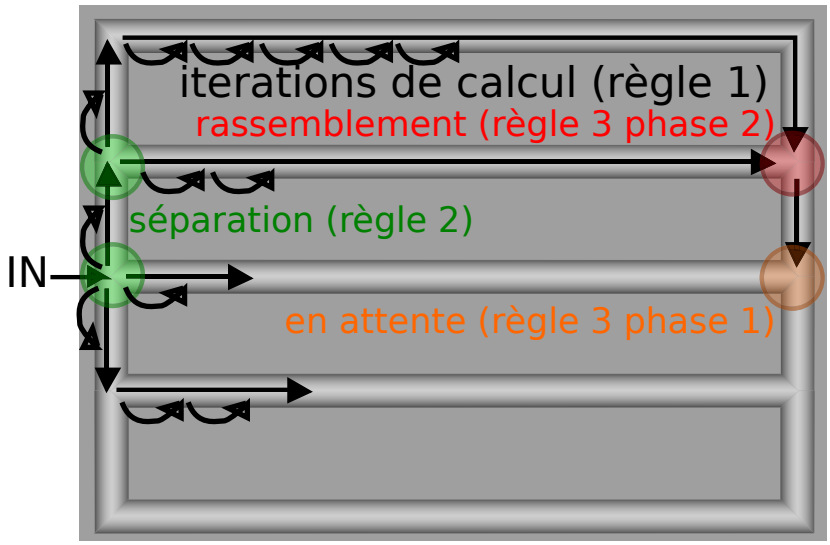


FIGURE 2.9 – Progression du calcul explicite des concentrations par le système multi-agents

2.2.3 La couche de diffusion (GDL)

Dans la couche de diffusion, l'enjeu est de trouver quels sont les concentrations molaires des réactifs au niveau de la couche catalytique et quels seront les flux sortants des canaux pour entrer dans la couche de diffusion.

Le phénomène le plus important ici est la diffusion. On pourrait, comme dans le module fluidique des canaux poser un système qui calculerait toutes les pressions, concentrations et flux dans la couche de diffusion. Mais cela engendrerait un problème pour la simulation en temps réel. En effet, dans le module des canaux, on utilise une technique qui réduit la taille du système à résoudre en intégrant directement les conditions aux limites du système. Or, on ne peut pas faire ça avec la couche de diffusion car c'est un milieu homogène dans lequel il n'y a pas de conditions aux limites excepté aux bords. Par ailleurs, dans la couche de diffusion, le problème devient tridimensionnel ce qui augmente encore la taille du système. Ainsi, un calcul statique classique dans la couche de diffusion serait trop lourd pour de la simulation temps réel. Il faut donc trouver un autre moyen.

Les flux Ng utilisés dans le module canaux sont calculés par le module GDL en fonction des Nc et des ratios molaires calculés par le module canaux. Il faut donc plusieurs itérations où les modules de canaux et de GDL s'échangent leurs valeurs avant d'avoir une solution qui équilibre les deux. On utilise d'ailleurs déjà cette propriété dans l'évaluation du volume molaire V_{mol} dans le module des canaux. Ainsi, on peut glisser dans les itérations un calcul itératif propre au module GDL sans alourdir significativement le poids des calculs du module fluidique dans son ensemble.

On va donc faire une hypothèse équivalente à celle faite dans le module des canaux pour le volume molaire. Ici, ce qui peut sembler négligeable pour être calculé plus tard par itérations, c'est l'influence d'une zone de la couche de diffusion sur une zone plus éloignée de cette même couche. En effet, on peut s'attendre à ce que plus on s'éloigne d'un point, moins on soit soumis à son influence en terme de diffusion puisque la diffusion est conservative à l'état statique. Par analogie, on prend le calcul d'un champs électrique (qui est aussi un champs conservatif $div(Q) = Cste$), on voit que l'influence d'une charge sur les charges alentours va décroître en $\frac{1}{d^2}$ où d est la distance d'éloignement.

Pourquoi cette analogie ? Parce que si on prend la formule de la diffusion à l'état statique, on trouve une loi analogue à la loi de Joule. On peut donc, comme en thermique, faire une analogie avec les circuits électriques où :

- $\rho_{espce} \mapsto U$;
- $N_{espce} \mapsto I$;
- $\frac{1}{D_{espce}} \mapsto r$.

Avec

- U et I sont la tension et le courant ;
- r est la résistivité électrique ;

— D_{espce} est le coefficient de diffusion de l'espèce chimique *espèce* ;
— N_{espce} est le débit molaire de l'espèce chimique *espèce*.

Comme on considère que ce qui se passe loin d'un point est négligeable pour ce point, on va faire une modélisation locale avec un circuit électrique analogue à notre problème. On choisit de travailler sur une zone de 3×3 mailles car il n'y a jamais plus d'une maille entre deux canaux, on se garantit ainsi de ne jamais négliger un voisin important. La figure 2.10 représente notre circuit analogue.

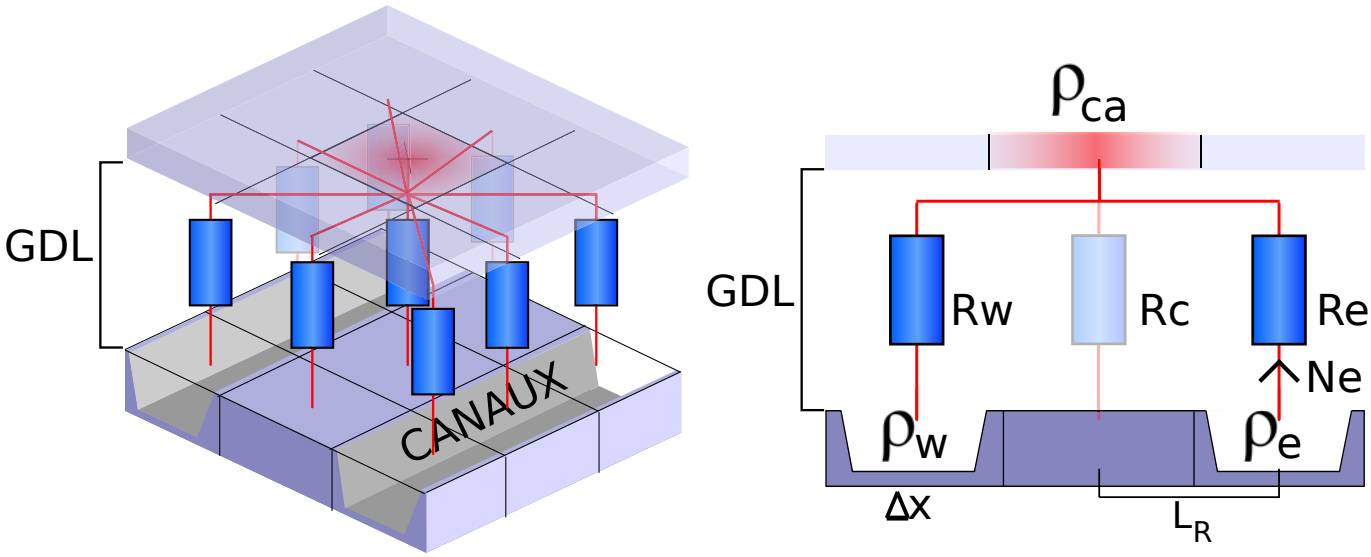


FIGURE 2.10 – Circuit électrique analogue pour calculer localement la diffusion des gaz dans la couche de diffusion

Dans cette figure :
— ρ_{ca} est la densité molaire de l'espèce chimique calculée dans la couche catalytique ;
— ρ_w, ρ_e, ρ_{nw}, etc, sont respectivement les densités molaires du même élément chimique dans les canaux ses mailles ouest, est et nord ouest, etc ;
— N_{ca} est le débit molaire de l'espèce chimique étudiée consommée ou produite au niveau de la couche catalytique ;
— N_w, N_e, N_{nw}, etc sont respectivement les débits molaires de l'espèce chimique étudiée depuis les mailles ouest, est et nord ouest, etc des canaux à la maille centrale de la couche catalytique ;
— R_w, R_e, R_{nw}, etc sont respectivement les résistances équivalentes liées aux débits N_w, N_e, N_{nw}, ...etc.

On remarque que la résistance R_c est effacée dans la figure 2.10, car à sa base, il n'y a pas de canaux. En effet, en fonction de la maille centrale de la couche catalytique où on se place (ρ_{ca}), il y a des résistances à retirer du circuit analogue. Dans la suite, on s'appuiera sur la représentation 2D de la figure 2.10 pour expliquer la démarche.

Au début, il faut calculer les résistances équivalentes avec les équations 2.17, 2.19 et 2.19 dans lesquelles on considère que $L_R >> L_{GDL}$.

$$R_e = \frac{\frac{1}{2}\Delta X_w + \frac{1}{2}\Delta X_c}{L_{GDL} \times \Delta Y_c \times D_c} \left(\frac{Ec_{rel}}{B \times Ec_{rel} + (B-1) l_{canal}} \right) \tag{2.17}$$

$$R_n = \frac{\frac{1}{2}\Delta Y_n + \frac{1}{2}\Delta Y_c}{L_{GDL} \times \Delta X_c \times D_c} \left(\frac{Ec_{rel}}{B \times Ec_{rel} + (B-1) l_{canal}} \right) \tag{2.18}$$

$$R_c = \frac{L_{GDL}}{\Delta X_c \times \Delta Y_c \times D_c \times B} \tag{2.19}$$

Où :

— B, Ec_{reel} et l_{canal} sont des paramètres spéciaux liés à une simplification de la configuration de canaux (expliqué à la fin du chapitre) ;

— D_c est calculé avec la formule empirique de la cinétique des gaz retravaillée par la correction de Bruggemann, ce qui donne les équations 2.20 pour l'anode, et 2.21 et 2.22 pour la cathode (cf [28]).

$$D_c^{H_2} = \frac{1.349\,10^{-5}\,T^{2.334}\left(\frac{1}{M_{H_2}}+\frac{1}{M_{H_2O}}\right)^{0.5}}{P} \times \epsilon^{\tau} \tag{2.20}$$

$$D_c^{O_2} = \frac{C_{N_2}M_{N_2}+C_{H_2O}M_{H_2O}}{(C_{N_2}M_{N_2}+C_{H_2O}M_{H_2O})\left(\frac{C_{N_2}}{D_{O_2,N_2}}+\frac{C_{H_2O}}{D_{O_2,H_2O}}\right)} \times \epsilon^{\tau} \tag{2.21}$$

$$D_c^{H_2O} = \frac{C_{N_2}M_{N_2}+C_{O_2}M_{O_2}}{(C_{N_2}M_{N_2}+C_{O_2}M_{O_2})\left(\frac{C_{N_2}}{D_{H_2O,N_2}}+\frac{C_{O_2}}{D_{H_2O,O_2}}\right)} \times \epsilon^{\tau} \tag{2.22}$$

Où :

— M est la masse molaire ;

— C est le ratio molaire ;

— $D_{O_2,N_2} = \frac{1.91925\,10^{-2}\,T^{2.334}\left(\frac{1}{M_{H_2}}+\frac{1}{M_{H_2O}}\right)^{0.5}}{P}$;

— $D_{O_2,H_2O} = D_{H_2O,O_2} = \frac{2.35625\,10^{-2}\,T^{1.823}\left(\frac{1}{M_{H_2}}+\frac{1}{M_{H_2O}}\right)^{0.5}}{P}$;

— $D_{H_2O,N_2} = \frac{2.10085\,10^{-2}\,T^{1.823}\left(\frac{1}{M_{H_2}}+\frac{1}{M_{H_2O}}\right)^{0.5}}{P}$;

— ϵ est la porosité de la couche de diffusion ;

— τ est la tortuosité de la couche de diffusion.

Maintenant, il faut construire le système 2.23 pour calculer ρ_{ca} et les N_e, N_n, etc en fonction des ρ_e, ρ_n, etc et du N_{ca}.

$$\begin{cases} \rho_{ca} - \rho_e &= R_e \times N_e \\ \rho_{ca} - \rho_w &= R_w \times N_w \\ N_e + N_w &= N_{ca} \end{cases} \tag{2.23}$$

Les deux premières équations du système 2.23 sont des lois de diffusion de Fick et la dernière équation est une loi de conservation de la matière.

Le système doit être adapté et résolu indépendamment pour toutes les mailles de la couche catalytique qui seront prises en maille centrale (ρ_{ca}). Ainsi, au lieu d'avoir un seul système avec une complexité en Nb_{maille}^3, on a Nb_{maille} petits systèmes donc une complexité inférieure à $Nb_{maille}\,(9)^3$. L'étape suivante consiste à combiner les résultats de chaque système. Pour se faire, on va simplement sommer les débits molaires. Pour chaque maille on fera les calculs de l'équation 2.24.

$$N_g = {N_e}^w + {N_w}^e + {N_s}^n + {N_n}^s + {N_{nw}}^{se} + {N_{se}}^{nw} + {N_{ne}}^{sw} + {N_{sw}}^{ne} + N_c \tag{2.24}$$

Où ${N_e}^w$ est le résultat N_e de la maille à l'ouest de la maille calculée, etc

2.2.4 Assemblage final

On a donc à la fin un système itératif dans lequel est inclus deux systèmes itératifs. Le schéma 2.11 illustre la structure de ces itérations. ρ_{gdl} représente les concentrations molaires des réactifs dans les canaux. Elles peuvent être trouvées par un simple produit de la pression par le ratio molaire de l'espèce chimique concernée.

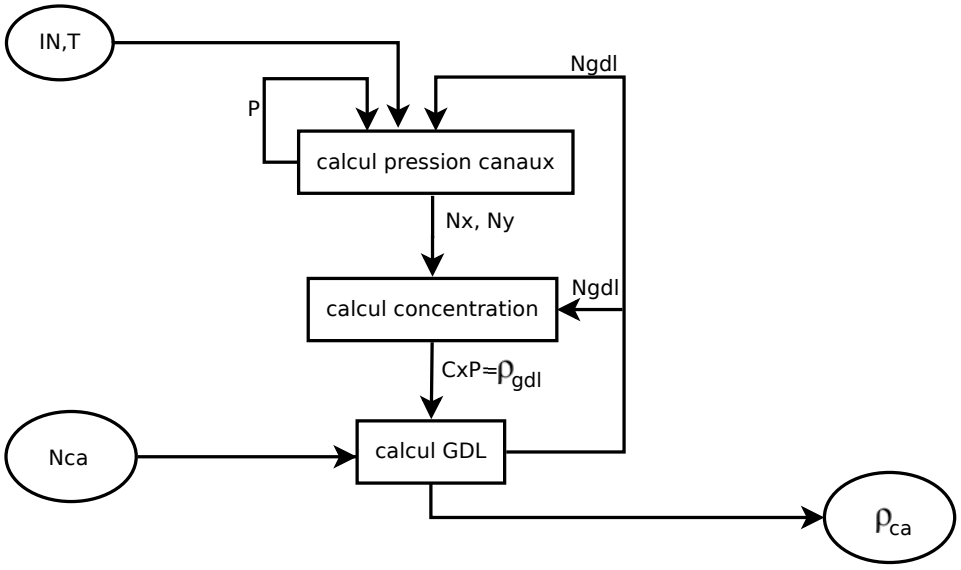


FIGURE 2.11 – Schéma de la la structure itérative finale du module fluidique

2.3 Modèle électrique

2.3.1 La problématique

Le courant est calculé dans la couche catalytique, on va donc prendre un maillage carré régulier. On considère que l'on a en paramètre d'entrée :

- $R_{lec}(n,m)$: la résistance électrique de la membrane qui sera considérée comme la résistance électrique globale de la maille en (n,m) (elle sera calculée dans le module de la membrane) ;
- I : le courant total traversant la cellule de la pile à combustible ;
- $\rho_{ca}^{H_2}(n,m)$ et $\rho_{ca}^{O_2}(n,m)$: respectivement les densités molaires de dihydrogène et de dioxygène (elles sont calculées dans le module fluidique de la GDL) ;
- $T(n,m)$: la température au nivau de la couche catalytique.

On utilise l'équation de Nernst 2.25 pour calculer le potentiel thermodynamique $U_{NERNST}(n,m)$ en fonction de $\rho_{ca}^{H_2}(n,m)$, $\rho_{ca}^{O_2}(n,m)$ et $T(n,m)$.

$$U_{NERNST} = 1.23 - 0.85\times10^{-3}\,(T-298.15) + 4.3085\times10^{-5}T\left(ln\left(\frac{P_H}{101325RT}\right) + \frac{1}{2}log\left(\frac{P_{ox}}{101325RT}\right)\right) \quad (2.25)$$

Où :

- R est la constante des gaz parfait ;
- P_{ox} et P_H sont respectivement les pressions partielles de dihydrogène et de dioxygène calculées avec les formules $P_H = \rho_{ca}^{H_2}RT$ et $P_{ox} = \rho_{ca}^{O_2}RT$.

Rappelons que le potentiel d'une cellule de pile à combustible peut être calculé avec la formule 2.26.

$$U_{cell} = U_{NERNST} - U_{activation} - R_{elec}\times I \quad (2.26)$$

où $U_{activation}$ est le potentiel de perte par activation que l'on peut calculer grâce à la formule de Tafel 2.27.

$$U_{activation} = \frac{RT}{\alpha F}\times ln\left(\frac{J+J_C}{I_{0ref}A_{cell}}\times\frac{P_0}{P_{ox}}\right) \quad (2.27)$$

Où :

- F est la constante de Faraday ;
- $J(n,m)$ est le courant passant dans la maille (n,m) ;
- $I_0(n,m)$ est le courant de référence ramené à la maille et calculé comme $I_0 = I_0^{ref}\times\Delta S$ avec I_0^{ref} la densité de courant de référence et ΔS la surface de la maille ;

— P_0 est la pression de référence ;
— $J_C(n,m)$ est le courant de fuite de la maille qui se calcul comme $J_C = J_C^{ref} \times \Delta S$ avec J_C^{ref} la densité de courant de fuite ;

Si on intègre la formule de Tafel 2.27 dans l'équation 2.26, on obtient l'équation 2.28 pour chaque maille.

$$U_{cell} = U_{NERNST}(n,m) - \frac{RT(n,m)}{0.5F} \times log\left(\frac{J(n,m) + J_C(n,m)}{I_0(n,m)} \times \frac{P_0}{P_{ox}(n,m)}\right) - R_{elec}(n,m) \times J(n,m) \tag{2.28}$$

Si on considère la conservation de la charge, on peut construire le système 2.29 à partir de l'équation 2.28.

$$\begin{cases} U_{cell} &= U_{NERNST}(n,m) - \frac{RT(n,m)}{0.5F} \times log\left(\frac{J(n,m)+J_C(n,m)}{I_0(n,m)} \times \frac{P_0}{P_{ox}(n,m)}\right) - R_{elec}(n,m) \times J(n,m) \\ I &= \sum_{cell} J(n,m) \end{cases} \tag{2.29}$$

Comme pour la couche de diffusion, ce système est trop grand pour être résolu rapidement, mais en plus ce système est non linéaire. Pour répondre à cette problématique, trois algorithmes différents ont été développés pour différentes applications.

2.3.2 La méthode classique

Imaginons que l'on cherche U_{cell} à l'aide d'une méthode de recherche numérique (du type recherche dichotomique par exemple). On commence alors par faire une hypothése sur la valeur de $U_{cell} = U_{hyp}$.

Ensuite, il faut trouver $\forall (n,m) \in cell$ le $J(n,m)$ qui satisfait la premiére équation du systéme avec U_{hyp} à la place de U_{cell}. Ce que l'on peut faire là encore grâce à une recherche dichotomique.

Une fois que l'on connaît tous les $J(n,m)$, on peut vérifier la deuxiéme équation ($I = \sum_{cell} J(n,m)$). Si le I trouvé est trop grand, c'est que le U_{hyp} est trop petit et inversement.

Ce qui revient à $n \times m$ boucles de recherche dichotomique imbriquées dans une autre boucle de recherche dichotomique. L'algorithme général est donné dans la figure 2.12.

C'est un algorithme assez complexe et qui semble peu efficace de prime abord.

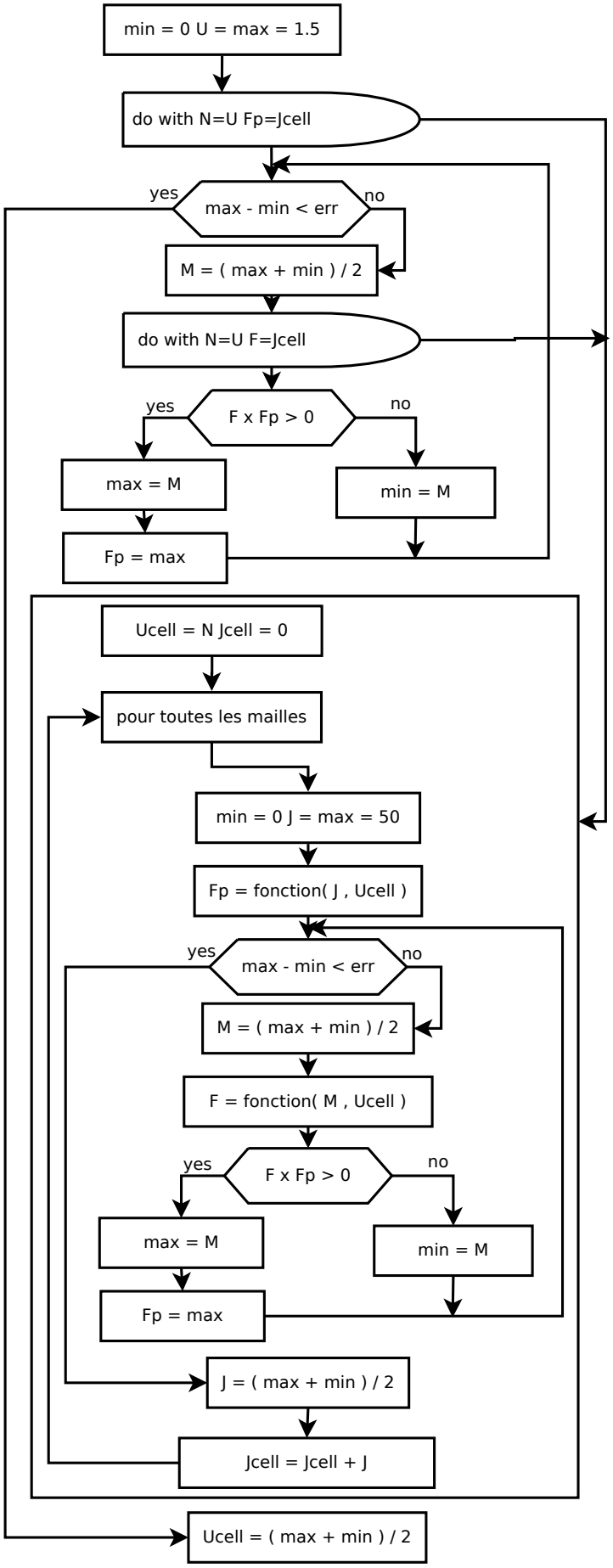


FIGURE 2.12 – Algorithme de calcul par la méthode classique

2.3.3 La méthode de la table interpolée

On pourrait déjà faire disparaître une partie de l'algorithme de la figure 2.12 en estimant directement les $J(n,m)$ pour un U_{hyp} donné. Pour se faire, deux méthodes ont été imaginées et développées :

— une méthode utilisant une table stockée en mémoire ;
— une méthode s'appuyant sur une formule d'interpolation générale.

2.3.3.1 Simplification du système

Imaginons que l'on connaisse le potentiel de la cellule : $U_{cell} = U_{hyp}$. On peut déterminer le courant $J(n,m)$ dans la maille (n,m) grâce à l'équation 2.29. Si on pose :

$$K_1(n,m) = \frac{2\,T(n,m)\,R}{R_{elec}(n,m)\,F} \tag{2.30}$$

$$K_2(n,m) = \frac{U_{NERNST}(n,m) - U_{hyp}}{R_{elec}(n,m)} - J_C(n,m) - \frac{2\,T(n,m)\,R}{R_{elec}(n,m)\,F}\ln\left(\frac{P_0}{I_0(n,m)\,P_{ox}(n,m)}\right) \tag{2.31}$$

l'équation 2.28 devient l'équation 2.32 où on a enlevé les arguments (n,m) pour plus de lisibilité (construite avec un logiciel de calcul littéral).

$$J = K_2 + K_1 log\,(J + J_C) \tag{2.32}$$

L'équation 2.32 est une équation paramétrée par K_1, K_2 et J_C. La présence du logarithme rend impossible la résolution analytique. Mais on peut la résoudre grâce à la recherche dichotomique. En observant la solution de l'équation 2.32 comme une fonction de K_1, K_2 et J_C, on peut chercher à construire une fonction artificielle comme $J = Fct_J(K_1, K_2, J_C)$.

2.3.3.2 La table de valeur

Tout d'abord, on estime les domaines de définitions de notre fonction. Pour cela on fixe des limites aux paramètres qui entrent en compte pour le calcul de K_1 et K_2 dans les équations 2.30 et 2.31 :

— $U_{hyp} \in]0.0; 1.5V]$ car ce sont des potentiels typiques dans une courbe de polarité pour une pile à combustible PEM.
— $U_{NERNEST} \in [0.7; 1.5V]$, choisi ici pour un fonctionnement de PEM dans les conditions typiques.
— $P_{ox} \in]0.0; 0.6 \times 10^5 Pa]$ soit le domaine pour une pile à combustible utilisant de l'air à 1 ou 2 atm.
— $T \in [290.0; 363.0K]$ soit la température de fonctionnement d'une pile PEM.
— $R_{elec} \in]0.0; 200\omega]$ c'est de loin le domaine le plus difficile à établir. Il faut ici aussi tenir compte de la taille de maille que l'on compte utiliser car plus une maille est petite et plus la résistance peut augmenter, d'où le fait que l'on soit monté aussi haut dans la limite supérieure.

Les autres valeurs sont des constantes :

— $R = 8.3144621 J \cdot mol^{-1} \cdot K^{-1}$
— $F = 96485.0 A \cdot mol^{-1}$
— $P_0 = 1.01325 \times 10^5 Pa$
— $I_0 = 2.416 \times 10^{-2} A$ lui aussi étant dépendant de la taille de maille

On calcule tous les K_1 et K_2 possibles dans ces domaines combinés et on obtient une répartition de valeurs possible pour K_1 et K_2 que l'on met dans l'ordre croissant et que l'on peut observer dans les figures 2.13 et 2.14.

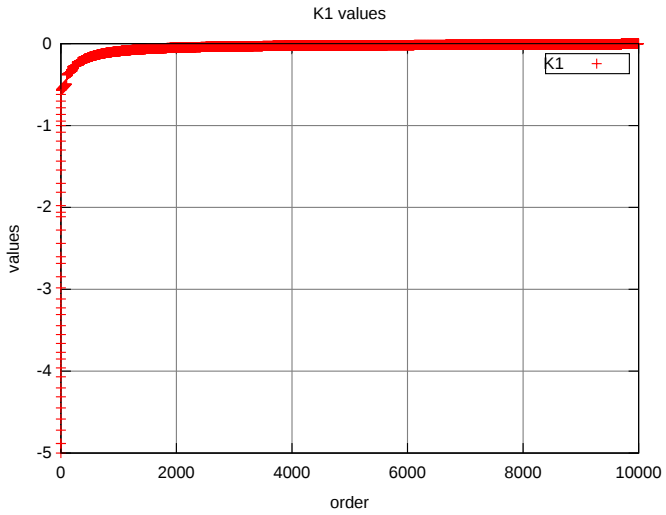


FIGURE 2.13 – La répartition des valeurs de K_1

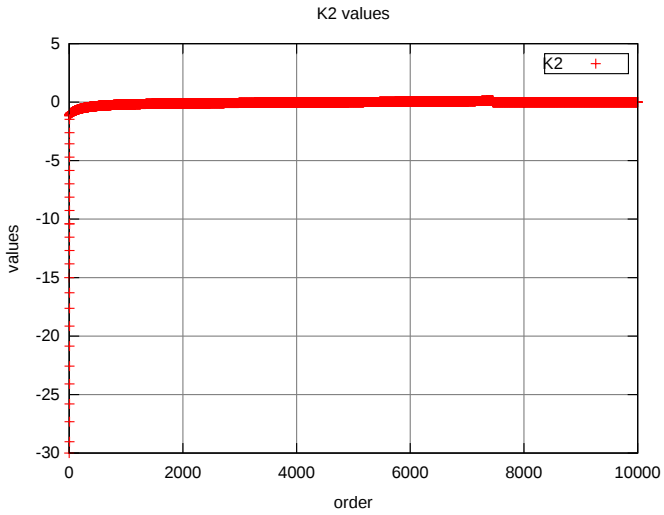


FIGURE 2.14 – La répartition des valeurs de K_2

On choisit par mesure de précaution de prendre des marges plus élevées pour K_1 5 fois supérieur et pour K_2 20 fois supérieur à cause de sa dépendance à la taille des mailles. On choisit donc comme espace de définition pour $Fct_J(K_1, K_2, J_C)$:

— $K_1 \in [-5; 0.0[$

— $K_2 \in [-30.0; 0.0[$

Maintenant, il est possible de calculer $Fct(K_1, K_2, J_C)$ sur le domaine de définition choisi. Pour se faire, on va construire une matrice contenant toutes les valeurs de J en fonction de K_1 et K_2. Pour chaque case de cette matrice, on appliquera l'algorithme de recherche dichotomique de la figure 2.15 associée à la formule $K_2 + K_1 log\,(J + J_C) - J$ et avec $err = 0.000001$ pour trouver J et le rentrer dans la matrice.

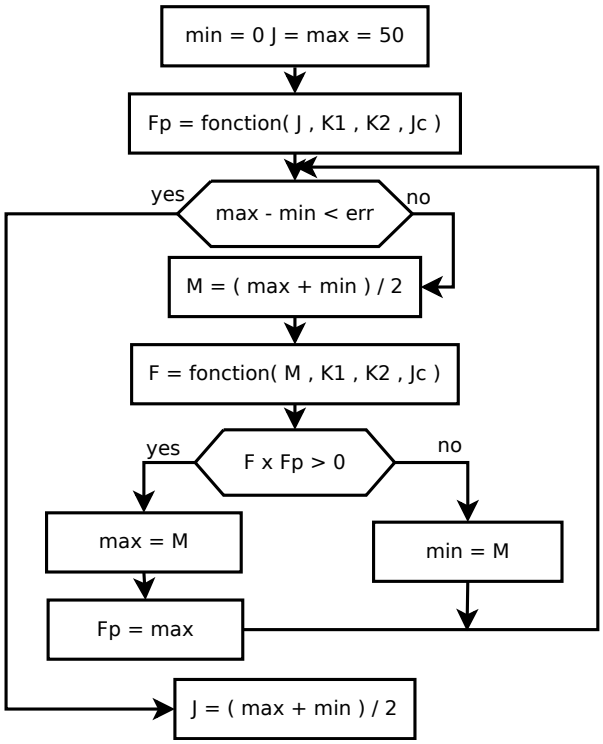


FIGURE 2.15 – L'algorithme de la recherche dichotomique

Comme on a un troisième paramètre J_C, on fera cette procédure pour plusieurs valeurs de $J_C = \{0.0; 12.0 \times 10^{-3}; 24.0 \times 10^{-3}; 48.0 \times 10^{-3}; ...\}$. Les résultats de cette étude sont donnés dans la figure 2.16.

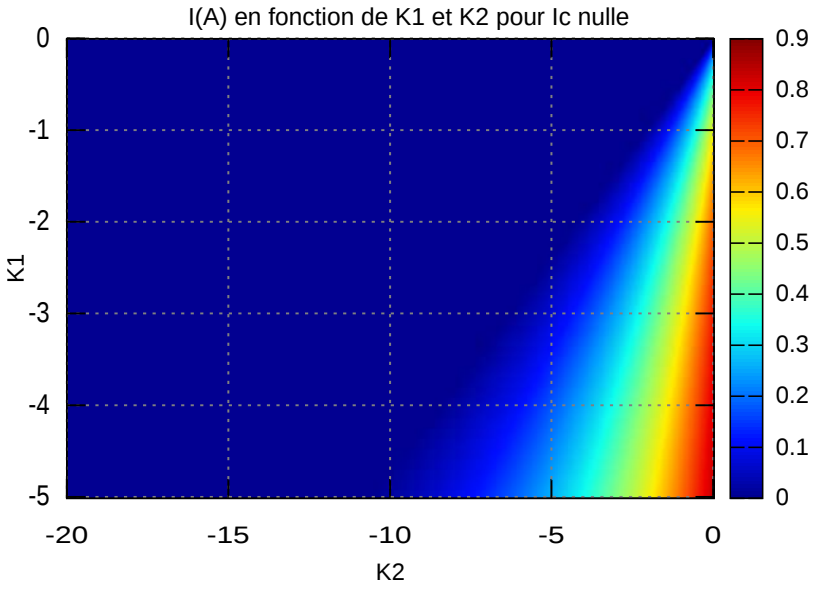


FIGURE 2.16 – I en fonction de K_1 et K_2 pour $J_C = 0$ (en A)

La méthode de la table de recherche est simple. On calcule grâce à la méthode classique, toutes les solutions I dans les intervalles de K_1 et de K_2 choisies et on place les résultats dans une grande matrice de 1000×1000. Pour déterminer la valeur du courant $J(n, m)$ on va simplement chercher la valeur dans la case correspondant aux $K_1(n, m)$ et $K_2(n, m)$.

2.3.3.3 La fonction d'interpolation générale

Une observation peut être faite à partir de la figure 2.16 : il y a des lignes d'isovaleurs proches en forme de ligne droite.

On décide d'utiliser cette propriété, pour créer notre fonction d'interpolation.

On va dans un premier temps mesurer le coefficient directeur qu'ont ces lignes d'isovaleurs. Pour se faire, on va opérer selon la procédure suivante :

1. On prend toutes les valeurs à la base de la matrice (en $K_1 = -5$) et toutes celles qui se trouvent à la frontière de définition supérieure. On les place dans deux vecteurs séparés dans leur ordre de prise en allant des $K_2 = -30$ à $K_2 = 0$.
2. On compare toutes les valeurs d'un des vecteurs par rapport aux valeurs de l'autre vecteur et on forme des couples avec les valeurs les plus proches les unes des autres comme on peut le voir dans la figure 2.17.
3. Pour chaque couple de valeurs dont on aura mémorisé les positions (K_2, K_1), on calcule le coefficient directeur :

$$\theta(K_2^{buttom}) = \frac{K_1^{top} - K_1^{buttom}}{K_2^{top} - K_2^{buttom}}$$

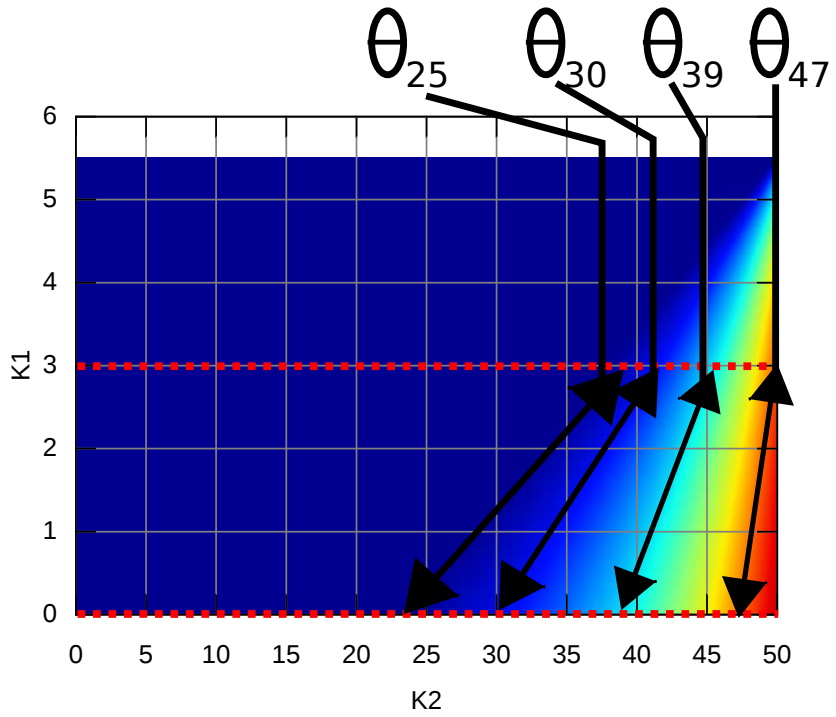


FIGURE 2.17 – Rapprochement des isovaleurs en couples pour calculer θ

Pour obtenir des résultats satisfaisants, il faut appliquer le calcul depuis une matrice de 1000x1000 soit de 1000000 valeurs, ce procédé est donc assez coûteux en temps de calcul. La figure 2.18 montre ce qui arrive lorsque la matrice sur laquelle on s'appuie n'a pas une résolution suffisante. La figure 2.19 donne les résultats obtenus pour plusieurs courants de fuites J_C. On observe de manière générale que le courant de fuite J_C n'a que très peu d'influence sur le calcul du courant I.

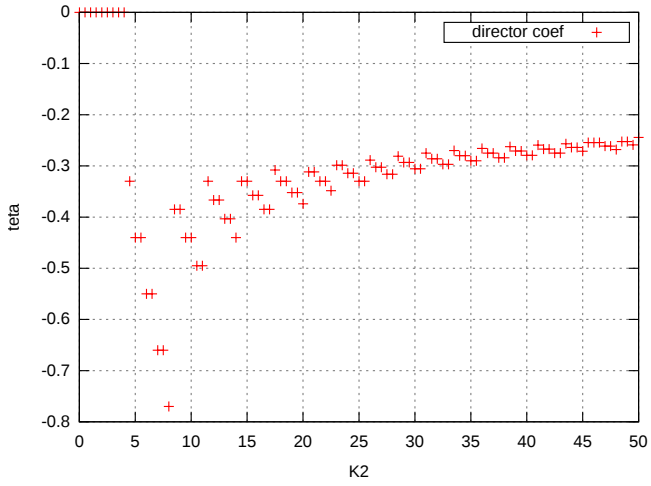


FIGURE 2.18 – $\theta(K_2)$ extrait d'une matrice de valeurs trop petite

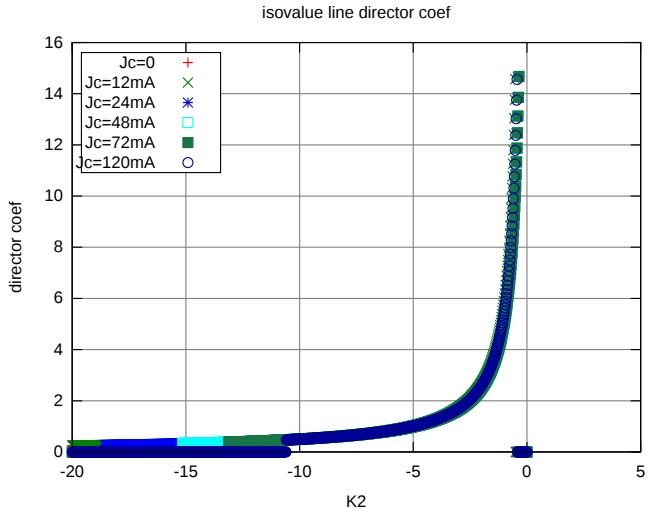


FIGURE 2.19 – $\theta(K_2)$ extrait pour plusieurs courants de fuites J_C

Ensuite, on crée une fonction pour interpoler la valeur de $\theta({K_2}^{root})$ avec ${K_2}^{root}$ la position en abscisse de l'intersection de la droite d'iso-valeur où se trouve le couple (K_1, K_2) avec la base de notre domaine où on connaît la solution. Comme la courbe a une forme hyperbolique on choisit d'interpoler ces valeurs par la formule 2.33.

$$\theta({K_2}^{root}) = \frac{C_a}{{K_2}^{root} + C_b} + C_c \tag{2.33}$$

Les coefficients sont recherchés ici grâce à un algorithme génétique :
— le paramètre $C_a = -4.5$
— le paramètre $C_b = 0.23$
— le paramètre $C_c = 0.08$
On peut observer la corrélation entre la fonction d'interpolation et les valeurs de θ dans la figure 2.20.

Vient ensuite la détermination des valeurs de J en fonction de K_2 quand $K_1 = -5$. Pour cela, on affiche ces valeurs. On remarque que la répartition ressemble beaucoup à une exponentielle et on choisit de l'interpoler avec la relation 2.34

$$I(-5, {K_2}^{root}) = C_d exp({K_2}^{root}/C_e + C_f) - C_g \tag{2.34}$$

Où
— le paramètre $C_d = 0.0226$;
— le paramètre $C_e = 5.5$;
— le paramètre $C_f = 3.6363636$;
— le paramètre $C_g = 0.012$.
La figure 2.21 montre la corrélation entre la fonction d'interpolation et les résultats donnés par la méthode de recherche dichotomique.

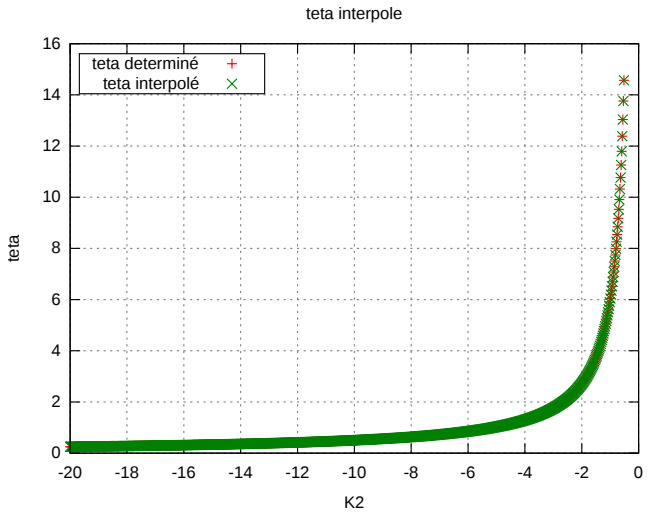


FIGURE 2.20 – Corrélation $\theta(K_2)$ avec son interpolation

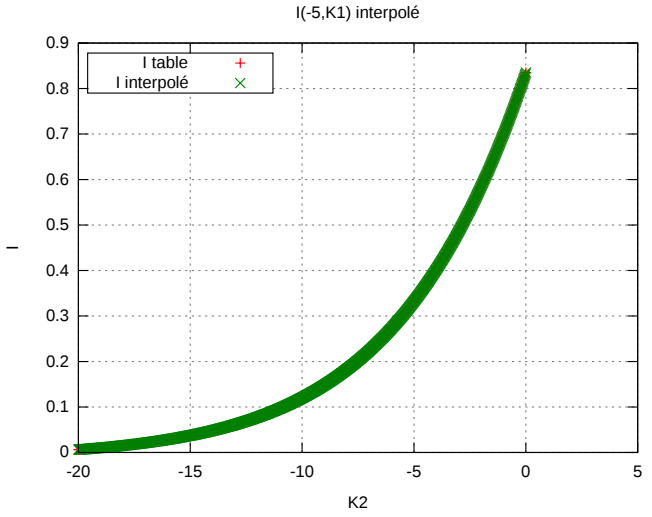


FIGURE 2.21 – Corrélation $I(-5, K_2)$ avec son interpolation

Pour calculer ${K_2}^{root}$ On pose l'équation 2.35.

$$K_1 = \theta({K_2}^{root}) \times \left(K_2 - {K_2}^{root}\right) - 5 \tag{2.35}$$

En intégrant l'équation 2.33 dans l'équation 2.35 et en résolvant l'équation résultante on trouve l'équation 2.36.

$$\begin{aligned} {K_2}^{root} &= -\tfrac{1}{2\,{C_c}}((C_c{}^2\,{K_2}^2 + (-2\,C_c\,K_1 + 2\,C_b\,C_c{}^2 + (2\,C_a - 10)\,C_c)\,K_2 + {K_1}^2 + (-2\,C_b\,C_c + 2\,C_a + 10)\,K_1 \\ &+ C_b{}^2\,C_c{}^2 + (2\,C_a - 10)\,C_b\,C_c + C_a{}^2 + 10\,C_a + 25)^{\frac{1}{2}} - C_c\,K_2 + K_1 + C_b\,C_c + C_a + 5) \end{aligned} \tag{2.36}$$

Ainsi, on peut avoir la fonction interpolée $I = Fct\,(K_1, K_2)$ simplement en intégrant l'équation 2.36 dans l'équation 2.34.

La dernière étape de ce développement est de valider l'interpolation, pour cela, on compare les résultats donnés par l'interpolation à ceux trouvés par la dichotomie est on donne l'erreur relative dans les figures 2.22.

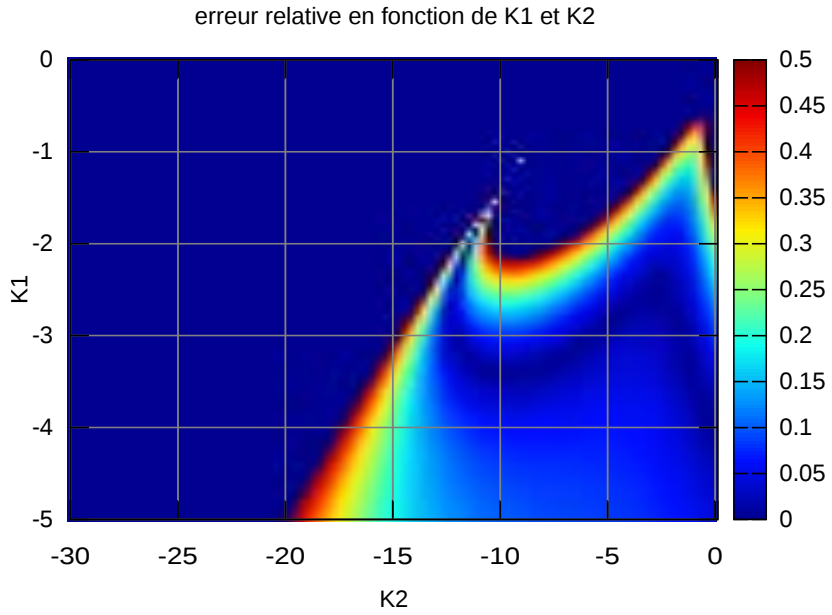


FIGURE 2.22 – Répartition de l'erreur relative de l'interpolation pour $J_C = 12mA$

On observe que dans certaine zones de (K_1, K_2), il peut y avoir une erreur importante contrairement à d'autres zones où l'erreur peut être très faible. Ainsi, l'interpolation n'est pas parfaite (les lignes des isovaleurs ne sont pas exactement droites), ajoutons aussi que la solution de l'équation sur laquelle s'appuie la table devient instable pour certaines valeurs limites. Cependant, la très grande majorité des cas se trouve autour de $K_1 = -1$ et $K_2 = 0$, donc dans une zone précise. De plus, ces zones d'erreurs peuvent être déplacées en ajustant les paramètres de l'interpolation. Ainsi, en fonction du domaine d'application d'une pile et de la taille des mailles de son modèle, ou des pressions d'entrées de ses réactifs, il faut réajuster les paramètres d'interpolation pour déplacer cette erreur hors du champs d'application spécifique du modèle. Pour cela, tous les paramètres $(C_a, C_b, C_c, C_d, C_e, C_f, C_g)$ sont repris ensemble et optimisés une dernière fois autour du champs d'application avec un algorithme génétique.

2.3.4 La méthode du polynôme interpolé

2.3.4.1 Le principe

Il reste une boucle de recherche dichotomique pour trouver $U_{hyp} = U_{cell}$. On se propose de trouver un moyen pour faire disparaître cette boucle et trouver en une fois le bon U_{hyp}

Pour se faire, on va chercher à construire une fonction interpolée qui se comporte comme exprimé dans l'équation 2.37.

$$Fct_2\left(U_{hyp}\right) = \sum_{cell} J(n,m) \tag{2.37}$$

Grâce à la fonction interpolée 2.37, il suffira de résoudre l'équation 2.38 pour trouver le bon $U_{hyp} = U_{cell}$.

$$Fct_2\left(U_{cell}, T, ...\right) = I \tag{2.38}$$

Pour créer cette fonction d'interpolation, on s'intéresse d'abord à ce qu'il se passe au niveau de la maille. La manière dont la pile est découpée en maille fait que électriquement parlant, chaque maille se comporte comme une mini-pile à combustible dans des conditions fluidiques et thermiques spécifiques. On peut donc s'attendre à ce que chaque maille ait une relation du U_{hyp} en fonction de $J(n,m)$ qui se comporte comme une courbe de polarisation de pile à combustible avec les pertes par concentration en moins comme la partie fluidique est figée.

La courbe de polarisation associée à chaque maille peut être interpolée par un polynôme de degré 4 si on est capable de calculer 5 points de la courbe de polarisation de la maille, ce qui est le cas. On choisit le degré 4 pour notre polynôme d'interpolation car il doit être le plus précis possible mais son calcul ne doit pas rendre la méthode d'optimisation moins rapide que la méthode classique.

L'intérêt de choisir un polynôme pour l'interpolation plutôt que l'une des lois que l'on peut classiquement trouver dans [28] pour interpoler une courbe de polarité avec des *log* est que l'on aura aucun mal à sommer tous les polynômes des courbes de polarité de chaque maille pour obtenir un seul et même polynôme de degré 4 pour l'ensemble de la pile.

2.3.4.2 L'application

Le calcul du potentiel U_{cell} de toute la pile va se faire en plusieurs étapes :

$$A = \begin{bmatrix} {U_{hyp_1}}^4 & \cdots & {U_{hyp_1}}^1 & 1 \\ {U_{hyp_2}}^4 & \cdots & {U_{hyp_2}}^1 & 1 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ {U_{hyp_5}}^4 & \cdots & {U_{hyp_5}}^1 & 1 \end{bmatrix} B = \begin{bmatrix} J(n,m)_1 \\ J(n,m)_2 \\ \vdots \\ J(n,m)_5 \end{bmatrix} \tag{2.39}$$

1. Pour chaque maille :
   (a) On calcule pour 5 valeurs de $U_{hyp_1} \cdots U_{hyp_5}$ le $J(n,m)_1 \cdots J(n,m)_5$ correspondant grâce à la fonction d'interpolation Fct construite précédemment.
   (b) On construit les matrices (2.39).
   (c) On résout le système linéaire $[A] \times \{X_c\} = \{B\}$ avec l'algorithme de Gauss-Jordan. Le vecteur $\{X_c\}$ contient alors les valeurs des coefficients de notre polynôme d'interpolation.
2. On calcul alors le polynôme d'interpolation pour toute la cellule en utilisant l'équation 2.40.

$$\left\{ {X_c}^{cell} \right\} = \sum_{cell} \{X_c\}(n,m) \tag{2.40}$$

3. On cherche les racines du polynôme 2.41 pour trouver le U_{cell}.

$$[{U_{cell}}^4 \cdots {U_{cell}}^1 1] \times \left\{ {X_c}^{cell} \right\} - I = 0 \tag{2.41}$$

Bien que le principe soit simple, il y a un problème supplémentaire à gérer. L'équation 2.41 a plusieurs solutions (en fait deux solutions en pratique). Pour éliminer les solutions qui ne nous intéressent pas, il suffit de prendre l'intervalle de la recherche dichotomique intelligemment. On peut choisir $U_{hyp} \in [0.0; 1.5]$ mais cela ne suffit pas toujours car les deux solutions peuvent se trouver dans cet intervalle. La bonne solution est la plus petite donc la limite supérieure de l'intervalle de recherche doit se trouver entre la plus grande solution et la plus petite.

Pour trouver cette limite supérieure, on va simplement calculer la dérivée de notre polynôme d'interpolation et faire une recherche dichotomique de la racine de cette dérivée dans intervalle $[0.0; 1.5]$. Ainsi, la solution de cette recherche sera la limite supérieure pour la recherche de la tension $U_{hyp} = U_{cell}$.

2.3.5 Le calcul des N_{ca}

Pour déterminer la valeur des $N_{ca}(n,m)$ on s'appuie sur ce qu'on sait des deux demies équations de la réaction chimique qui a lieu dans la pile (équation 2.42 et 2.43).

$$H_2 \longrightarrow 2H^+ + 2e^- \tag{2.42}$$

$$\frac{1}{2}O_2 + 2e^- \longrightarrow O^{2-} \tag{2.43}$$

Ces deux demies réactions chimiques offrent une relation directe entre la quantité des électrons qui passent dans la pile (le courant si on raisonne en débit) et la quantité de matière consommée sur les sites catalytiques. On peut donc en déduire les 3 équations 2.44, 2.45 et 2.46.

$$N_{ca}^{H_2} = \frac{J}{2F} \tag{2.44}$$

$$N_{ca}^{O_2} = \frac{J}{4F} \tag{2.45}$$

$$N_{ca}^{H_2O} = \frac{J}{2F} \tag{2.46}$$

L'équation 2.46 est simplement déduite de l'équation 2.44 par la loi de conservation atomique (pas de réaction nucléaire ici, il y a donc autant de dihydrogène absorbé que d'eau produite).

2.4 Modèle de la membrane

2.4.1 Le système membrane

Les phénomènes qui se trouvent dans la membrane ont une dynamique de l'ordre de la minute, donc contrairement à ce qui avait été fait pour les modèles fluidique et électrique, un modèle dynamique sera développé pour la membrane. Ce qui nous intéresse dans la membrane, c'est sa résistance électrique (R_{elec}) et l'eau qui passe au travers. Pour calculer la résistance électrique de la membrane, il faut connaître son contenu en eau λ qui est lui même calculé en fonction de sa densité molaire en eau ρ_{H_2O}.

Afin, de prendre en compte la distribution non uniforme de l'eau dans la membrane, on utilisera ici aussi un maillage carré. La membrane sera aussi coupée en 5 tronçons de même épaisseur le long de l'épaisseur de la membrane. Ainsi, chaque maille de la membrane aura 6 frontières, deux dans chaque direction :

— $\overrightarrow{x}$ et $\overrightarrow{y}$: la longueur et la largeur de la membrane ;
— $\overrightarrow{z}$: son épaisseur.

Comme le montre la figure 2.23.

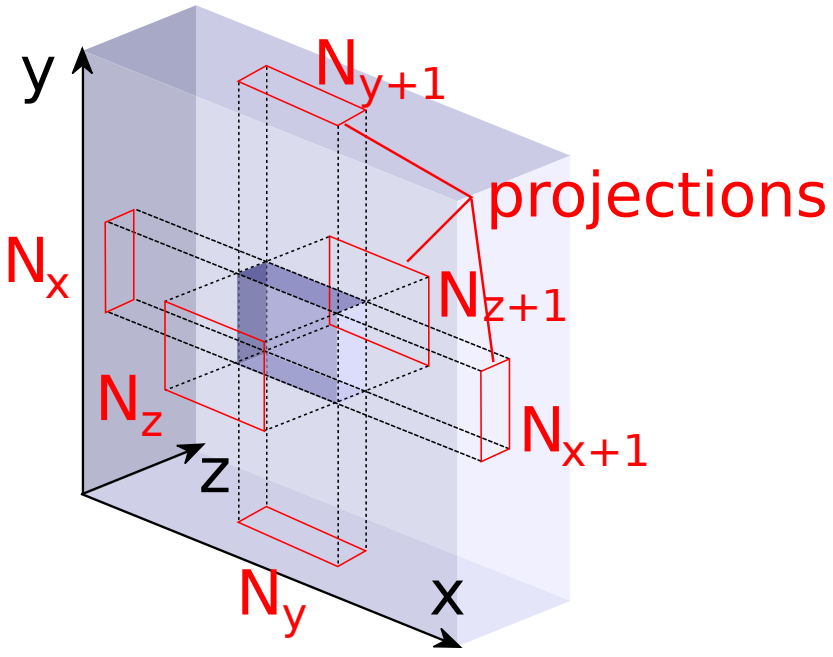


FIGURE 2.23 – Une maille de membrane avec ses 6 frontières projetées

2.4.2 La diffusion

La diffusion ou *back-diffusion* se produit à chaque frontière de chaque maille. Cette diffusion se comporte exactement comme celle dans la couche de diffusion, l'analogie avec un circuit électrique reste donc possible, d'où la formulation des équations 2.47, 2.48 et 2.49.

$$N_x{}^{dif} = \frac{\lambda_{x-1} - \lambda}{\frac{\frac{1}{2}\Delta X + \frac{1}{2}\Delta X_{x-1}}{\Delta Y \times \frac{L_{membrane}}{5} \times D_\lambda}} \tag{2.47}$$

$$N_y{}^{dif} = \frac{\lambda_{y-1} - \lambda}{\frac{\frac{1}{2}\Delta Y + \frac{1}{2}\Delta Y_{y-1}}{\Delta X \times \frac{L_{membrane}}{5} \times D_\lambda}} \tag{2.48}$$

$$N_z{}^{dif} = \frac{\lambda_{z-1} - \lambda}{\frac{\frac{L_{membrane}}{5}}{\Delta X \times \Delta Y \times D_\lambda}} \tag{2.49}$$

Où :
- λ est le contenu en eau de la membrane ;
- N^{dif} est le flux molaire d'eau du à la diffusion ;
- D_λ est le coefficient de diffusion de l'eau dans la membrane ;
- $L_{membrane}$ est l'épaisseur de la membrane.

Avec la formule empirique 2.50 pour le calcul du D_λ.

$$D_w = 1.3 \times 10^{-10} exp\left(2416\left(\frac{1}{303} - \frac{1}{T}\right)\right) \tag{2.50}$$

Et la formule empirique 2.51 pour le calcul du λ.

$$\begin{array}{lll} \text{si } a < 1.0 & : & \lambda = 0.043 + 17.81a - 39.85a^2 + 36.0a^3 \\ \text{si } a \geq 1.0 \text{ et } a < 3.0 & : & \lambda = 14 + 1.4(a - 1.0) \\ \text{si } a \geq 3.0 & : & \lambda = 16.8 \end{array} \tag{2.51}$$

Avec a l'activité de l'eau que l'on peut calculer avec l'équation 2.52.

$$a = \frac{\rho_{H_2O} RT}{101325 \times 10^{-2.1794 + 0.02953(T-273.15) - 9.1837\times10^{-5}(T-273.15)^2 + 1.4454\times10^{-7}(T-273.15)^3}} \tag{2.52}$$

2.4.3 L'éléctro-osmose

Ce phénomène ne se produit que dans une seule direction, il est donc simplement calculé en fonction de la formule 2.53.

$$N_z^{osm} = n_d \frac{J}{F} \tag{2.53}$$

Où $n_d = -2.5$ est le coefficient d'éléctro-osmose.

2.4.4 Les conditions aux limites

Il y a deux conditions aux limites à pendre en considération :
- la frontière avec la cathode ;
- la frontière avec l'anode.

Dans les deux cas, il faudra calculer des λ_{anode} et $\lambda_{cathode}$ pour calculer les échanges d'eau entre la membrane et ce qui l'entoure. On applique la formule 2.51 aux $\rho_{ca}^{H_2O}$.

On s'appuie sur les hypothèses suivantes
- dans la cathode, on négligera simplement l'influence de ces échanges car il y a beaucoup d'eau dedans et qu'elle est constamment renouvelée ;
- dans l'anode on utilisera le taux d'humidité calculé dans la couche catalytique et les débits y seront transférés.

2.4.5 Le calcul dynamique

Ce que l'on a calculé précédemment, ce sont des débits molaires d'eau. Si on fait le bilan dans une maille de tous ces débits, on peut calculer la variation de ρ_{H_2O} au cours du temps, soit l'équation 2.54.

$$\frac{\partial \rho_{H_2O}}{\partial t} = \frac{1}{\Delta X \times \Delta Y \times \frac{l_{mem}}{5}} \left({N_x}^{dif} + {N_y}^{dif} + {N_z}^{dif} - {N_{x+1}}^{dif} - {N_{y+1}}^{dif} - {N_{z+1}}^{dif} + {N_z}^{osm} - {N_{z+1}}^{osm} \right) \tag{2.54}$$

Où l_{mem} est l'épaisseur de la membrane.
Ainsi, on peut calculer en temps réel les ρ_{H_2O} en utilisant la méthode d'Euler (voir équation 2.55).

$$\rho_{H_2O}^{t+\Delta t} = \rho_{H_2O}^{t} + \frac{\partial \rho_{H_2O}}{\partial t} \times \Delta t \tag{2.55}$$

Où Δt est le pas de temps choisi. Il faudra aussi recalculer les λ à partir des ρ_{H_2O} à chaque itération comme le montre l'algorithme 2.24.

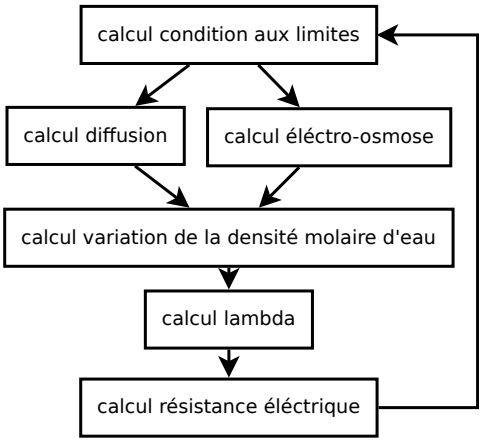


FIGURE 2.24 – L'algorithme de calcul dynamique de la membrane

La résistance électrique R_{elec} est calculée grâce à la formule 2.56 qui découle de la somme des calculs des résistances des 5 tronçons calculés à partir de la formule 1.36.

$$\begin{aligned} R_{elec} \;=\; & \sum\Big(\frac{1}{0.5139\lambda_{z1}-0.326)exp\big(1268.0\big(\frac{1}{303}-\frac{1}{T}\big)\big)\frac{\Delta S}{l_{mem}/5}} \\ & + \frac{1}{0.5139\lambda_{z2}-0.326)exp\big(1268.0\big(\frac{1}{303}-\frac{1}{T}\big)\big)\frac{\Delta S}{l_{mem}/5}} \\ & + \frac{1}{0.5139\lambda_{z3}-0.326)exp\big(1268.0\big(\frac{1}{303}-\frac{1}{T}\big)\big)\frac{\Delta S}{l_{mem}/5}} \\ & + \frac{1}{0.5139\lambda_{z4}-0.326)exp\big(1268.0\big(\frac{1}{303}-\frac{1}{T}\big)\big)\frac{\Delta S}{l_{mem}/5}} \\ & + \frac{1}{0.5139\lambda_{z5}-0.326)exp\big(1268.0\big(\frac{1}{303}-\frac{1}{T}\big)\big)\frac{\Delta S}{l_{mem}/5}}\Big) \end{aligned} \tag{2.56}$$

Où :
— ΔS est la surface des mailles ;

2.5 Modèle thermique

2.5.1 La discrétisation

Afin de choisir une discrétisation pertinente, on commence par étudier la dynamique thermique dans une pile. Pour se faire, on analyse d'abord les capacités et conductions thermiques des différentes parties de la cellule de pile à combustible. Les résultats de cette étude rapide pour une Ballard Nexa sont présentés dans le tableau 2.1.

organe	$l(mm)$	ρ	C	λ	C_{partie}	R_{th}
Membrane	0.2	2.0×10^3	1.1×10^3	2.1×10^{-1}	440	0.1
GDL	0.4	0.8×10^3	4.0×10^2	3.0×10^1	128	0.0013
Plaques	1.2	1.8×10^3	8.8×10^2	5.0×10^1	1584	0.0024

TABLE 2.1 – Estimation des caractéristiques thermiques de chaque organe de la cellule

organe	capacité relative	conductance relative
Plaque bipolaire	1	$\frac{1}{8}$
Membrane	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{200}$
GDL	$\frac{1}{12}$	1

TABLE 2.2 – Comparaison des caractéristiques de chaque organes

On en déduit une échelle relative des capacités et des conductions thermiques (voir table 2.2).
Comme ce qui nous intéresse surtout, ce sont les températures :
— des canaux pour les calculs fluidiques ;
— de la couche catalytique pour le calcul de la répartition de courant ;
— de la membrane pour le calcul de sa résistance.

On décide d'au moins séparer ces trois températures. On assemblera la couche de diffusion (GDL) à la couche des canaux car la couche de diffusion a une faible inertie thermique et qu'elle est traversée par les gaz qui viennent des canaux et donc aura toujours une température proche de celle des canaux. La figure 2.25 montre la manière dont le modèle thermique est maillé.

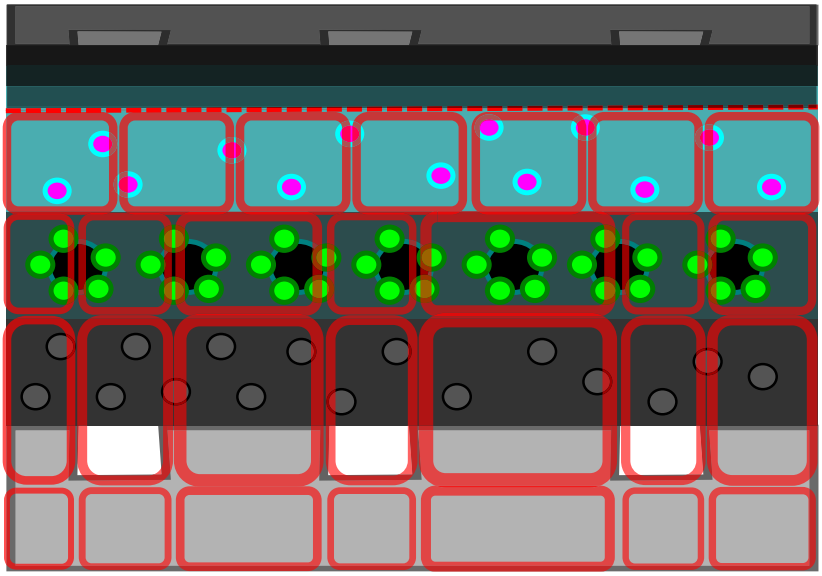


FIGURE 2.25 – La séparation et le maillage de la cellule de pile à combustible pour le modèle thermique

On remarquera dans la figure 2.25 que les maillages aux nivaux des canaux et de la base de la plaque bipolaire respectent le maillage fluidique alors que la membrane a un maillage carré pour faire la jonction entre l'anode et la cathode.

2.5.2 Le circuit de refroidissement

Le système de refroidissement d'une pile à combustible varie énormément d'un modèle à l'autre. Le point commun cependant qui est maintenu c'est que ce système de refroidissement est toujours un écoulement de fluide entre deux cellules. Ce qui peut parfois varier pendant le fonctionnement c'est la température d'entrée du fluide de refroidissement et son débit.

Si on fait une simulation de ces écoulements de la même façon que pour l'écoulement des gaz dans les

canaux, on se retrouvera avec une carte de débit surfacique du fluide de refroidissement. Ces débits peuvent être ramenés à un débit surfacique relatif ($N^{relatif}$) en les divisant par le débit d'entrée. Dans le cas de la pile *Ballard Nexa*, c'est un flux d'air de bas en haut comme le montre la carte estimée dans la figure 2.26.

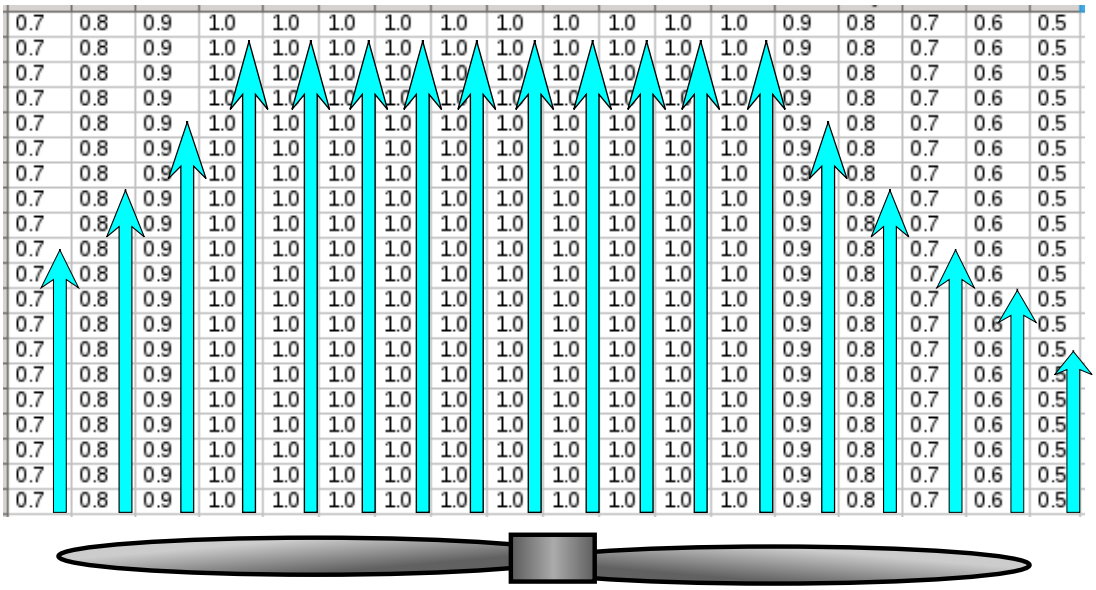


FIGURE 2.26 – Carte des débit relatifs du fluide de refroidissement

Les phénomènes de convections se sont avérés instables à modéliser en dynamique. En effet, les constantes de temps des phénomènes de convections sont beaucoup plus courtes que celles de la conduction car les échanges de chaleurs d'une maille à l'autre sont plus importants. Ils sont donc tous calculés en statique dans ce modèle.

On cherche à connaître la répartition des débits volumiques du fluide de refroidissement sur la surface de la cellule $N^{cooling}$. Pour se faire, on utilise la formule : $N^{cooling} = N^{relatif} \times N_{absolut}$ où $N_{absolut}$ donne l'intensité du refroidissement.

Imaginons maintenant le cas simple et local montré dans la figure 2.27.

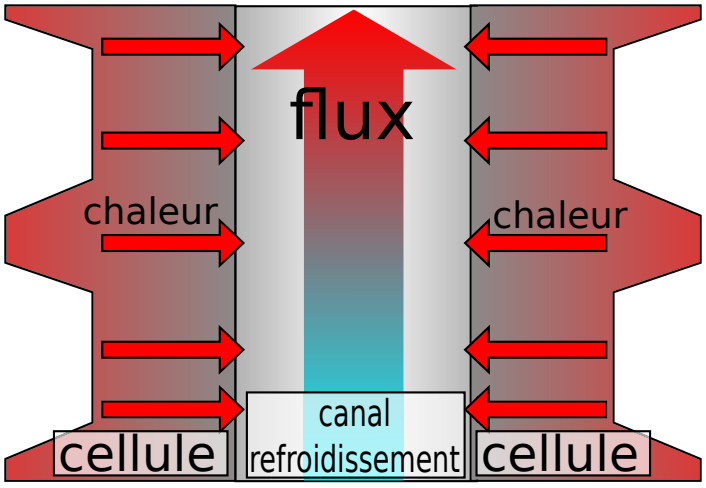


FIGURE 2.27 – Schéma du refroidissement de la base de la plaque bipolaire

La figure 2.27 illustre un phénomène très analogue à celui présenté pour le calcul des concentrations dans les canaux. On va donc utiliser la même méthode explicite pour résoudre rapidement le problème mais avec l'équation 2.57 qui donne comme formulation explicite l'équation 2.58.

$$C_v^{cool} \times N_{in}^{cool} \times T_{cool}^{in} + h^{cool} \times \Delta X \times \Delta Y \left(T_{base} - T_{cool}^{in}\right) - C_v^{cool} \times N_{out}^{cool} \times T_{cool}^{out} = 0 \tag{2.57}$$

$$T_{cool}^{out} = \frac{C_v^{cool} \times N_{in}^{cool} \times T_{cool}^{in} + h^{cool} \times \Delta X \times \Delta Y \left(T_{base} - T_{cool}^{in}\right)}{C_v^{cool} \times N_{out}^{cool}} \tag{2.58}$$

Ainsi, les étapes du calcul de la répartition de température du fluide de refroidissement sont :

1. Calculer des débits volumiques absolus en fonction de l'instruction de débit d'entrée et de la carte des débits relatifs ;
2. Placer les températures d'entrées du fluide de refroidissement sur les mailles d'entrées ;
3. Lancer les même agents que ceux utilisés pour le calcul des concentrations mais avec l'équation 2.57.

2.5.3 La base de la plaque bipolaire

Dans la base de la plaque bipolaire, il y a :
— de la convection avec le fluide de refroidissement ($Q_{cool \to base}$) ;
— de la convection avec les gaz de la réaction ($Q_{base \to fluid}$) ;
— de la conduction avec la couche des canaux ($Q_{canaux \to base}$) ;
— de la conduction en interne ($Q_{base,x}$ et $Q_{base,y}$).
Comme on peut le voir dans la figure 2.28.

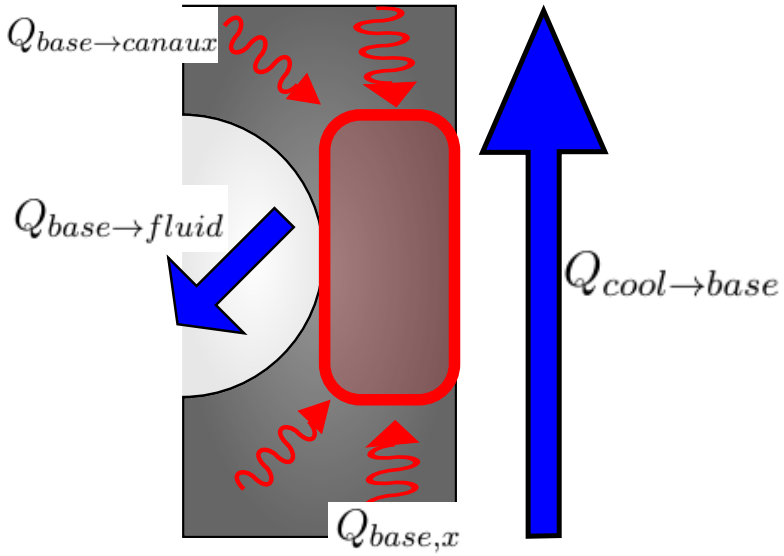


FIGURE 2.28 – Schéma des flux thermiques de la base de la plaque bipolaire

2.5.3.1 La convection avec le fluide de refroidissement

Il suffit simplement de reprendre le terme de convection présent dans le calcul explicite de la répartition des températures du fluide de refroidissement (voir l'équation 2.59).

$$Q_{cool \to base} = -h^{cool} \times \Delta X \times \Delta Y \left(T_{base} - T_{cool}\right) \tag{2.59}$$

Où :
— T_{base} est la température de la base de la plaque bipolaire ;
— h^{cool} est le coefficient de convection pour le fluide de refroidissement.

2.5.3.2 La convection avec les gaz de la réaction (carburant de la pile)

Le même type de formule s'applique ici mais avec la température du réactif plutôt que celle du fluide de refroidissement (voir l'équation 2.60).

$$Q_{base \to fluid} = h^{react} \times \Delta X \times \Delta Y \left(T_{base} - T_{fluid}\right) \tag{2.60}$$

Où T_{fluid} est la température des gaz dans les canaux.

2.5.3.3 La conduction vers les supports de canaux

La formule pour calculer un flux de conduction est la même que pour une conduction électrique (voir l'équation 2.61).

$$Q_{base \to canaux} = \left(\frac{\frac{1}{2} L_{base}}{\Delta X \times \Delta Y \times \kappa_{bipolaire}} + \frac{\frac{1}{2} L_{canauxGDL}}{\Delta X \times \Delta Y \times \kappa_{bipGDL}} \right) (T_{base} - T_{canaux}) \tag{2.61}$$

Où :

- L_{base} est l'épaisseur de la base de la plaque bipolaire ;
- $\kappa_{bipolaire}$ est la conductivité thermique de la plaque bipolaire ;
- κ_{bipGDL} est la conductivité thermique de la combinaison canaux et GDL : $\kappa_{bipGDL} = \frac{L_{GDL}}{L_{GDL}+L_{canaux}} \kappa_{GDL} + \frac{L_{canaux}}{L_{GDL}+L_{canaux}} \kappa_{bipolaire}$ avec :
  - L_{GDL}, l'épaisseur de la membrane ;
  - $L_{canaux} = prof$, l'épaisseur de la couche des canaux ;
  - κ_{GDL}, la conductivité thermique de la couche de diffusion.

2.5.3.4 La conduction dans le plan

La conduction interne se produit dans les deux directions $\overrightarrow{x}$ et $\overrightarrow{y}$. Elle est équivalente à la conduction vers les canaux (voir l'équation 2.62 et 2.63).

$$Q_{base,x} = \frac{\frac{1}{2}\Delta X + \frac{1}{2}\Delta X_{x-1}}{\Delta Y \times L_{base} \times \kappa_{bipolaire}} \left({T_{base}}^{x-1} - T_{base} \right) \tag{2.62}$$

$$Q_{base,y} = \frac{\frac{1}{2}\Delta Y + \frac{1}{2}\Delta Y_{y-1}}{\Delta X \times L_{base} \times \kappa_{bipolaire}} \left({T_{base}}^{y-1} - T_{base} \right) \tag{2.63}$$

2.5.3.5 La dynamique

Pour calculer l'évolution de la température de la base de la plaque bipolaire, on calcule d'abord sa dérivé avec l'équation 2.64.

$$\frac{\partial T_{base}}{\partial t} = \frac{1}{\Delta X \Delta Y L_{base} Cv_{bipole}} (Q_{cool \to base} - Q_{base \to fluid} - Q_{base \to canaux} + Q_{base,x} + Q_{base,y} - Q_{base,x+1} - Q_{base,y+1}) \tag{2.64}$$

Où Cv_{bipole} est la capacité thermique volumique de la plaque bipolaire.

On utilise ensuite la méthode explicite pour calculer la température à l'instant Δt suivant (voir équation 2.65).

$$T_{base}^{t+\Delta t} = T_{base}^{t} + \frac{\partial T_{base}}{\partial t} \times \Delta t \tag{2.65}$$

2.5.4 Les canaux

Dans la couche des canaux de la plaque bipolaire, il y a :

- de la convection avec les gaz de la réaction ($Q_{canaux \to fluid}$) ;
- de la conduction avec la base de la plaque bipolaire ($Q_{canaux \to base}$) ;
- de la conduction avec la couche catalytique ($Q_{canaux \to catalyt}$) ;
- de la conduction en interne ($Q_{canaux,x}$).

Comme on peut le voir dans la figure 2.29.

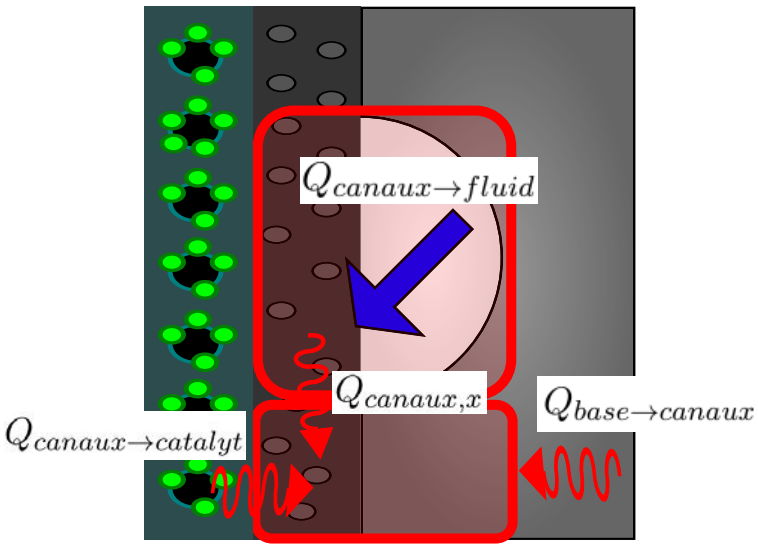


FIGURE 2.29 – Schéma des flux thermiques de la couche des canaux de la plaque bipolaire

2.5.4.1 La convection avec les gaz de la réaction

Les échanges de chaleur entre le gaz circulant dans les canaux et son environnement sont des convections. La température des gaz dans les canaux sera ici calculée à l'aide d'un modèle statique explicite. On utilise encore la même procédure multi-agents que pour le calcul des concentrations dans les canaux sauf que l'équation utilisée ici sera l'équation 2.66 qui donne la formule explicite 2.67.

$$C_v^{reactif} \times N_{in} \times A_{canal} \times {T_{fluid}}^{in} + Q_{base \to fluid} + \sum_{bord} Q_{canaux \to fluid} - C_v^{reactif} \times N_{out} \times A_{canal} \times {T_{fluid}}^{out} = 0 \tag{2.66}$$

$$T_{fluid}^{out} = \frac{C_v^{reactif} \times N_{in} \times A_{canal} \times {T_{fluid}}^{in} + Q_{base \to fluid} + \sum_{bord} Q_{canaux \to fluid}}{C_v^{reactif} \times N_{out} \times A_{canal}} \tag{2.67}$$

Où

- $C_v^{reactif}$ est la capacité thermique volumique des gaz dans les canaux ;
- A_{canal} est la section des canaux ;
- $Q_{canaux \to fluid}$ est calculé avec l'équation 2.68.

$$Q_{canaux \to fluid} = h^{reactif} A_{bord} \left(T_{canaux}^{bord} - T_{fluid} \right) \tag{2.68}$$

Où A_{bord} est la surface de rencontre entre les mailles des canaux et les mailles solides qui les bordent.

2.5.4.2 La conduction avec la base de la plaque bipolaire

Cette conduction est opposée à celle déjà calculée pour la base de la plaque bipolaire de manière à ce qu'il y ait conservation de l'énergie, on a donc l'équation 2.69.

$$Q_{canaux \to base} = -Q_{base \to canaux} \tag{2.69}$$

2.5.4.3 La conduction avec la couche catalytique

C'est aussi une conduction de solide à solide dans la direction des $\overrightarrow{z}$ on a donc l'équation 2.70.

$$Q_{canaux \to catalyt} = \frac{\frac{1}{2} L_{canauxGDL}}{\Delta X \times \Delta Y \times \kappa_{bipGDL}} \left(T_{canaux} - T_{catalyt} \right) \tag{2.70}$$

On ne voit pas apparaître de terme de conduction ou d'épaisseur de la couche catalytique car son épaisseur est considérée comme négligeable.

2.5.4.4 La conduction à l'intérieur de la plaque bipolaire

On retrouve ici la même conduction interne que dans la base de la plaque bipolaire (voir les équations 2.71 et 2.72) à la différence qu'il faudra faire attention pendant le calcul de toujours calculer ces flux entre deux mailles solides.

$$Q_{canaux,x} = \frac{\frac{1}{2}\Delta X + \frac{1}{2}\Delta X_{x-1}}{\Delta Y \times (L_{canaux} + L_{GDL}) \times \kappa_{bipGDL}} \left({T_{canaux}}^{x-1} - T_{canaux}\right) \tag{2.71}$$

$$Q_{canaux,y} = \frac{\frac{1}{2}\Delta Y + \frac{1}{2}\Delta Y_{y-1}}{\Delta X \times canaux + L_{GDL}) \times \kappa_{bipGDL}} \left({T_{canaux}}^{y-1} - T_{canaux}\right) \tag{2.72}$$

2.5.4.5 La dynamique de la température de la plaque bipolaire

Pour calculer l'évolution de la température de la couche des canaux (seulement la partie solide), on calcule d'abord sa dérivé avec l'équation 2.73.

$$\begin{array}{rcl} \frac{\partial T_{canaux}^{solide}}{\partial t} & = & \frac{1}{\Delta X \Delta Y (L_{canaux} Cv_{bipole} + L_{GDL} Cv_{GDL})} \\ & \times & (\sum_{bord} Q_{canaux \to fluid} + Q_{base \to canaux} - Q_{canaux \to catalyt} + Q_{canaux,x} \\ & + & Q_{canaux,y} - Q_{canaux,x+1} - Q_{canaux,y+1}) \end{array} \tag{2.73}$$

Où Cv_{GDL} est la capacité thermique volumique de la couche de diffusion.

On utilise ensuite la méthode explicite pour calculer la température à l'instant Δt suivant (voir équation 2.74.

$$T_{canaux}^{solide}(t + \Delta t) = T_{canaux}^{solide}(t) + \frac{\partial T_{canaux}^{solide}}{\partial t} \times \Delta t \tag{2.74}$$

2.5.5 La couche catalytique

La couche catalytique est considérée d'épaisseur négligeable. Comme la constante de temps des phénomènes thermiques dépend directement de la capacité thermique de l'élément, si l'épaisseur est négligeable, alors la constante de temps de la température est négligeable aussi. On décide donc de déterminer sa température en temps réel avec un calcul statique. Par ailleurs, comme on considère l'épaisseur de la couche catalytique comme négligeable, il n'y a pas de surface de conduction dans les directions $\overrightarrow{x}$ et $\overrightarrow{y}$. Ainsi, la température de la couche catalytique ne dépend plus que de :

— T_{canaux} et T_{fluide} qui sont à sa frontière inférieure ;
— $T_{membrane}$ qui est à sa frontière supérieure.

Mais la couche catalytique, c'est aussi l'endroit où a lieu d'importantes pertes d'énergie sous forme de chaleur. Il va donc falloir ajouter un terme source qui est donné dans l'équation 2.75.

$$S_{catalyt} = (U_{NERNST} - U_{cell} + R_{elec} \times J)\, J \tag{2.75}$$

Le terme $S_{catalyt}$ est simplement calculé comme les pertes dans la pile à combustible sauf celles dues à la résistance électrique de la membrane.

Pour avoir la température de la couche catalytique, il suffit de résoudre l'équation statique 2.76.

$$\begin{array}{l} S_{catalyt}\alpha - M_{reactif} N_{ca}^{reactif} C_m^{reactif} T_{fluid} - N_{ca}^{produit} M_{produit} \left(C_m^{produit} T_{ca} + L_{produit}^{evap}\right) \\ + Q_{canaux \to catalyt} - Q_{catalyt \to membrane} = 0 \end{array} \tag{2.76}$$

Ce qui nous donne l'équation directe 2.77.

$$T_{ca} = \frac{S_{cla} + \frac{\kappa_{membrane} \Delta X \Delta Y}{0.5 * L_{membrane}} T_m + \frac{\kappa_{bipoleGDL} \Delta X \Delta Y}{0.5(L_{canaux} + L_{GDL})} T_{canaux}}{\frac{\kappa_{membrane} \Delta X \Delta Y}{0.5 * L_{membrane}} + \frac{\kappa_{bipoleGDL} \Delta X \Delta Y}{0.5(L_{canaux} + L_{GDL})}} \tag{2.77}$$

Où :
— S_{cla} est une source de chaleur calculée avec l'équation 2.78 en calculant la différence entre le potentiel standard et le potentiel réel sans compter les pertes par effet Joule plus un bilan des quantités de chaleur transportées par les gaz pendant la réaction ;
— $\kappa_{membrane}$ est la capacité thermique surfacique de la membrane ;
— $L_{membrane}$ est l'épaisseur de la membrane ;
— T_m est la température de la membrane ;
— $N_{ca}^{produit}$ est le débit molaire de produits à la couche catalytique ;
— $C_m^{reactif}$ est la capacité thermique massique des réactifs consommés dans la réaction ;
— $M_{reactif}$ est la masse molaire des réactifs ;
— $L_{produit}^{evap}$ est l'énergie d'évaporation massique des produits de la réaction ;
— α est un coefficient de symétrie pour distribuer les pertes des cotés anode et cathode.

$$S_{cla} = U_0 - U_{cell} + R_{elec}J\alpha - N_{ca}^{produit}M_{produit}(C_m^{produit}T_{ca} + L_{produit}^{evap}) + N_{ca}M_{reactif}C_m^{reactif}T_{canaux} \quad (2.78)$$

Où U_0 est le potentiel standard d'oxydo-réduction de la réaction électrochimique.

2.5.6 La membrane

Dans la base de la membrane, il y a :
— de la conduction avec la couche catalytique coté cathode ($Q_{catalyt\to membrane}^{cathode}$) ;
— de la conduction avec la couche catalytique coté anode ($Q_{catalyt\to membrane}^{anode}$) ;
— de la conduction en interne ($Q_{membrane,x}$ et $Q_{membrane,y}$) ;
— une source de chaleur due aux pertes par effet Joule (S_{joul}) ;
Comme on peut le voir dans la figure 2.30.

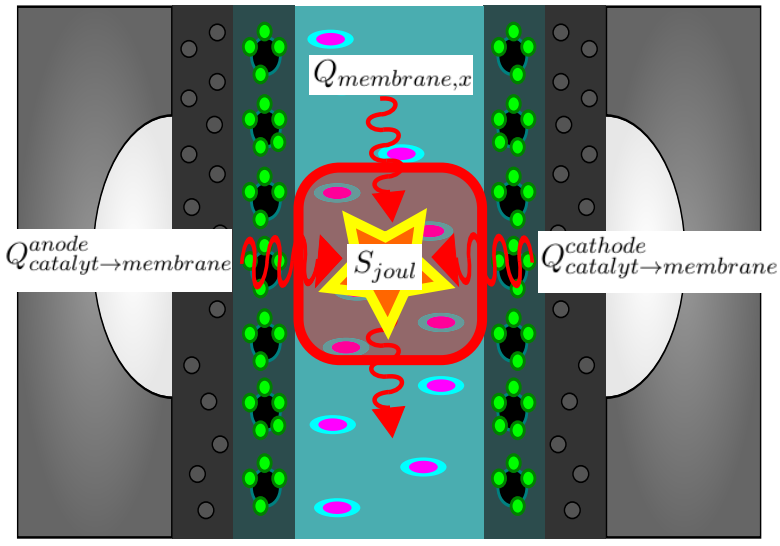


FIGURE 2.30 – Schéma des flux thermique de la membrane

2.5.6.1 La conduction avec l'anode et la cathode

Les deux flux de conduction de chaleur peuvent être calculés avec les équations 2.79 et 2.80.

$$Q_{catalyt\to membrane}^{anode} = \frac{\frac{1}{2}L_{membrane}}{\Delta X \times \Delta Y \times \kappa_{membrane}}\left(T_{ca}^{anode} - T_m\right) \quad (2.79)$$

$$Q_{catalyt\to membrane}^{cathode} = \frac{\frac{1}{2}L_{membrane}}{\Delta X \times \Delta Y \times \kappa_{membrane}}\left(T_{ca}^{cathode} - T_m\right) \quad (2.80)$$

2.5.6.2 La conduction à l'intérieur de la membrane

Ils sont calculés comme toujours avec des équations de même type que équations 2.81 et 2.82.

$$Q_{membrane,x} = \frac{\frac{1}{2}\Delta X_{x-1} + \frac{1}{2}\Delta X}{L_{membrane}\Delta Y \kappa_{membrane}} \left(T_m^{x-1} - T_m\right) \tag{2.81}$$

$$Q_{membrane,y} = \frac{\frac{1}{2}\Delta Y_{y-1} + \frac{1}{2}\Delta Y}{L_{membrane}\Delta X \kappa_{membrane}} \left(T_m^{y-1} - T_m\right) \tag{2.82}$$

2.5.6.3 Les pertes par effet Joule

La source calculée pour l'effet Joule est calculée avec l'équation 2.83.

$$S_{joul} = R_{elec} \times J^2 \tag{2.83}$$

2.5.6.4 La dynamique de la température de la membrane

Pour calculer l'évolution de la température de la membrane, on calcule d'abord sa dérivée avec l'équation 2.84.

$$\begin{array}{rcl} \frac{\partial T_m}{\partial t} & = & \frac{1}{\Delta X \Delta Y L_{membrane} Cv_{membrane}} \\ & \times & (Q^{anode}_{catalyt \to membrane} + Q^{cathode}_{catalyt \to membrane} \\ & + & Q_{membrane,x} + Q_{membrane,y} - Q_{membrane,x+1} - Q_{membrane,y+1} + S_{joul}) \end{array} \tag{2.84}$$

Où $Cv_{membrane}$ est la capacité thermique volumique de la membrane.

On utilise ensuite la même méthode explicite pour calculer la température à l'instant Δt suivant (voir équation 2.85).

$$T_m^{t+\Delta t} = T_m^t + \frac{\partial T_m}{\partial t} \times \Delta t \tag{2.85}$$

2.6 La modélisation réduite équivalente

2.6.1 La nécessité de réduire la complexité des canaux

La figure 2.31 donne un exemple de canaux que l'on trouve dans une pile à combustible.

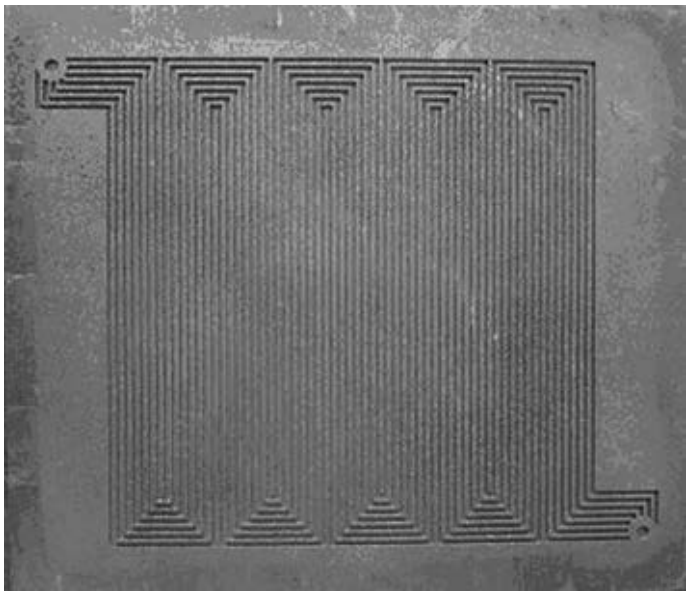


FIGURE 2.31 – Exemple de structure de canaux d'une pile à combustible

On remarque qu'il y a un nombre important de canaux côte à côte. Toute la structure est assez dense et la distance entre deux canaux est toujours la même. Ainsi, il faudrait quand même un maillage fin pour les modéliser. Malgré les optimisations déjà réalisées, comme la complexité de la résolution des pressions dans les canaux va en N^3, les temps de calculs risquent de devenir rapidement importants.

Ainsi, il est nécessaire de simplifier la couche des canaux pour avoir un maillage moins important si l'on veut que le modèle puisse tourner en temps réel. Les figures 2.32, 2.33, 2.34, 2.35 et 2.36, 2.37 donnent un aperçu de ces simplifications.



FIGURE 2.32 – Configuration de canaux série réelle

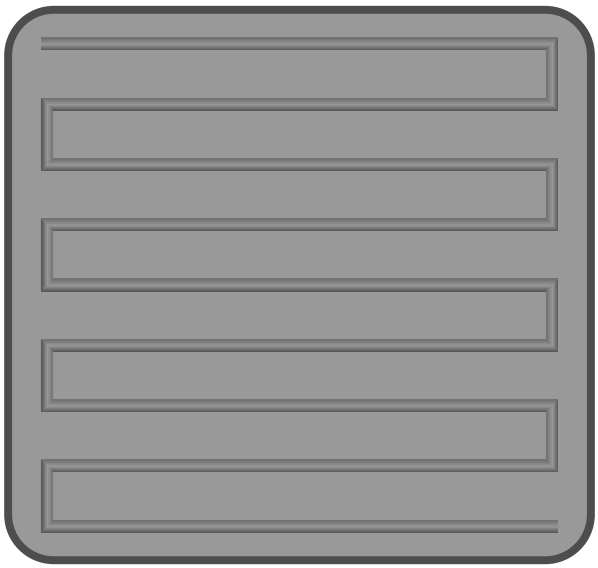


FIGURE 2.33 – Configuration de canaux série simplifiée



FIGURE 2.34 – Configuration pour les canaux en parallèle réelle



FIGURE 2.35 – Configuration de canaux parallèle simplifiée

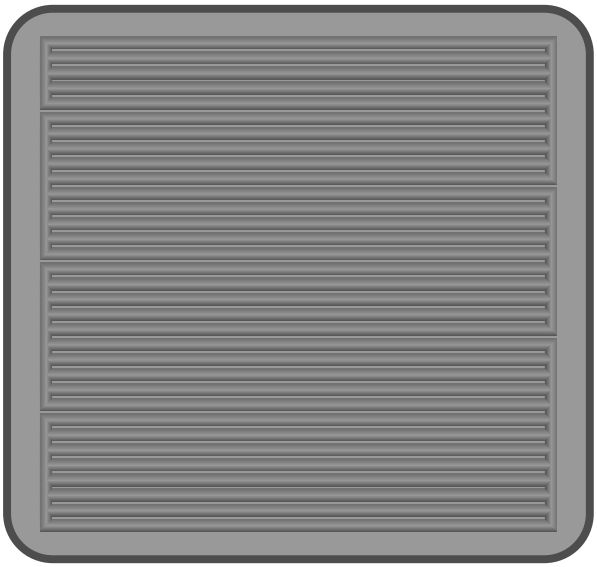


FIGURE 2.36 – Configuration de canaux série parallèle réelle

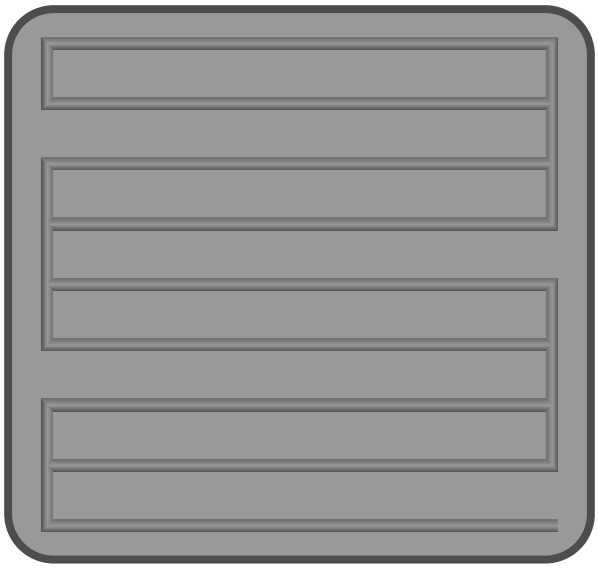


FIGURE 2.37 – Configuration de canaux série parallèle simplifiée

Pour que les simplifications soient correctes, elles doivent être représentatives des configurations réelles. Elles doivent donner les mêmes tendances pour la répartition générale des pressions et des concentrations.

2.6.2 Les conséquences de cette simplification et leurs importances

En simplifiant la couche des canaux, on change certaines de ses propriétés, malgré le fait que ces simplifications soit analogues.

2.6.2.1 Les conséquences fluidiques

2.6.2.1.1 Au niveau des canaux

On considère que toutes les configurations de canaux modélisées dans le modèle peuvent être considérées comme des combinaisons des configurations série (fig 2.33) et parallèle (fig 2.35). Ainsi, on considérera les conséquences sur ces deux types de configurations.

Dans le cas d'une perte série Si on avait un canal serpentant la surface de la cellule devient plus court, cela va se traduire par une diminution du ΔP entre l'entrée et la sortie. Les autres paramètres ne posent pas de problème car la vitesse des gaz reste la même et leurs diffusions des canaux vers la couche de diffusion s'adaptera d'elle même.

Dans le cas d'une perte parallèle Si on avait plusieurs canaux en parallèle et que l'on se retrouve avec moins de canaux en parallèle, il y aura à l'inverse un ΔP plus important que dans le cas réel. En effet, ayant moins de canaux pour passer, les gaz vont se déplacer plus rapidement dans les canaux. Ainsi, la chute de pression due aux frottements sur les parois des canaux va être plus importante.

2.6.2.1.2 Au niveau de la couche de diffusion

Ici, c'est l'écart entre les canaux qui a augmenté. La conséquence de cet écart, c'est que dans la configuration simplifiée, les gaz doivent parcourir plus de chemin dans la couche de diffusion pour atteindre les zones entre les canaux. Ainsi, la diffusion sera moins importante dans ces zones.

2.6.2.2 Les conséquences thermiques

Les conséquences thermiques de cette simplification sont toutes dues à l'augmentation des écarts entre canaux.

2.6.2.2.1 La réduction de la conductivité transversale

Comme il y a moins de canaux et qu'ils sont plus éloignés, il y a plus de matière solide dans la version simplifiée que dans la version réelle. La conséquence, c'est que la conductance thermique de la couche des canaux entre la couche catalytique et la base de la plaque bipolaire est surestimée. En effet, comme il y a plus de matière solide, la chaleur passera plus vite au travers dans le cas simplifié.

2.6.2.2.2 La réduction de la convection latérale

On peut s'attendre à avoir le même problème de surestimation de la conductance mais cette fois ci dans le plan de la couche des canaux. Cependant, la façon dont est maillé le système fait disparaître ce problème puisqu'il n'y a jamais deux mailles solides l'une à coté de l'autre.

En fait, le problème est déplacé aux échanges de chaleur par convection entre les mailles de gaz et les mailles solides. En effet, dans la configuration réelle, comme il y a plus de canaux, les surfaces d'échanges gaz/solide sont plus importantes que dans la version simplifiée.

2.6.3 Les solutions apportées pour réduire ces conséquences

2.6.3.1 Le coefficient empirique K

Si l'on se réfère à l'équation 2.6. On remarque que la chute de pression dans un canal est proportionnelle à la vitesse d'écoulement du fluide dans ce canal. Ainsi, il est possible de faire une analogie avec les circuits électriques. Les tensions U représentent les ΔP et les courants I, les vitesses d'écoulements V. Ainsi, R sera la résistance qui équivaut au terme : $\left(\frac{K\mu L}{D^2}\right)$ et la résistivité $r = \left(\frac{K\mu}{D^2}\right)$.

Les figures 2.38, 2.39, 2.40 et 2.41 présentent les circuits équivalent des configurations réelles et simplifiées pour des canaux en série et en parallèle.

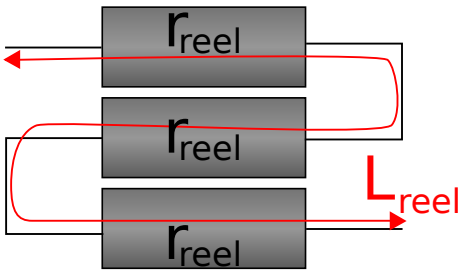


FIGURE 2.38 – Schéma équivalent pour la configuration de canaux série réelle

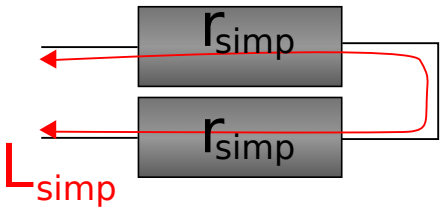


FIGURE 2.39 – Schéma équivalent pour la configuration de canaux série simplifiée

Pour que les schémas équivalents simplifiés (fig 2.39 et 2.41) soient équivalents à leurs homonymes réels (fig 2.38 et 2.40), il faut que leurs résistances équivalentes soient égales. Ainsi, on pose respectivement les équations 2.86 et 2.87 pour les configurations série et parallèle.

$$r_{reel} \times L_{reel} = r_{simp} \times L_{simp} \Longleftrightarrow r_{simp} = \frac{L_{reel}}{L_{simp}} \times r_{reel} \tag{2.86}$$

$$\frac{1}{\sum_{i=1}^{Nb_{reel}} \frac{1}{R_{reel}}} = \frac{R_{reel}}{Nb_{reel}} = \frac{R_{simp}}{Nb_{simp}} \Longleftrightarrow R_{simp} = \frac{Nb_{simp}}{Nb_{reel}} \times R_{reel} \tag{2.87}$$

Un moyen simple d'agir pour modifier les résistances et résistivité R_{simp} et r_{simp} est de modifier le coefficient empirique K. Ainsi, K doit être estimé dans un premier temps de la façon suivante : $K = 32 \times \frac{L_{reel}}{L_{simp}}$ ou $K = 32 \times \frac{Nb_{simp}}{Nb_{reel}}$.

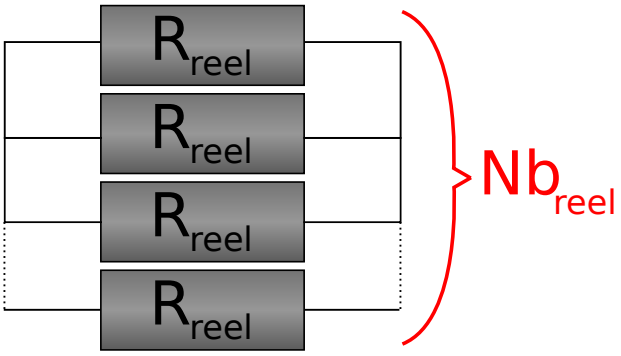


FIGURE 2.40 – Schéma équivalent pour la configuration de canaux parallèle réelle

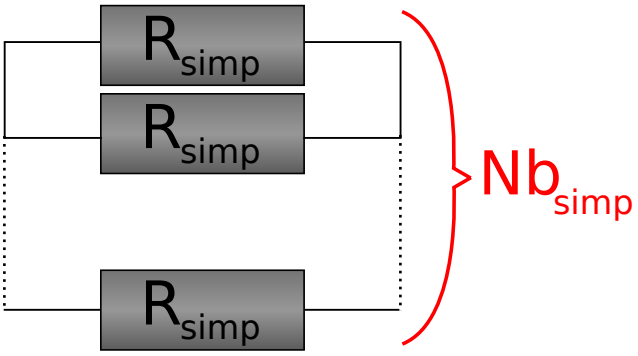


FIGURE 2.41 – Schéma équivalent pour la configuration de canaux parallèle simplifiée

2.6.3.2 Les coefficients de diffusion

On s'intéresse à une zone de n'importe quelle configuration de canaux, où on a des canaux qui sont placés alignés les uns à coté des autres (voir figure 2.42). On imagine la configuration simplifiée de cette zone avec deux fois moins de canaux alignés (voir figure 2.43).

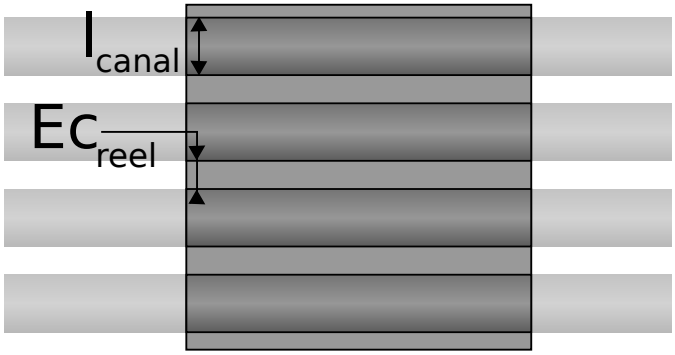


FIGURE 2.42 – Zone de configuration pour les canaux réels

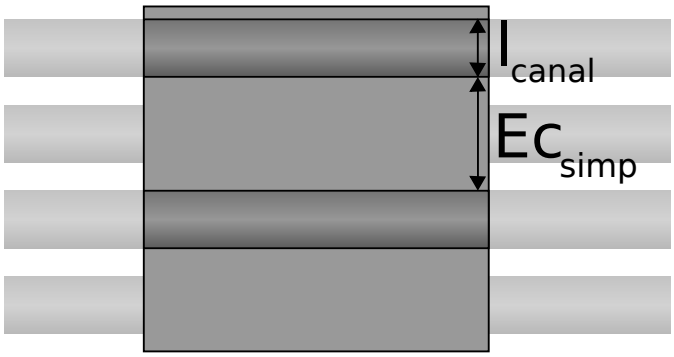


FIGURE 2.43 – Zone de configuration de canaux simplifiés ($B = 2$)

B est considéré comme le taux de simplification ($B = \frac{Nb_{reel}}{Nb_{simp}}$). D'abord, on peut dire que la diffusion au dessus des canaux sera deux fois moins importante dans la configuration simplifiée puisqu'il y a deux fois moins de canaux. Donc la résistance équivalente de diffusion dans le modèle de la GDL doit être divisée par $B = 2$ pour garder la même diffusion que dans la configuration réelle (d'où sa présence dans l'équation 2.19).

Pour ce qui est de l'écart entre les deux canaux, en généralisant une chaîne de côtes en fonction de B, on peut calculer Ec_{simp} avec l'équation 2.88.

$$Ec_{simp} = B \times Ec_{reel} + (B-1) \times l_{canal} \tag{2.88}$$

Comme la résistance équivalente de diffusion est proportionnelle à cet écart, il faut multiplier la résistance équivalente de diffusion pour notre configuration simplifiée par $\frac{Ec_{reel}}{Ec_{simp}} = \left(\frac{Ec_{reel}}{B \times Ec_{reel} + (B-1) l_{canal}}\right)$ d'où la présence de ce terme dans les équations 2.17 et 2.18.

2.6.3.3 La correction de la convection thermique

On repart de notre exemple présenté par les figures 2.42 et 2.43. Si il y a deux fois moins de canaux, il y a deux fois moins de convection entre les canaux et le reste de l'électrode. Ainsi, il faut multiplier le coefficient de convection $h^{reactif}$ par deux. Donc $h^{reactif}$ doit être initialisé par sa vrai valeur multipliée par B.

2.6.3.4 La correction de la capacité thermique

On repart encore de l'observation des figures 2.42 et 2.43. Les zones entre deux canaux dans la configuration simplifiée n'ont pas réellement la même surface que deux fois les zones entre les canaux de la

configuration réelle. Un canal a disparu, donc en réalité il faudrait enlever sa surface pour pouvoir calculer une capacité thermique équivalente. Donc la capacité thermique massique de la couche des canaux doit être corrigée par le rapport $\frac{Ec_{simp}-(B-1)\times l_{canal}}{Ec_{simp}}$. Soit l'équation 2.89 :

$$C_{simp} = \frac{Ec_{simp} - (B-1) \times l_{canal}}{Ec_{simp}} C_{reel} = \frac{Ec_{reel} B}{(l_{canal} + Ec_{reel})B - l_{canal}} C_{reel} \tag{2.89}$$

Où C_{simp} est la capacité thermique massique qu'il faut mettre en paramètre du modèle en utilisant la configuration simplifiée et C_{reel} est la vraie capacité thermique massique du matériau de la couche des canaux.

2.7 Conclusion partielle

Ce modèle est une conception originale car il doit répondre à des contraintes inhabituelles. Il se situe au niveau de la cellule. Il se divise en 4 modules principaux :

— le modèle fluidique ;
— la membrane ;
— le modèle électrique ;
— le modèle thermique.

Une simplification des équations de Navier-Stockes permet un calcul rapide des répartitions de pression et de flux des gaz dans les canaux par résolution d'un système d'équation. Il y a aussi un petit système multi-agents qui fait apparaître les concentrations en fonction des flux. Dans la couche de diffusion, c'est un système de résistance équivalente qui permet d'obtenir une sorte de filtrage intelligent des données au niveau des canaux vers une répartition des concentrations en gaz dans la couche catalytique. Des itérations successives viennent stabiliser le tout.

Le modèle de la membrane et de la thermique sont de simples modèles de calcul explicite dynamique. Cependant, tous les phénomènes de convection thermique au niveau des gaz sont calculés de manière statique par le même système multi-agents que dans le module fluidique.

Le modèle électrique est une construction originale qui s'appuie sur un assemblage d'interpolation pour résoudre la problématique du respect des équations électrochimiques quel que soit les répartitions des autres grandeurs.

Une problématique liée à la connexion entre les maillages des différentes couches de la cellule apparaît.

Afin d'éviter d'avoir un maillage trop fin qui rendrait le calcul trop lent, une simplification au niveau des configurations de canaux est opérée. Ainsi, on réduit le nombre des canaux et on utilise des paramètres spécifiquement choisis pour que la configuration simplifiée soit équivalente en comportement à la configuration réelle.

Chapitre 3

Développement et implémentation du code temps réel

3.1 Les tactiques

Pour répondre aux besoins stratégiques, quelques tactiques ont été développées.

3.1.1 La transformation d'un programme séquentiel en un programme de cause/conséquence

Les programmes qui tournent dans un CPU sont programmés en langage C. Le langage C comme la grande majorité des langages de programmation non émulés est séquentiel. Cela veut dire, qu'un programme en C sera une suite d'instructions. Normalement, on peut considérer que les instructions suivantes ont besoin que les instructions précédentes aient été exécutées pour être exécutées à leur tour correctement. Mais ce n'est pas toujours le cas, certaines instructions qui se suivent peuvent être indépendantes les unes des autres. Par exemple, lorsque l'on veut appliquer une formule sur toutes les mailles de notre système, il n'est pas important que la maille d'avant ait été calculée pour calculer une nouvelle maille si la formule de calcul n'en a pas besoin. Quand on construit un algorithme, on s'est habitué à l'imaginer de manière séquentielle comme une suite d'étapes alors que cette manière de concevoir un programme est déjà une manière spécialisée de voir les choses. C'est un problème, car ce type de conception fait disparaître toutes les propriétés inadaptables sur une programmation séquentielle. Prenons un exemple simple pour illustrer l'idée : la préparation d'une mousse au chocolat. La figure 3.1 montre une recette de préparation de mousse au chocolat et la figure 3.2 montre les vraies dépendances entre les étapes.

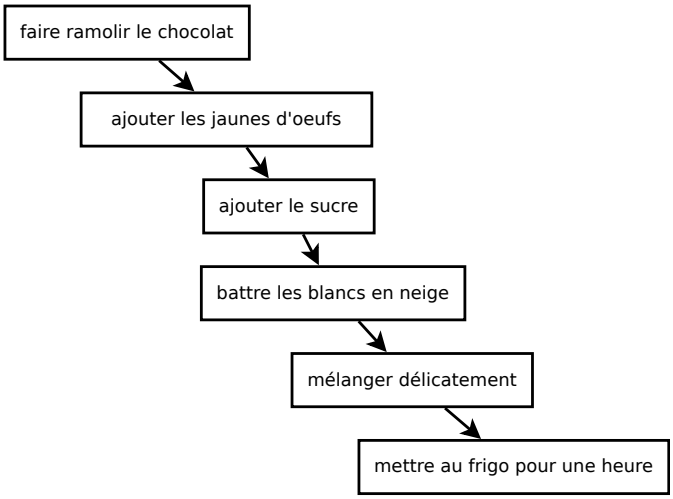


FIGURE 3.1 – Algorithme de recette de mousse au chocolat

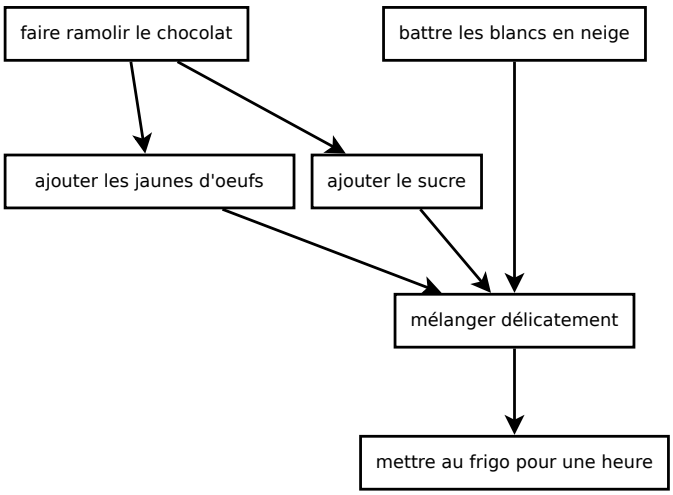


FIGURE 3.2 – Algorithme de recette de mousse au chocolat revu avec des liaisons de dépendances entre les étapes

Chaque flèche dans la figure 3.1 revient à dire "après quoi on fait..." alors que dans la figure 3.2 les flèches veulent plutôt dirent "est fait pour pouvoir faire après". C'est un peu comme si on avait revu notre algorithme comme un arbre de causes/conséquences qui mène à notre objectif. Cette manière de revoir les algorithmes permet un grand nombre d'optimisations.

3.1.2 La découverte des variables intermédiaires de calcul

Lorsque l'on a une formule, comme par exemple : $Y = (A + B \times C) / (D - E)$. On peut la voir comme une égalité connue entre deux expressions, c'est la manière mathématique de voir les choses. Mais on peut aussi la voir comme un moyen de connaître la valeur de Y quand on connaît les valeurs de A, B, C et D, E. En fait, cette formule est un procédé pour obtenir Y, ou encore un algorithme. Les règles de l'arithmétique nous disent dans quel ordre faire les calculs. Mais là encore, il est possible de voir les choses sous la forme d'un arbre de cause/conséquence qui mène au résultat. Les figures 3.3 et 3.4 représentent respectivement ces arbres de causes pour la formule que l'on a vu précédemment et une autre formule : $Z = (D - E) + A/ (B \times C)$.

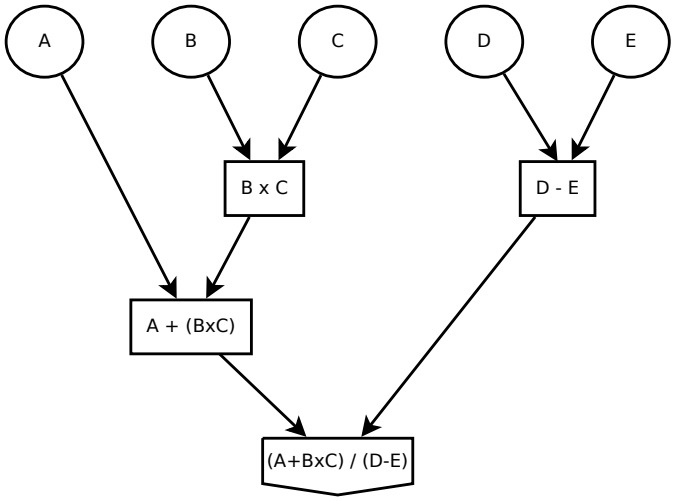


FIGURE 3.3 – Arbre de calcul de la formule : $Y = (A + B \times C) / (D - E)$

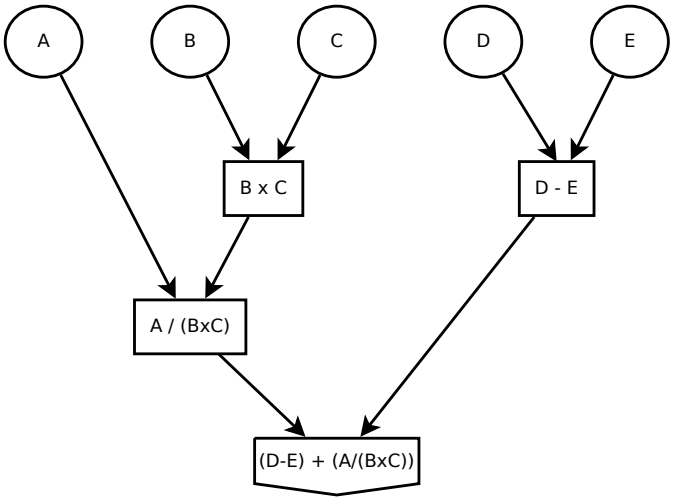


FIGURE 3.4 – Arbre de calcul de la formule : $Z = (D - E) + A/ (B \times C)$

Quand on regarde les arbres des figures 3.3 et 3.4, on remarque que certaines branches se ressemblent. Finalement, il est possible de combiner ces deux arbres en un seul : l'arbre de la figure 3.5.

Chaque nœuds de notre arbre étant une opération mathématique, on est passé de 4 opérations pour Y plus 4 opérations pour Z soit 8 opérations pour les deux à 6 opérations pour calculer les deux. De manière plus concrète, au lieu de faire :

1. calculer $Y = (A + B \times C) / (D - E)$
2. calculer $Z = (D - E) + A/ (B \times C)$.

On fera :

1. calculer $K = B \times C$
2. calculer $L = D - E$
3. calculer $Z = L + A/K$
4. calculer $Y = (A + K) / L$

Bien que cela fait plus d'étapes, il y a moins d'opérations, donc le calcul est moins complexe (au sens algorithmique). Cependant, il faut noter que cela ajoute deux variables à mémoriser. Ainsi, il y a une contre partie, c'est la consommation de la mémoire. Avec cette méthode d'optimisation, on gagnera en vitesse de calcul mais notre programme nécessitera plus de mémoire vive.

Dans la physique de la pile, il y a beaucoup de grandeurs intermédiaires que l'on retrouve dans les formules physiques. Notamment les conductances thermiques, électriques ou fluidiques (par analogie) qui sont utilisées plusieurs fois. Dans le calcul statique des pressions dans les canaux, les coefficients du système composé se répètent plusieurs fois dans différentes équations. On a aussi tous les flux des parties dynamiques

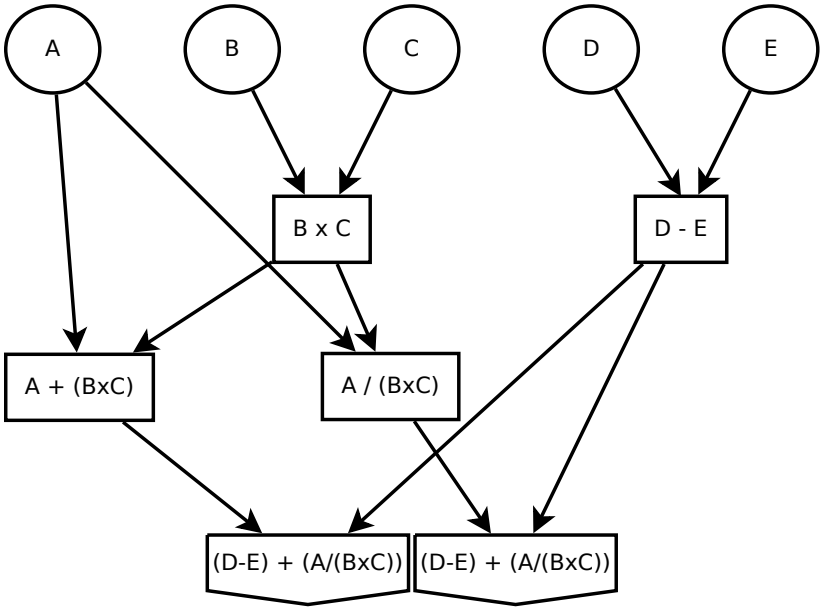


FIGURE 3.5 – Arbre de calcul des grandeurs Y et Z par les formules $Y = (A + B \times C) / (D - E)$ et $Z = (D - E) + A / (B \times C)$

et conservatives qui se répètent au moins deux fois entre la maille d'où ils sortent et la maille où ils entrent, etc. Toutes ces petites optimisations permettent de diminuer grandement la complexité des parties de calcul directe et ainsi augmenter sensiblement la performance en temps réel du modèle.

3.1.3 La découverte des constantes

Dans le même ordre d'idée, imaginons que B et C soit des constantes. Il devient totalement inutile de recalculer à chaque fois K. En fait, il suffit de faire l'opération une fois et ensuite on réutilise K directement à chaque fois que l'on veut calculer Y ou Z. De manière plus générale, une fois notre arbre de causes/conséquences construit, on peut considérer comme des constantes toutes les valeurs des nœuds qui n'ont que des feuilles constantes au dessus d'eux. Ainsi, toutes ces valeurs peuvent être calculées au lancement du programme du modèle puis réutilisées directement. C'est cette optimisation directe sur les calculs qui fait gagner le plus de vitesse de calcul. En effet, il y a une quantité de variables très importante qui peuvent être précalculées en fonction des paramètres physiques de la pile et notamment :

— Les conductances électriques, thermiques, fluidiques (par analogie) ;
— les sections de canaux ;
— toutes les surfaces et volumes utilisés par les systèmes dynamiques ;
— toutes les propriétés directement liées aux choix des réactifs de la piles, etc.

3.1.4 La gestion des erreurs numériques du CPU

Enfin, une dernière manière d'utiliser cette représentation, c'est pour limiter l'erreur numérique dans le CPU. En effet, les opérations entre un nombre très grand et un nombre très petit sont sources d'erreurs. Cela peut sembler négligeable, mais le module de calcul statique des pressions dans les canaux ne fonctionne tout simplement pas sans certains remaniements pour limiter cette erreur. En effet, le fait de projeter les calculs comme des liens de cause à effet permet aussi de les remanier différemment, choisir éventuellement d'autres variables intermédiaires. On cherchera donc à changer la forme de notre arbre jusqu'à ce qu'il n'y ait plus de nœuds unissant des valeurs susceptibles de provoquer une erreur conséquente.

Dans le cas du calcul statique des pressions dans les canaux, qui est le seul cas dans le modèle de la pile à combustible, il a été nécessaire d'effectuer ce remaniement. Deux transformations sont effectuées :

— au niveau de la pression absolue dans les canaux ;
— au niveau du calcul du coefficient intermédiaire qui lie le débit molaire entre deux mailles et la perte de pression.

3.1.4.1 La pression absolue dans les canaux

Si on prend la différence de pression $\Delta P \sim 0.1Pa$ entre deux mailles d'un canal de la pile et la pression absolue moyenne $P_{moy} \sim 200000Pa$ on comprend que l'on risque d'avoir dans le CPU : $P_{moy} + \Delta P = P_{moy}$ et donc $P_{x+1} = P_x + \Delta P = P_x$ donc une répartition de pression constante à la fin. Pour que le calcul soit possible, la pression doit être exprimée en pression relative dans un premier temps. On prendra donc un autre P juste avant le calcul du système et après avoir calculé toute les valeurs intermédiaires nécessitant l'usage de P. On choisira de fixer $P = 0Pa$ en entrée ou en sortie en fonction de celui que l'on connaît. Dans notre modèle on aura :

— $P_{IN} = 0$ du coté anode (car on sait que la pression du réactif du coté anode est $2Bar$ en entrée) ;
— $P_{OUT} = 0$ du coté cathode (car on sait que la pression du coté cathode est $1atm$ en sortie puisque les canaux débouchent à l'air libre).

Le système est donc résolu après cette transformation, puis on remet le nivau dans le vrai après cette résolution en faisant :

— $P \leftarrow P + 2Bar$ du coté anode ;
— $P \leftarrow P + 1atm$ du coté cathode.

3.1.4.2 Le coefficient de perte de pression

Il y a un coefficient intermédiaire de perte de pression qui entre dans les équations du système à résoudre sous la forme de l'équation 3.1.

$$P_{x+1} - P_x = \Delta P = \psi N_x \tag{3.1}$$

Où Nx est le débit entre les deux mailles et ψ est le coefficient traité ici. On comprend donc que c'est un coefficient très critique. Il sera calculé sous la forme de l'équation 3.2.

$$\psi = (\mu / (\Delta Y \times prof)) \times (K \times \Delta X) \times (V_{mol}) \tag{3.2}$$

On remarque que l'équation 3.2 est factorisée d'une manière spéciale. La factorisation impose au CPU de faire les opérations de calcul dans un ordre qui limitera au maximum la différence entres les nombres à chaque opération. Sans cette factorisation, la résolution du système pour le calcul statique des pressions dans les canaux peut devenir instable. Autre fait notable, la méthode de Gauss Jordan utilisée pour résoudre les systèmes n'est pas la méthode la plus simple, il s'agit plutôt de la méthode "à pivot partiel" sur laquelle nous reviendrons mais qui a la caractéristique de choisir de manière intelligente l'ordre dans lequel elle combine les équations. Sans un choix intelligent de cette ordre, la résolution du système devient aussi instable.

3.2 Le calcul parallèle

3.2.1 Le lien entre le programme cause/conséquence et le calcul parallèle

Il existe un lien étroit entre la vision d'un programme en cause/conséquence et le calcul parallèle. Quand on regarde à nouveau la figure 3.2, on comprend qu'avec plusieurs cuisiniers (ou agents), certaines taches pourraient être faites en même temps. En effet, une représentation du programme sous cette forme fait directement apparaître les taches qui peuvent être faites en parallèles.

On remarque aussi que certaines taches nécessitent que plusieurs taches parallèles aient été finies avant de commencer. Ainsi, il existe des problèmes de synchronisation. Il y a des cas où les différents agents doivent s'attendre les uns les autres pour que l'algorithme puisse continuer. En pratique, cela oblige à mettre en place tout un système de communication entre les agents qui font les calculs en parallèle.

Il existe un grand nombre de possibilités de communication entre agents, aussi bien en informatique qu'en électronique, etc. Ils ont tous quelque chose en commun, c'est un coût en temps. Cela limite l'intérêt de certaines parallélisations. Si en ajoutant un agent, on gagne moins de temps que coûte le système de communication qui permet de le synchroniser ou d'échanger avec les autres agents, alors il n'est pas intéressant de paralléliser l'algorithme avec cet agent.

Si on développe un algorithme en cause/conséquence pour notre modèle de pile à combustible, un très grand nombre de parallélisations possibles apparaissent. Tous les tester serait très fastidieux et les résultats obtenus seraient trop spécifiques pour être intéressants à plus grande échelle. Heureusement, il est possible de

les classer en groupe et d'estimer pour chaque groupes s'il est intéressant ou pas de faire une parallélisation pour gagner en vitesse de calcul.

3.2.2 Les différents types de parallélisation développés

Pour avoir un classement pertinent du point de vue du ratio gain en temps/coût en communication, on peut aller du plus général au plus spécifique. C'est à dire d'agents peu nombreux mais très complexes vers des agents très simples mais plus nombreux. C'est l'objet des trois sous parties suivantes. La quatrième partie est une possibilité que semble offrir les GPU et qui mérite d'être vérifiée.

3.2.2.1 La parallélisation par zone spatiale et modules

La parallélisation la plus générale consiste à faire calculer les zones de la pile par différents agents. On a testé la parallélisation des calculs fluidiques dans les canaux. On calcul le coté anode avec un agent et le coté cathode avec un autre agent. Les deux agents sont lancés en même temps au début de l'itération de calcul du programme principal qui va aussi attendre que les deux agents aient fini les calculs avant de les arrêter et de lancer l'itération suivante, etc. L'algorithme est présenté dans la figure 3.6.

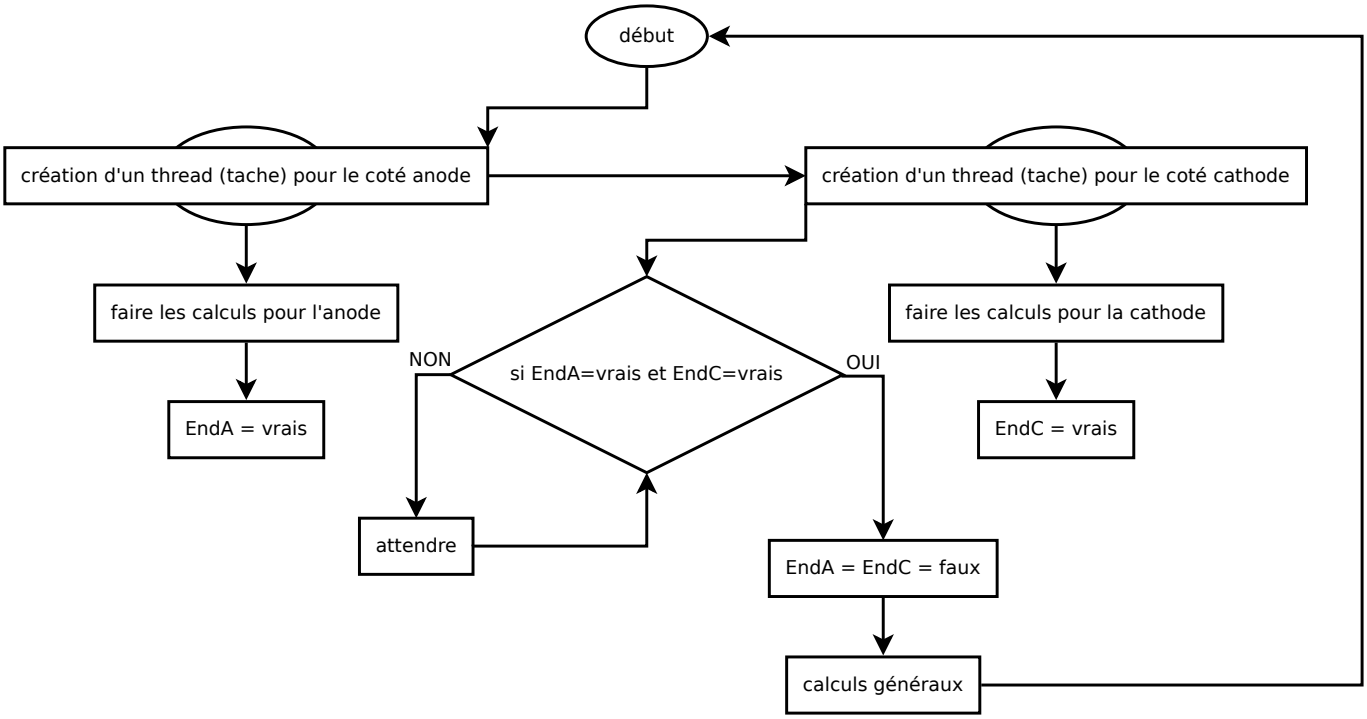


FIGURE 3.6 – Le fonctionnement en synchronisation du calcul statique fluidique

Dans le même ordre de généralité, les modules dynamiques de la membrane et de la thermique se sont vus alloués des agents indépendants du reste et tournent en continue.

3.2.2.2 La construction de matrice parallélisées

Dans les procédures de calcul statiques et dynamiques on retrouve souvent une opération élémentaire qui est le remplissage d'une matrice. Ça peut être la matrice du système à résoudre pour le calcul statique ou une simple matrice de paramètres intermédiaires pour les calculs dynamiques. L'idée ici, c'est d'utiliser plusieurs agents en même temps qui vont remplir chacun une zone de la matrice qui leur est attitrée. La figure 3.7 illustre le remplissage d'une matrice avec un système multi-taches en calcul parallèle.

Le nombre de taches utilisées pour remplir la matrice dépend directement du nombre de cœurs disponibles dans le processeur.

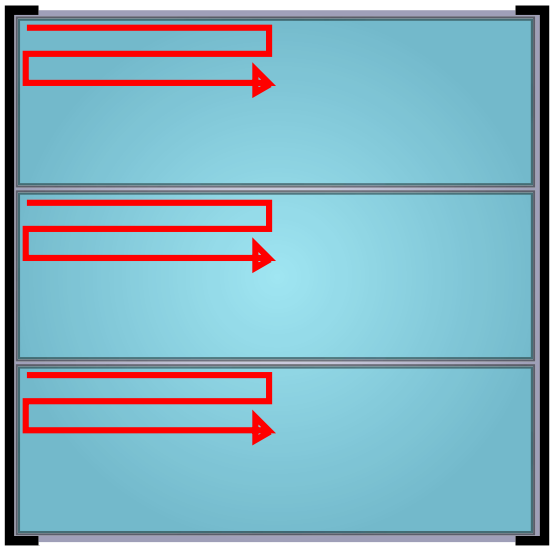


FIGURE 3.7 – Le remplissage d'une matrice par un système de calcul parallèle multi-taches

3.2.2.3 La parallélisation de l'algorithme de Gauss-Jordan

L'algorithme de Gauss-Jordan est l'algorithme le plus lourd du modèle, il est donc particulièrement intéressant de tenter de l'optimiser grâce au calcul parallèle. Il est difficile à paralléliser (la figure 3.8 montre l'algorithme de Gauss-Jordan en pivot partiel tel qu'il est utilisé dans le modèle).

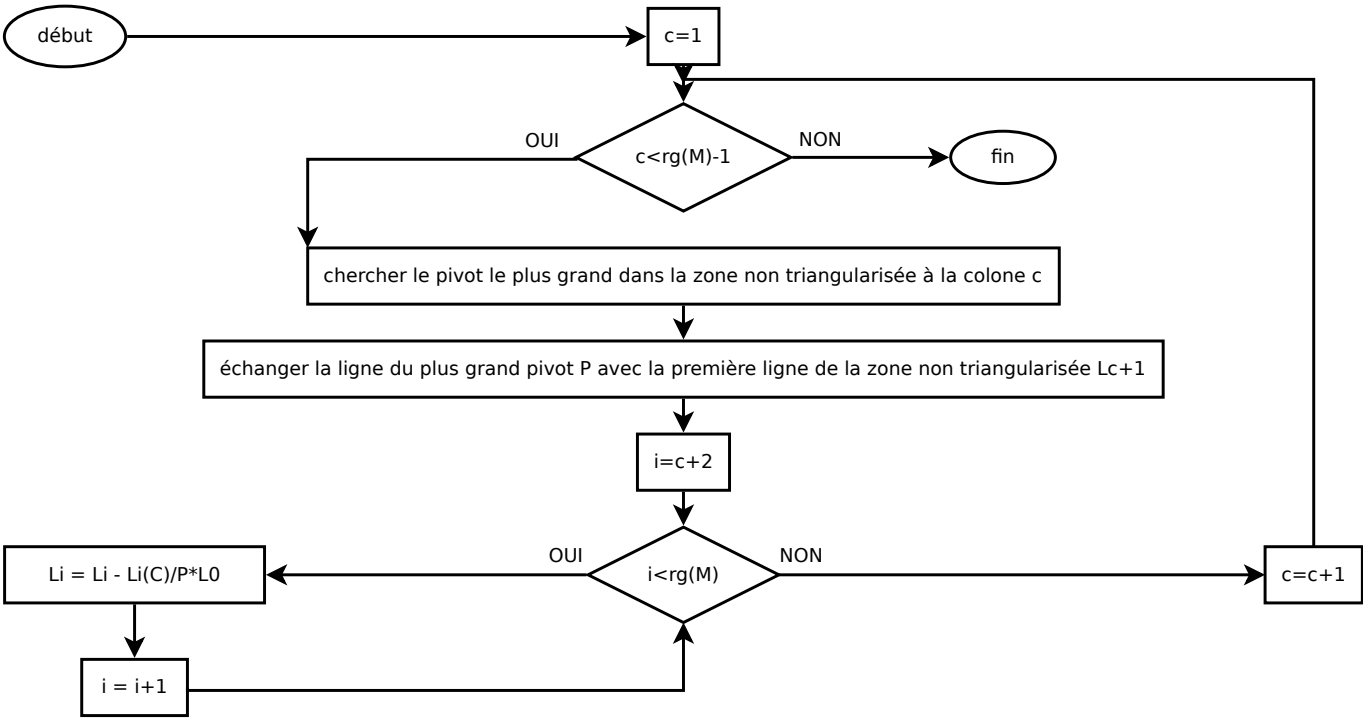


FIGURE 3.8 – L'algorithme de Gauss Jordan en pivot partiel

Seules certaines de ses taches les plus élémentaires peuvent être parallélisées, comme :

— La recherche du pivot le plus élevé peut être faite par plusieurs agents en même temps. Ils peuvent chacun prendre une partie de la zone de recherche, en extraire le maximum avant de comparer leurs résultats entre eux.

— L'échange de ligne peut être aussi réalisé par plusieurs taches qui prendront chacune une partie des lignes à échanger.

— Lorsque le pivot se propage en dessous, il peut aussi y avoir plusieurs taches qui prennent chacune une partie de la zone sous le pivot.

On retrouve ici le type d'optimisation faite dans la figure 3.7 à moindre échelle.

3.2.2.4 La parallélisation de l'application d'une formule avec le GPU

Il y a un temps de transfert et de chargement de programme dans le GPU. Par ailleurs, la programmation d'un GPU se fait sous la forme d'un mini programme qui s'appliquera en même temps sur toutes les cases d'une matrice. Ainsi, la manière la plus logique de l'utiliser pour faire du calcul parallèle c'est pour appliquer en même temps une formule sur toutes les cases d'une matrice. C'est un calcul massivement parallèle car il y aura autant d'agents que de cases dans la matrice.

3.2.3 La gestion de la communication optimisée pour la parallélisation par modules

Le modèle fluidique est statique, il n'est pas très rapide. Le modèle électrochimique qui calcule la répartition de courant est très rapide. La dynamique thermique et la dynamique fluidique de la membrane ont des constantes de temps différentes. Ainsi, une parallélisation dans les règles obligerait tous les modules agents à aller aussi lentement que le module de calcul le plus lent.

Ainsi, on décide de faire tourner les modules sans qu'ils s'attendent les uns les autres. Les grandeurs calculées sont échangées entre les modules à un intervalle régulier qui est indépendant de leurs fonctionnements itératifs. La figure 3.9 montre le déroulement des échanges d'informations entre les modules.

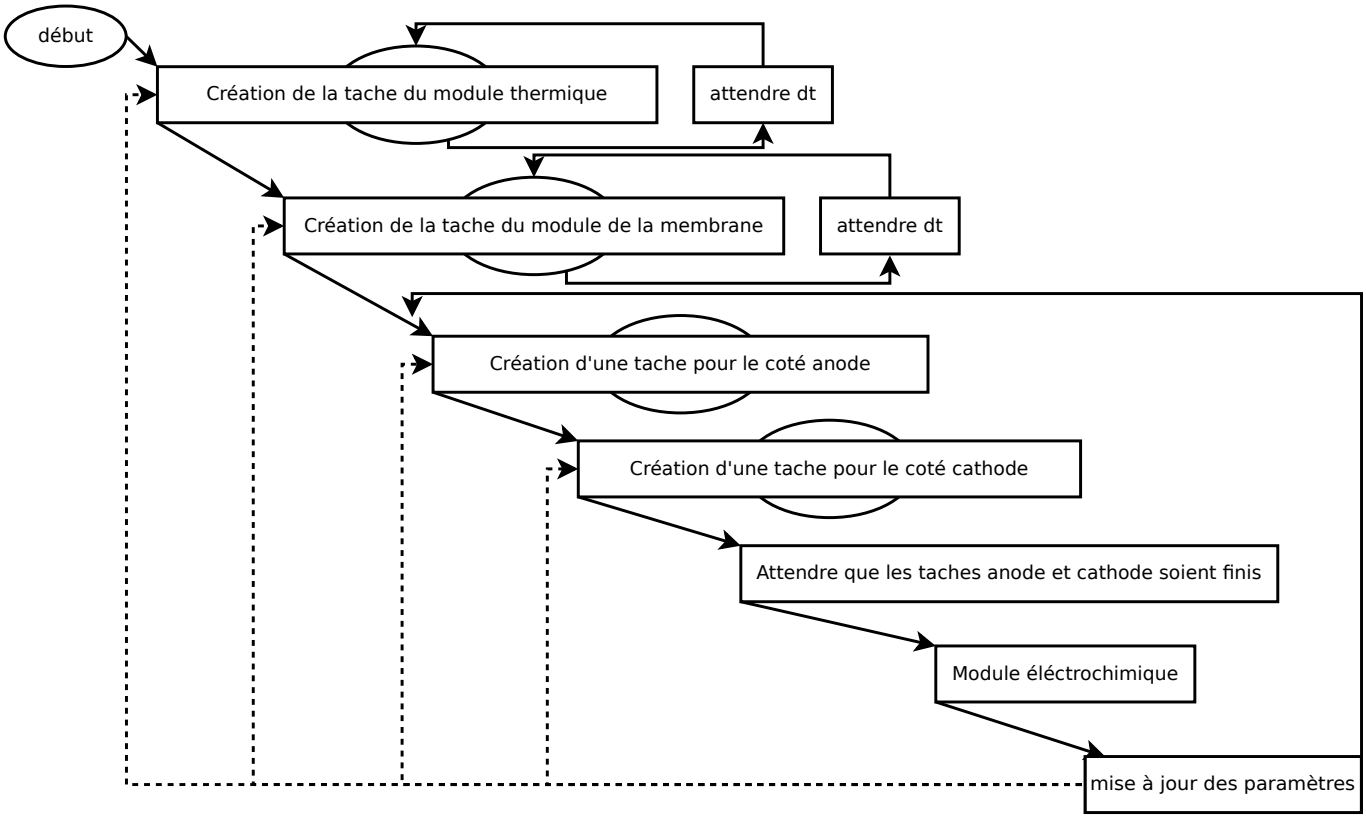


FIGURE 3.9 – Les échanges d'informations entre les modules agents

Ainsi, pour chaque modèle dynamique, les paramètres de calculs calculés par le reste du modèle sont remis à jour à intervalle régulier. Le problème, c'est que cet intervalle régulier n'est pas toujours plus court que le pas de temps du modèle dynamique. Ainsi, plusieurs itérations de calculs dynamiques explicites vont être faites avec des paramètres qui ne sont pas à jour. Il y a donc une erreur en contre partie du gain en temps.

La seule grandeur dynamique influente sur les autres modules dynamiques est la température T.

Or, T est exprimé en K et la température varie entre 20^oC et 60^oC, soit une variation de $\frac{60-20}{300} = 0.133$. Les constantes de temps thermiques sont de l'ordre de la minute et la mise à jour des paramètres est de l'ordre de la seconde, soit une variation relative de $0.133 \times \frac{1}{60} = 0.0022$. Ainsi, on peut considérer que :

$$T >> \Delta T^{rmj}$$

Avec ΔT^{rmj} la variation de la température entre deux mises à jour. Donc :

$$T \sim T + \Delta T^{rmj}$$

Ainsi, l'erreur provoquée par cette désynchronisation partielle est négligeable.

3.3 Le compilateur

Afin de répondre aux besoins stratégiques énoncés précédemment, un compilateur à été programmé.

3.3.1 Le programme et ses options

Le compilateur convertira un script en un programme en langage C. Le langage C peut à son tour être compilé en un programme qui peut être utilisé sur un grand nombre de matériels. En langage C, il n'y a que des fonctions. Une fonction sera définie comme ci-dessous :

```
void nom_de_la_fonction(STRUCT*glob)
{
        les instructions;
}
```

le terme **STRUCT*glob** est un paramètre d'entrée. Ici, on a choisi que toutes nos fonctions auront le même paramètre d'entrée qui est un pointeur vers toutes les variables du système. Si par exemple on veut exprimer dans **les instructions** la valeur de la température dans la membrane, on écrira :
glob->membrane.T[numero de maille].

Dans le chapitre expliquant la conception du modèle, on remarque dans la figure 2.1 qu'il y a plusieurs modules s'échangeant des valeurs entre eux. Ainsi, la base est le module. Un module est une fonction, il peut contenir d'autre modules. Les 4 modules de la figure 2.1 sont les sous modules d'un seul et unique module principal qui est le programme du modèle.

Voici un exemple de la déclaration d'un module dans le langage script utilisé par le compilateur pour créer la source en langage C :

```
$BLOCKE          = nom du module
#>fichier.conf = block
$FINBLOCKE       = nom du module
```

Tout ce qui se trouve entre **$BLOCKE** et **$FINBLOCKE** est le contenu du module. Le **>fichier.conf** donne le nom d'un fichier script qui contient le programme à l'intérieur du module. Ainsi, l'exemple ci-dessus est écrit dans le fichier script d'un module **main** par exemple, la compilation donnera en langage C :

```
void nom du module(STRUCT*glob)
{
        instrcutions dans fichier.conf;
}

void main(STRUCT*glob)
{
        nom du module(glob);
}
```

C'est comme cela que le programme est structuré en mettant les modules dans la fonction **main** les uns après les autres et en les déclarants au dessus. Nous allons maintenant nous intéresser à ce qui se trouve dans **fichier.conf**.

Comme pour les modules, d'autres fonctions peuvent être déclarées au dessus de la fonction **nom du module** puis être mises dedans les uns après les autres. Ainsi, le compilateur repère les déclarations qui s'enchaînent dans **fichier.conf** et crée pour chacune d'entre elles une fonction au dessus de la fonction **nom du module** puis l'insère dedans. Il existe différents types de fonctions préprogrammées dans le compilateur qui peuvent être paramétrées par les déclarations avant d'être utilisées. Ainsi, il est très simple d'ajouter des fonctionnalités au compilateur en fonction des investissements qui semblent intéressants.

3.3.2 Les calculs de base

3.3.2.1 Le module "FORMULE"

La première fonction préprogrammée présentée et la plus simple est celle qui fait faire un calcul. On a ici en exemple, un calcul fluidique :

```
$FORMULE  = nom de la nouvelle fonction
init
@formules = Vmolaire_{0,0}=R*T_{0,0}/P_{0,0}
```

Ici, **$FORMULE** renseigne le compilateur qu'il faut utiliser, la fonction préprogrammée *FORMULE*. L'option **init** veut dire que la formule ne sera appliquée qu'une seule fois au lancement du programme et après **@formules**, on a les formules que l'on veut appliquer. Dans ces formules, on met directement le nom des variables ce qui permet une écriture et une réécriture rapide pendant le déboguage. Par ailleurs, les $_\{0,0\}$ renseignent sur la position relative de la grandeur par rapport à la maille calculée. Si on avait eu $T_\{1,0\}$ la formule utiliserait la température sur la maille Est(à droite) de la maille où à lieu le calcul de **Vmolaire**. Cette fonction est très utile pour les calculs dynamiques.

3.3.2.2 Le module "TABLE INTERPOLE"

La table interpolée a été développée pour aider au calcul de la répartition de courant :

```
$TABLE_INTERPOLE      = nom de la nouvelle fonction
info
@parametres      = param1 ; param2
@limites         = min_param1=-5 ; min_param2=-30 ; max_param1=0 ; max_param2=0
@tailles         = t_param1=1001 ; t_param2=1000
$valeur          = PE
$fichier         = pE.mat
```

Elle prend comme paramètres :

@parametres et @limites les noms des paramètres d'entrée et les limites où ils sont connus ;

@tailles la taille du tableau de résultats en nombre de valeurs (ici c'est un tableau 2D) ;

$valeur et $fichier la variable où mettre le résultat et le nom du fichier ou est rangé la table.

Ici l'option **info** servirait à faire que la fonction ne soit pas incluse dans le module, mais juste déclarée. Son algorithme associé est présenté dans la figure 3.10.

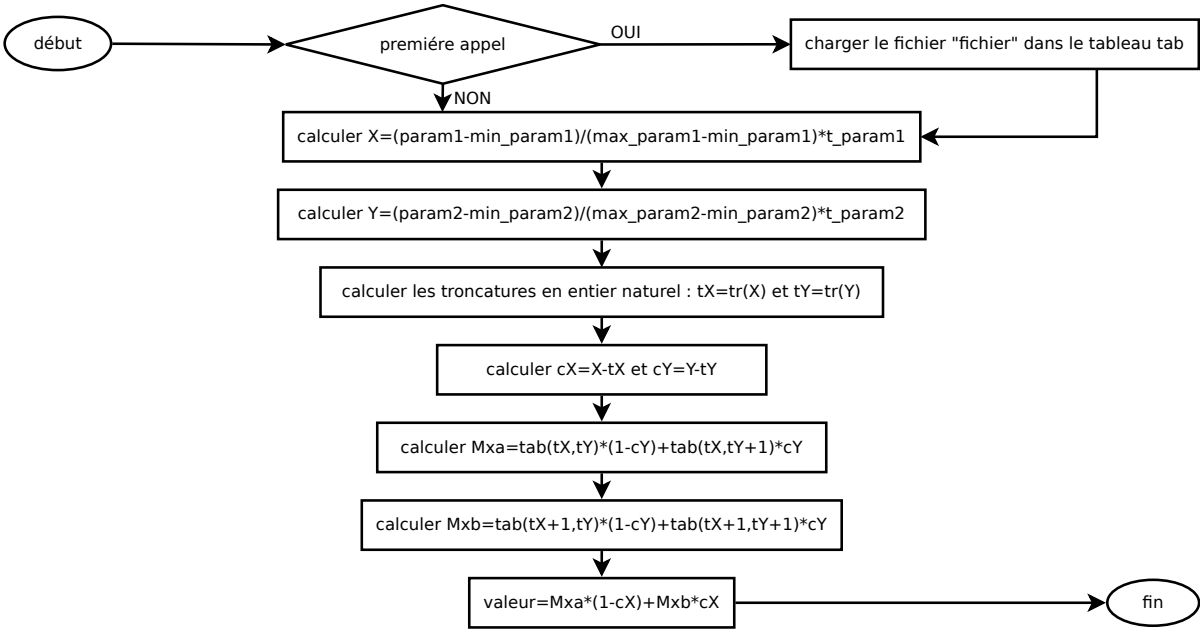


FIGURE 3.10 – Algorithme de la fonction préprogrammée TABLE_ INTERPOLE

3.3.3 Les assemblages

Ce sont des fonctions qui ne servent qu'à structurer le programme.

3.3.3.1 Le module "APP CHAMPS"

Cette fonction est utilisée dans le calcul de la répartition de courant pour faire faire une estimation locale du courant sur chaque maille du système. Son formalisme est :

```
$APP_CHAMPS      = nom de la nouvelle fonction
$L               = nom variable longueur
$l               = nom variable largeur
$h               = nom variable profondeur
$config          = nom variable de configuration de zone
$valconfig       = nom du numero de zone ou passer present dans le config
                   pour chaque maille
$algo            = nom de la fonction a utiliser
@ajustement      = param entr 1=param1_{} ;
                         param entr 2=param2_{}
@postajustement = param sortie1_{}=buffer1 ;
                         param sortie2_{}=buffer2
```

L'algorithme de cette fonction préprogrammée est présenté dans la figure 3.11.

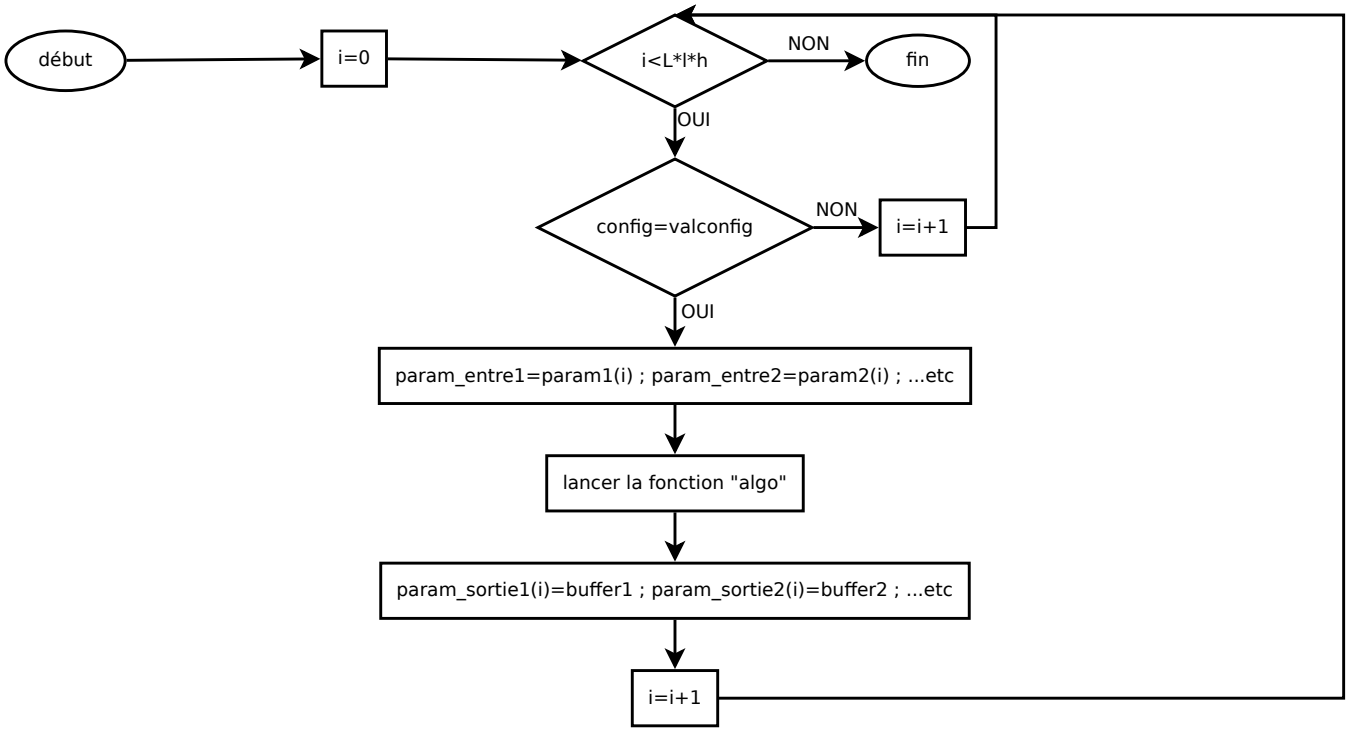


FIGURE 3.11 – Algorithme de la fonction préprogrammée APP_ CHAMPS

3.3.3.2 Le module "COMPOSITION"

Cette fonction est également utilisée pour le calcul de la répartition de courant, elle est nécessaire pour assembler une séquence de fonctions préprogrammées en une seule fonction. Son formalisme est simple :

```
$COMPOSITION          = nom de la nouvelle fonction
info
@fonctions            = fonction1 ; fonction2 ; fonction3 ; fonction4
```

3.3.4 Les résolutions

Ce sont les fonctions préprogrammées clés.

3.3.4.1 Le module "DICHOTOMIQUE"

Cette fonction préprogrammée reprend exactement l'algorithme de la recherche dichotomique en y ajoutant quelques sécurités pour signaler les erreurs. Son formalisme est :

```
$DICOTOMIQUE      = nom de la nouvelle fonction
$min              = valeur min de l espace de recherche
$max              = valeur max de l espace de recherche
$fonction         = formule avec laquel on cherche une racine
$recherche        = le nom de la variable a faire varier
$resultat         = le nom du r\'{e}sultat que l on veut egale a 0
$objectif         = une autre valeur que zero si on ne cherche pas zero
$precision        = la precision de la recherche
```

3.3.4.2 Le module "SYSTEM UNIQUE"

Cette fonction préprogrammée prend simplement un système linéaire fourni avec des variables et le résout avec la méthode de Gauss Jordan au pivot partiel. Son formalisme est le suivant :

```
$SYSTEM_UNIQUE    = nom de la nouvelle fonction
@var              = variable1 ; variable2 ; variable3
@formules         = equation1 ;
                    equation2 ;
                    equation3
```

3.3.4.3 Le module "SYSTEM INDEPENDANT"

Cette fonction préprogrammée reprend la fonction **SYSTEM UNIQUE**, mais en l'appliquant sur toutes les mailles du système dont le numéro de zone est zéro. Son formalisme est le suivant :

```
$SYSTEM_INDEPENDANT = nom de la nouvelle fonction
@var                = variable1 ; variable2 ; variable3
@formules           = equation1 ;
                      equation2 ;
                      equation3 (ex : Ue*Ue*Ue*Ue*pA_{0,0}+Ue*Ue*Ue*pB_{0,0})
$conf               = nom de la variable contenant les numeros de zones
```

On voit dans l'exemple de l'équation **equation3** que certaines variables ont le $_\{0,0\}$ à la fin. On peut en effet construire le système sur chaque maille en s'appuyant sur les valeurs des mailles voisines en utilisant ce formalisme. C'est cette fonction qui permet le calcul statique fluidique dans la couche de diffusion, ainsi que quelques calculs clés dans le modules de répartition de courant.

3.3.4.4 Le module "SYSTEM NEWTON"

Cette fonction préprogrammée reprend tout ce qui avait été développé dans le module fluidique pour le calcul des pressions. Son formalisme est le suivant :

```
$SYSTEM_NEWTON = nom de la nouvelle fonction
@var           = variable1 ; variable2 ; variable3
@formules      = equation1 ;
                 equation2 ;
                 equation3
@CCL2          = condition au limite numero2
@CCL1          = condition au limite numero1
@ccl           = condition au limite de base autour des 0
$conf          = nom de la variable de num ro de zone
```

Comment faire cela rapidement ? Pour que notre algorithme de calcul soit rapide, on va exécuter le plus possible de taches au démarrage. On va simplement considérer qu'en fonction des conditions aux limites de chaque maille, un morceau de système différent doit lui être appliqué. Pour ce faire, on va faire subir à notre grille de conditions aux limites (figure 2.7) un prétraitement qui consistera à générer deux autres grilles (figures 3.13 et 3.12). La grille de la figure 3.13 contiendra des numéros auxquels seront associés des systèmes bien précis et adaptés à chaque cas possibles de conditions aux limites et la grille de la figure 3.12 contiendra simplement les adresses des variables dans le système construit. Ainsi, le système pourra être construit et reconstruit très rapidement à partir de ces deux grilles pendant le fonctionnement.

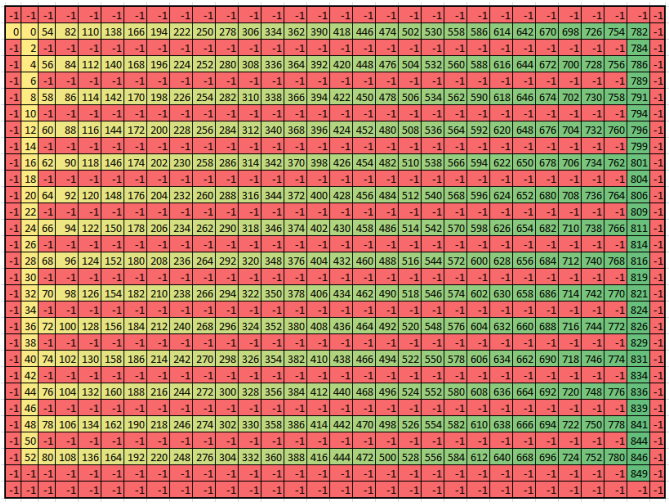


FIGURE 3.12 – Grille de référencement des positions des variables du système

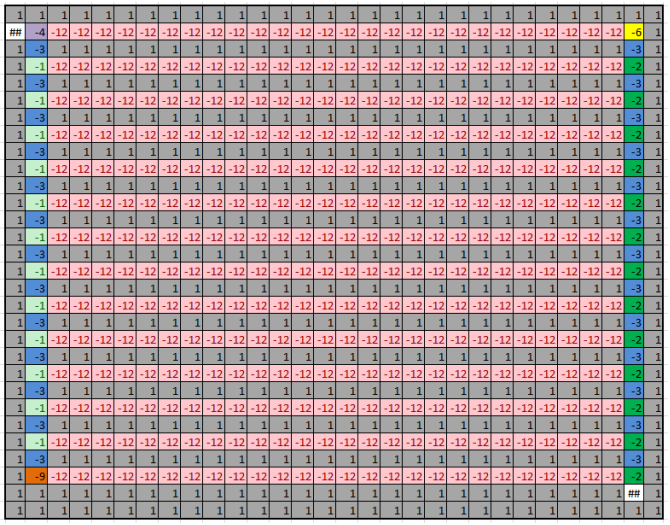


FIGURE 3.13 – Grille de référencement des types de systèmes à appliquer

Comment générer la liste de ces systèmes numérotés ? Pour générer la liste de ces systèmes, on va d'abord choisir une convention. Sachant que chaque bord peut être soit fermé soit ouvert et que pour chaque maille on a 4 bords, on peut stoker toutes les possibilités de conditions aux limites sur un nombre en hexadécimal (soit 4 bits). Ainsi, en codant un a un tous les nombres de 0 à 15 en hexadécimal on a toutes les configurations possibles de conditions aux limites (voir figure 3.14).

Pour chaque configuration, on va construire un système contenant les équations de chaque mailles plus les conditions aux limites associées à la configuration. Sur ce système sont ensuite faites deux opérations :

- On cherche les variables imposées par les conditions aux limites et on les retire pour les remplacer par leurs valeurs.
- On cherche les éventuelles colinéarités induites entre les équations du système et lorsqu'on en trouve une, on surprime l'une des équations colinéaires.

Exemple avec la configuration "C" : on part du système 3.3 et on arrive à la configuration 3.4.

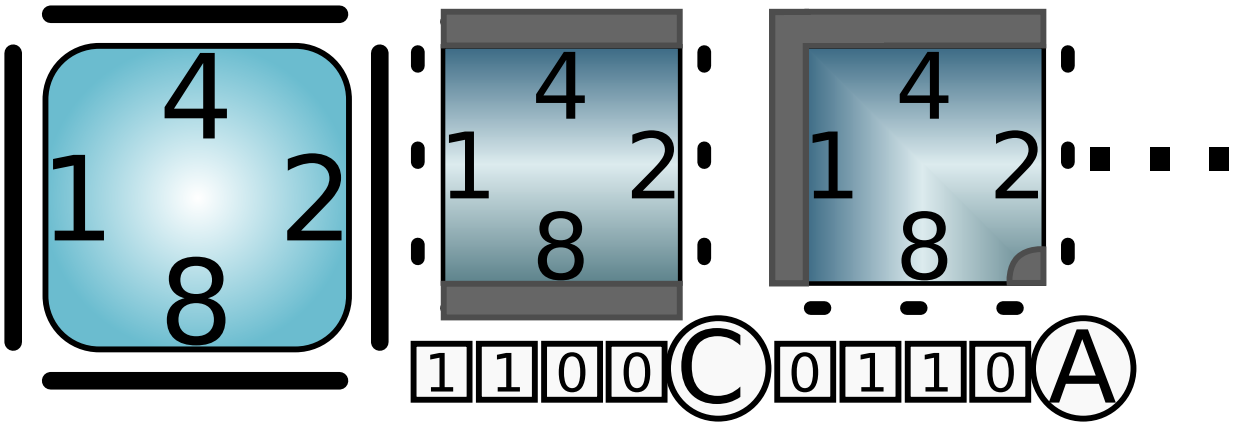


FIGURE 3.14 – Codage en hexadécimal des configurations possibles pour une maille

$$\begin{cases} P(i+1,j) - P(i,j) = \left(\frac{K\mu\Delta XV_{mol}}{\Delta Yh}\right) \times Nx \\ P(i,j+1) - P(i,j) = \left(\frac{K\mu\Delta YV_{mol}}{\Delta Xh}\right) \times Ny \\ \Delta X \times h \times Nx_W - \Delta X \times h \times Nx_E + \Delta Y \times h \times Ny_S - \Delta Y \times h \times Ny_N + \Delta X\Delta Y \times N_{gdl} = 0 \\ Ny_N = 0 \\ Ny_S = 0 \\ P(i,j+1) = P(i,j) \end{cases} \tag{3.3}$$

$$\begin{cases} P(i+1,j) - P(i,j) = \left(\frac{K\mu\Delta XV_{mol}}{\Delta Yh}\right) \times Nx \\ \Delta X \times h \times Nx_W - \Delta X \times h \times Nx_E + \Delta X\Delta Y \times N_{gdl} = 0 \end{cases} \tag{3.4}$$

Ensuite, il ne reste plus qu'a définir le système restant comme système à appliquer sur la configuration allant avec son numéro et mémoriser son nombre de variables restantes pour la construction de la grille des adresses.

La figure 3.15 fait le point sur le fonctionnement de cette fonction.

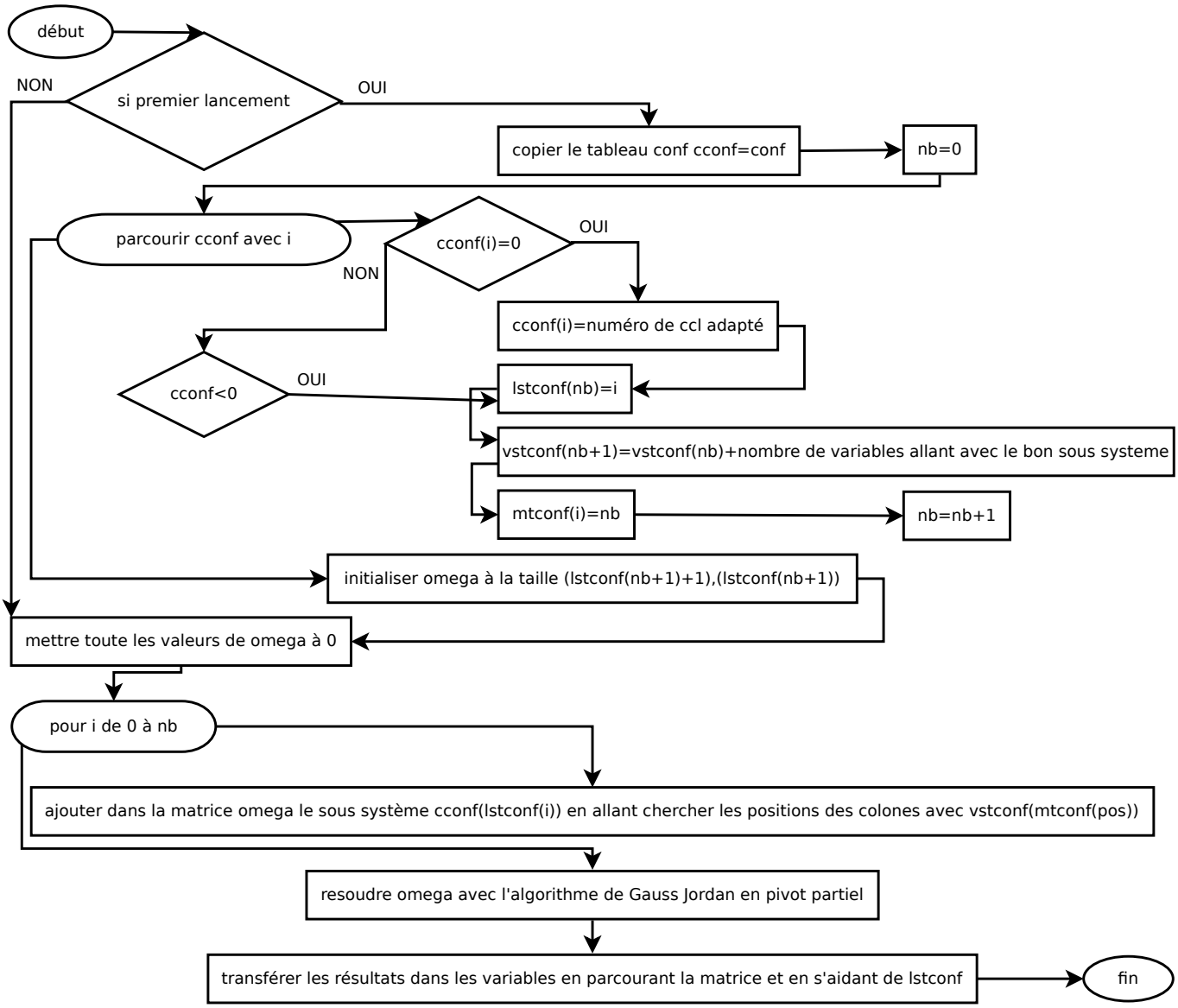


FIGURE 3.15 – Algorithme de la fonction préprogrammé SYSTEM_ NEWTONE

3.3.5 Les systèmes multi-agents

3.3.5.1 Le module "EXPLICITE"

C'est l'algorithme multi-agents qui permet les calculs explicites des concentrations dans les canaux où du refroidissement des gaz dans le circuit de refroidissement. Voici le formalisme de cette fonction :

```
$EXPLICITE  = nom de la nouvelle fonction
$dim        = dimension (1D? 2D? 3D?)
$flux       = nom de la variable de flux a suivre
$conf       = nom de la variable contenant les num ro de zones
$ccl        = num ro de zone initial ou demarer les agents
@formules   = formule    appliquer1 ;
              formule    appliquer2(ex : CE_{0,0}=((Sin<CE_{in}*N._{}>) )
```

Dans les formules à appliquer, il y a quelques nouveaux termes non expliqués :

Sin< > veut dire somme pour toutes les entrées de la maille ;

${in}$ va avec "Sin< >", c'est l'indice qui va avec la somme ;

N. ici, Nx et Ny sont les variables de flux suivi, on met N. pour nommer le flux d'entrée quelque soit sa direction.

L'algorithme de cette fonction est présenté dans la figure 3.16.

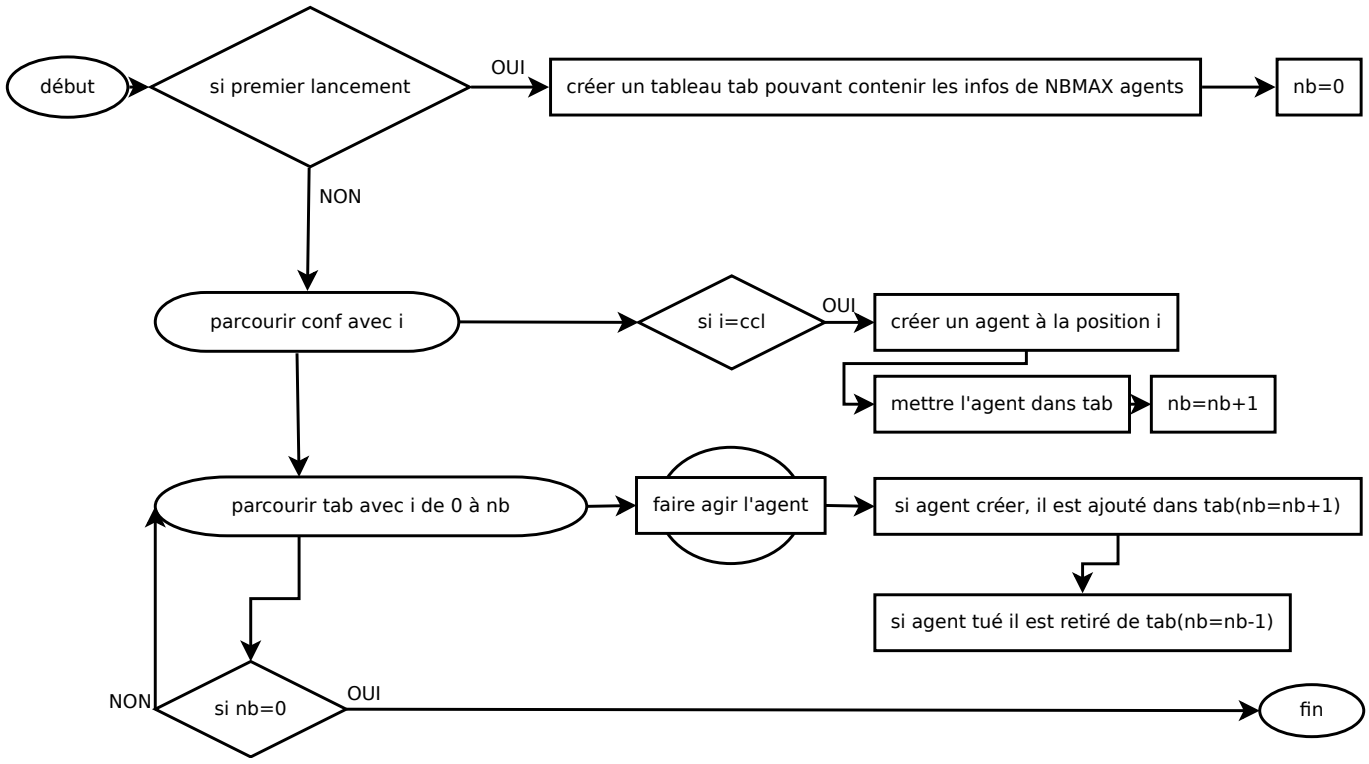


FIGURE 3.16 – Algorithme de la fonction préprogrammé EXPLICITE

3.3.6 Le calcul parallèle

3.3.6.1 Le module "TACHE CADENCE"

Il s'agit des modules qui sont cadencés pour le calcul parallèle. Voici un exemple de déclaration de module cadencé :

```
$BLOCKE              = Temperature
#>thermique.conf= block
$cadence             = DTtherm
$quiter              = quite
tache
$FINBLOCKE           = Temperature
```

On a ajouté l'option **tache** qui dit au compilateur que ce module est cadencé en parallèle. On a aussi les deux paramètres supplémentaires :

- **cadence** : qui donne le nom de la variable qui contient le pas de temps ;
- **quiter** : qui donne le nom de la variable qui préviendra la tache quand le programme principal sera quitté.

La figure 3.17 montre comment fonctionne un module déclaré en tache cadencée. Si le programme prend du retard, il le rattrape sur l'itération suivante.

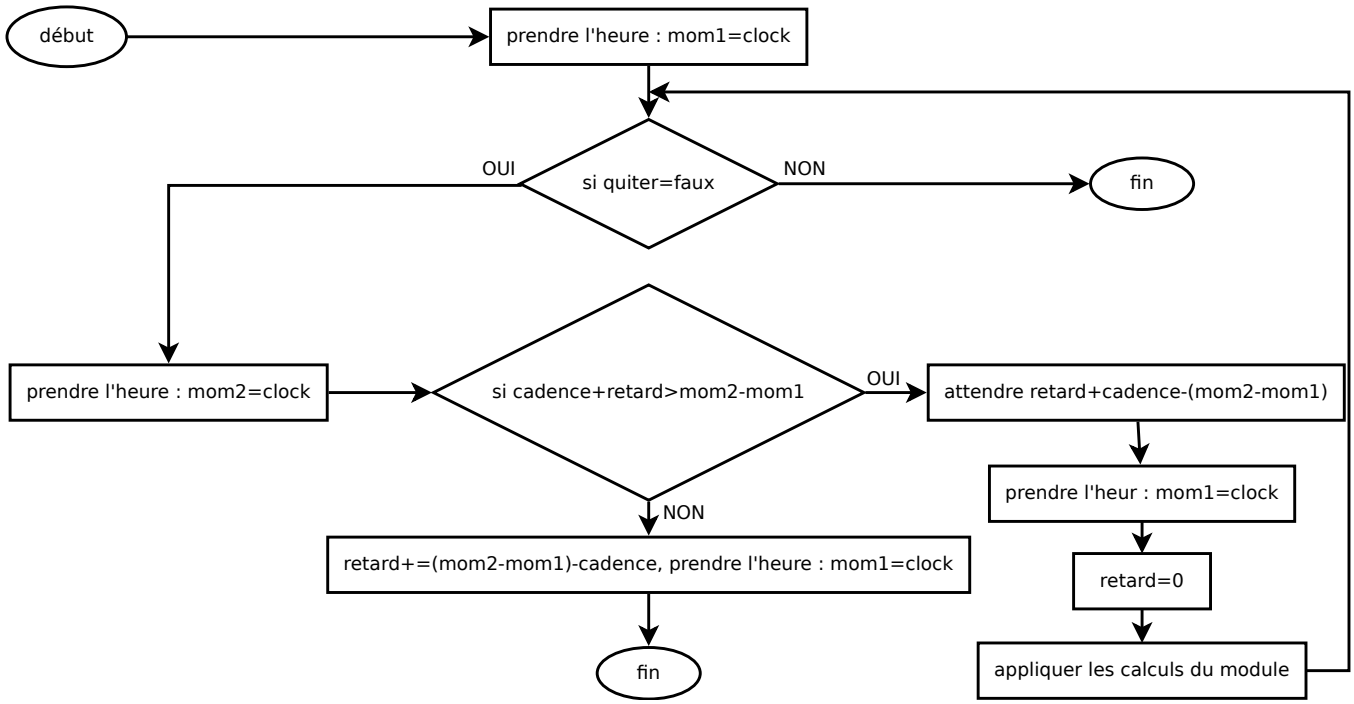


FIGURE 3.17 – Algorithme de la fonction préprogrammée TACHE_ CADENCE pour les modules déclarés en tache cadencée

3.3.6.2 Les modules "SYNCHRO" et "SYNCHRO FIN"

Les modules SYNCHRO et SYNCHRO FIN servent à éviter qu'une variable soit accédée ou modifiée par deux taches en même temps. Ils sont placés avant et après chaque remise à jour des paramètres des taches (voir figure 3.9).

Leur formalisme est le suivant :

```
$SYNCHRO             = nom_fonction
$module              = nom du module a mettre en pause
```

et

```
$SYNCHRO_FIN        = nom_fonction
$module             = nom du module mis en pause
```

Afin de perdre le moins de temps possible sur les taches des modèles dynamiques, le système de "pause and play" de ces taches est optimisé pour ne pas les perturber. La figure 3.18 montre les étapes qui mènent à une remise à jour des paramètres d'un module dynamique.

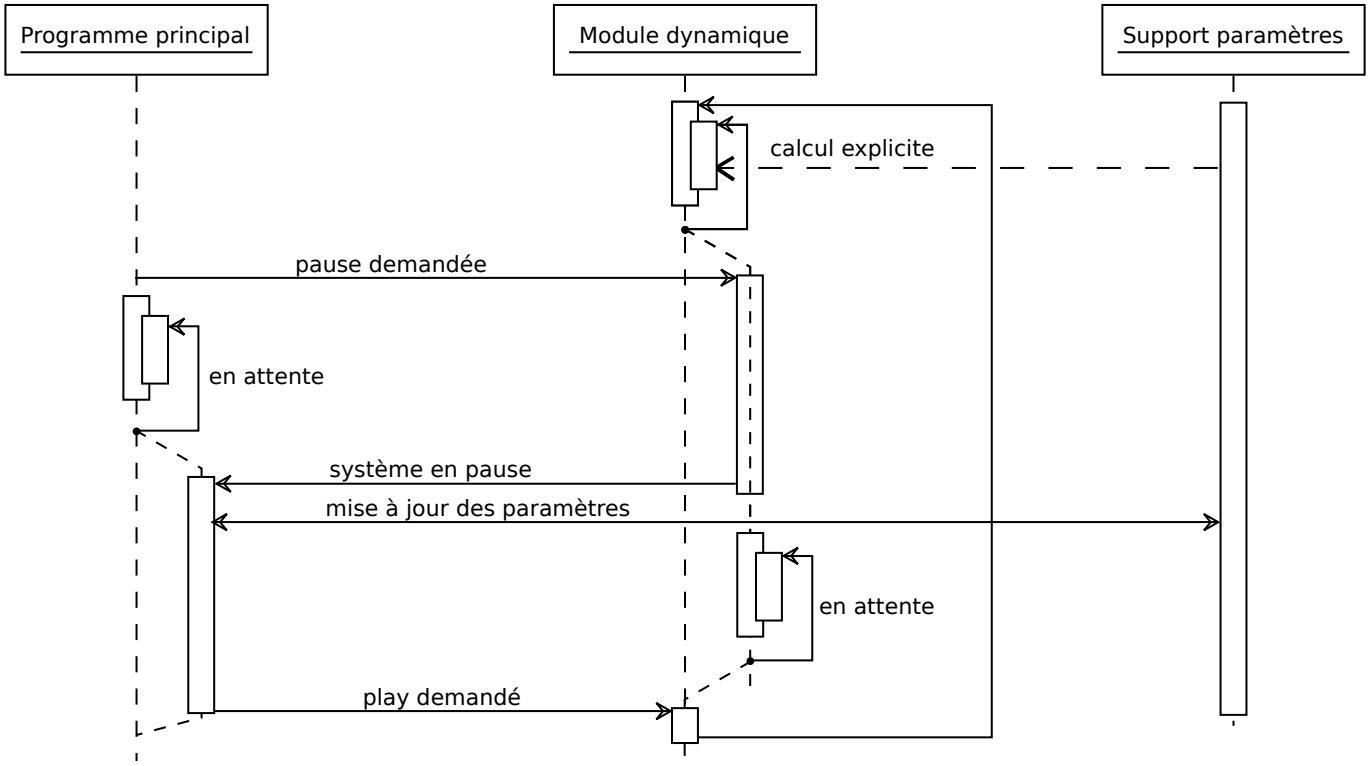


FIGURE 3.18 – Procédure de mise à jour des paramètres d'un modèle dynamique en parallèle (UML diagramme de séquence)

3.3.6.3 Le module "ANTI INSTABLE"

Bien que toutes les précautions aient été prises, la méthode explicite pour les modèles dynamiques est sensible aux instabilités. L'existence du calcul parallèle combiné à cette sensibilité rend le modèle chaotique. En effet, on peut lancer le modèle plusieurs fois et avoir des instabilités à certains moments et non à d'autres moments. Pour rendre le modèle plus fiable et contenir au mieux ces instabilités. Un module spécial a été développé pour les traquer et les résoudre le plus tôt possible.

Le formalisme de ce module est le suivant :

```
$ANTI_INSTABLE = nom de la fonction
$variable      = Tla
@troncature    = $min = 272.0 ;
                 $max = 400.0
$pic_ecart     = 1.5
$occilation    = 4
$exponentiel   = 2.0
```

On a les paramètres suivants :

- **variable** est la variable champs à observer ;
- **troncature** min et max sont les valeurs bornes tolérées pour cette variable ;
- **pic ecart** c'est l'écart maximum entre deux mailles toléré en nombre de fois l'écart type ;
- **occilation** c'est la durée maximum tolérée d'une oscillation en nombre d'itérations ;
- **exponentiel** c'est le rapport maximum toléré entre une dérivée temporelle et celle de l'instant d'après.

Ce module cache en réalité 4 algorithmes de reconnaissance d'erreur ou d'instabilité. Ces algorithmes sont expliqués dans les figures 3.19, 3.20, 3.21 et 3.22.

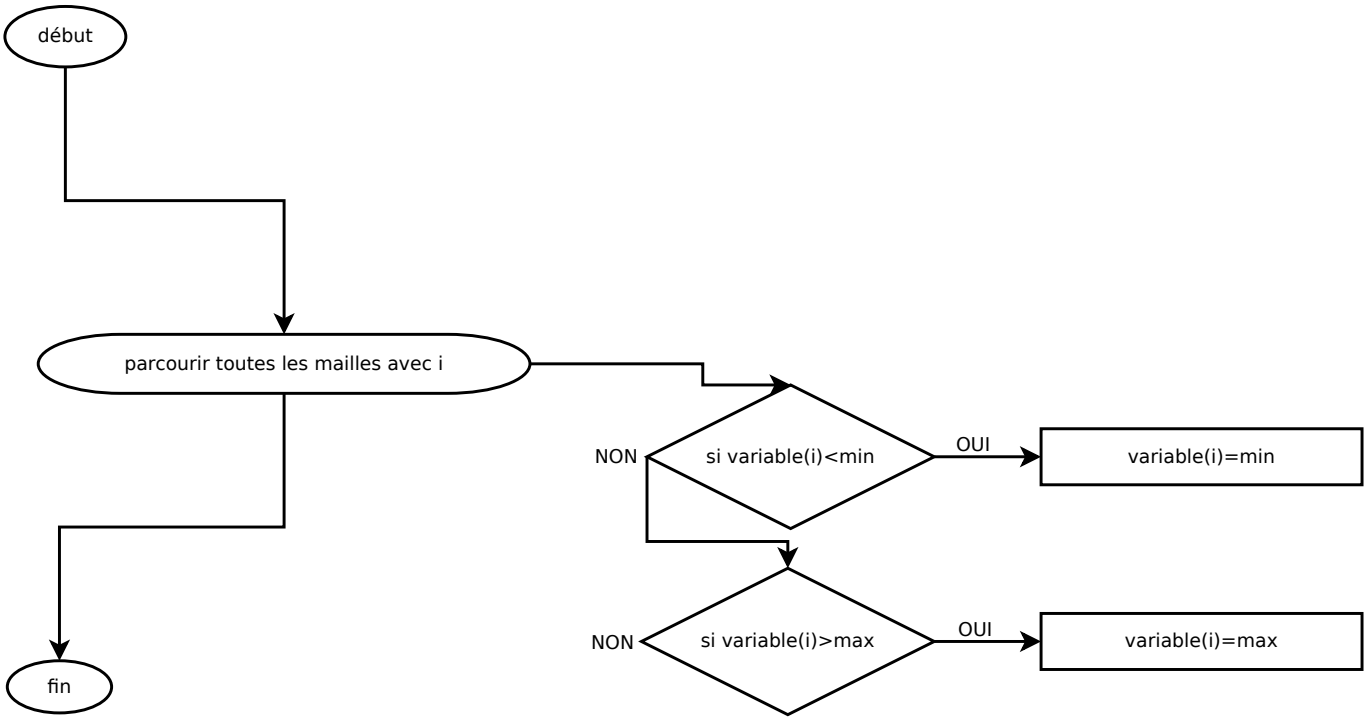


FIGURE 3.19 – Algorithme de correction d'instabilités par troncature

3.3.7 La gestion du maillage

Comme on l'a vu dans le chapitre sur la conception du modèle, tous les maillages ne se correspondent pas exactement, il a donc fallu développer des algorithmes pour faire la conversion d'un maillage à un autre. Il y a deux types de valeurs dans les mailles :

— les potentiels ;
— les flux.

Pour calculer une équivalence d'une maille à une autre, il faut s'y prendre différemment en fonction de ce type de valeur :

— pour un potentiel : il faut la moyenne des projections d'un maillage sur l'autre ;
— pour un flux : il faut l'intégrale d'un maillage sur l'autre.

C'est pourquoi une fonction spéciale a du être développée pour intégrer les valeurs d'un maillage sur un autre maillage.

3.3.7.1 Le module "INTEGRALE INTERMAIL"

C'est cette fonction préprogrammée qui fait toutes les conversions pour passer d'un maillage à un autre. Son formalisme est le suivant :

```
$INTEGRALE_INTERMAIL = nom de la nouvelle fonction
$tailles             = variable contenant les dx,les dy(cote source)
                       ->variable contenant les dx,les dy(cote destination)
$maillage            = nb maille sur x,sur y->nb maille sur x,sur y
@integrations        = destination_{}=Int(source_{})
```

Ici, la variable **destination** du maillage du coté destination recevra l'intégrale de la variable **source** venant de l'autre coté, d'un autre maillage. Ainsi, les flux sont directement calculés. Pour les potentiels, il suffit de diviser le résultat par la surface de la maille de destination pour avoir la valeur moyenne. La figure 3.23 présente l'algorithme de cette fonction.

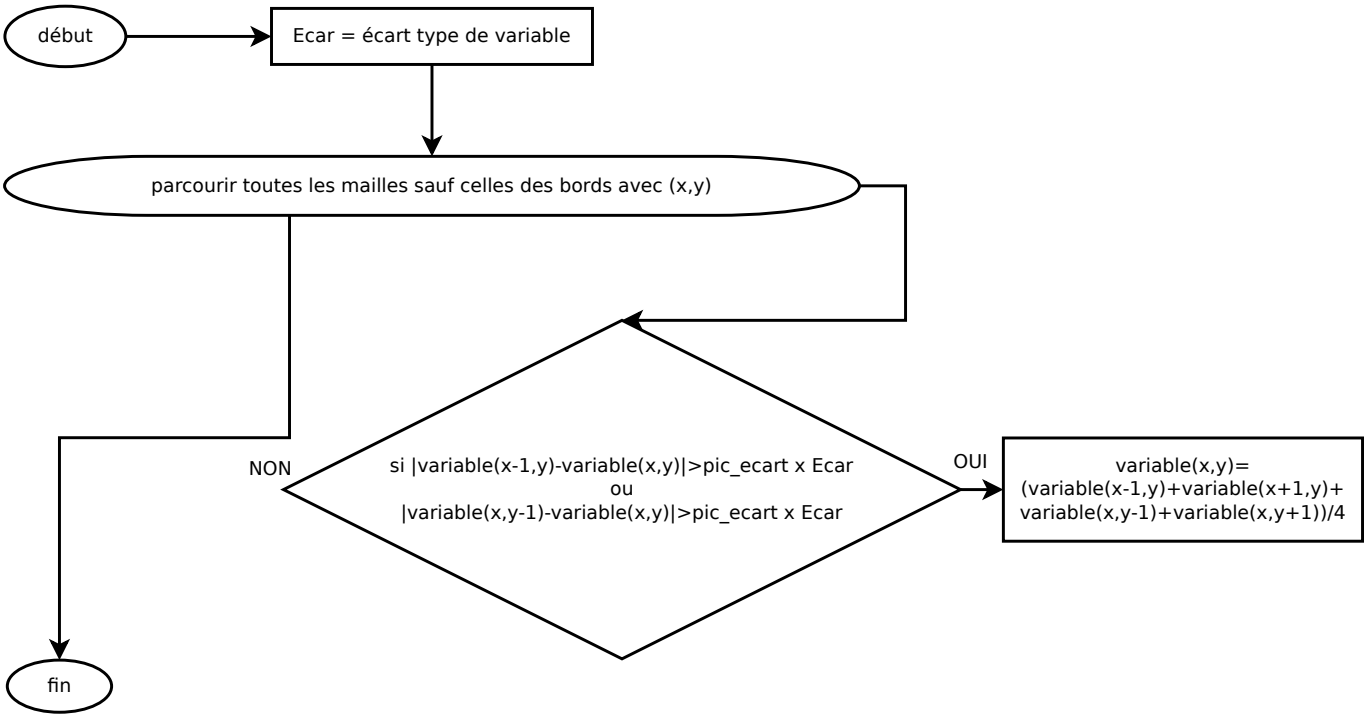


FIGURE 3.20 – Algorithme de correction d'instabilités par recherche de pic

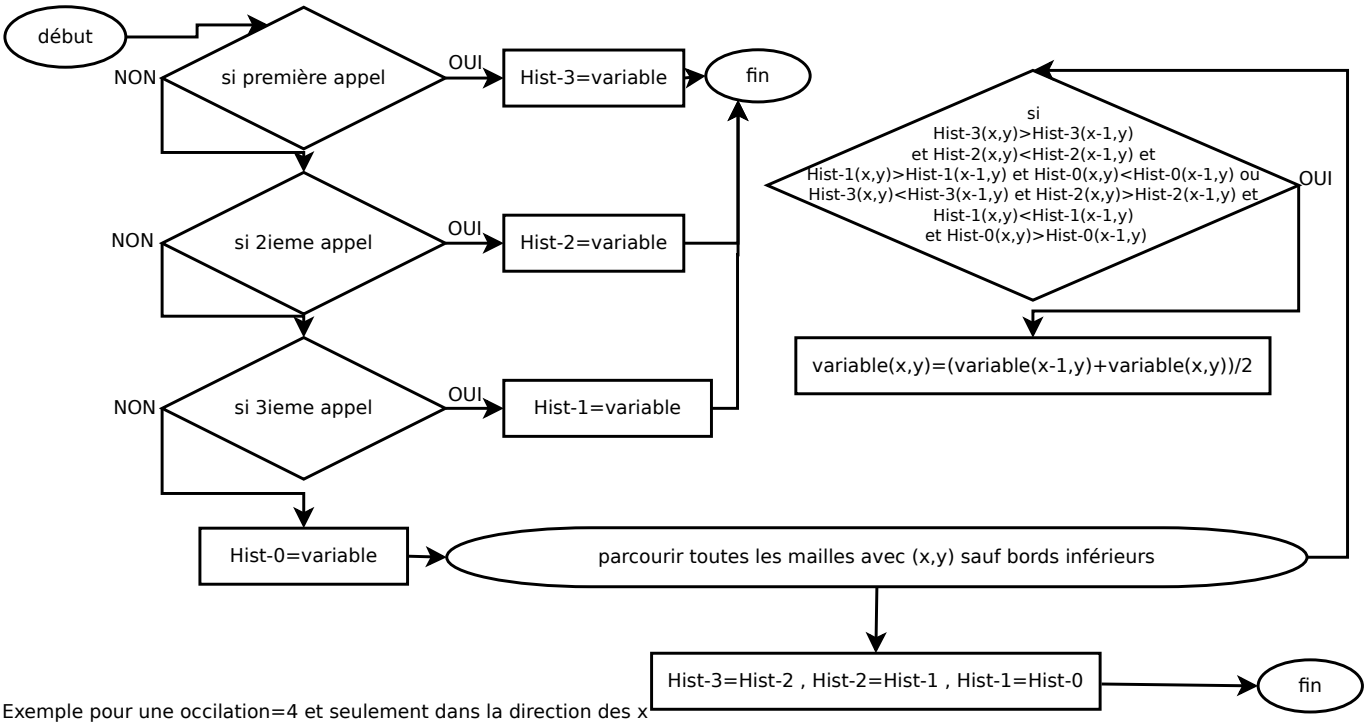


FIGURE 3.21 – Algorithme de correction d'instabilités par recherche d'occilation

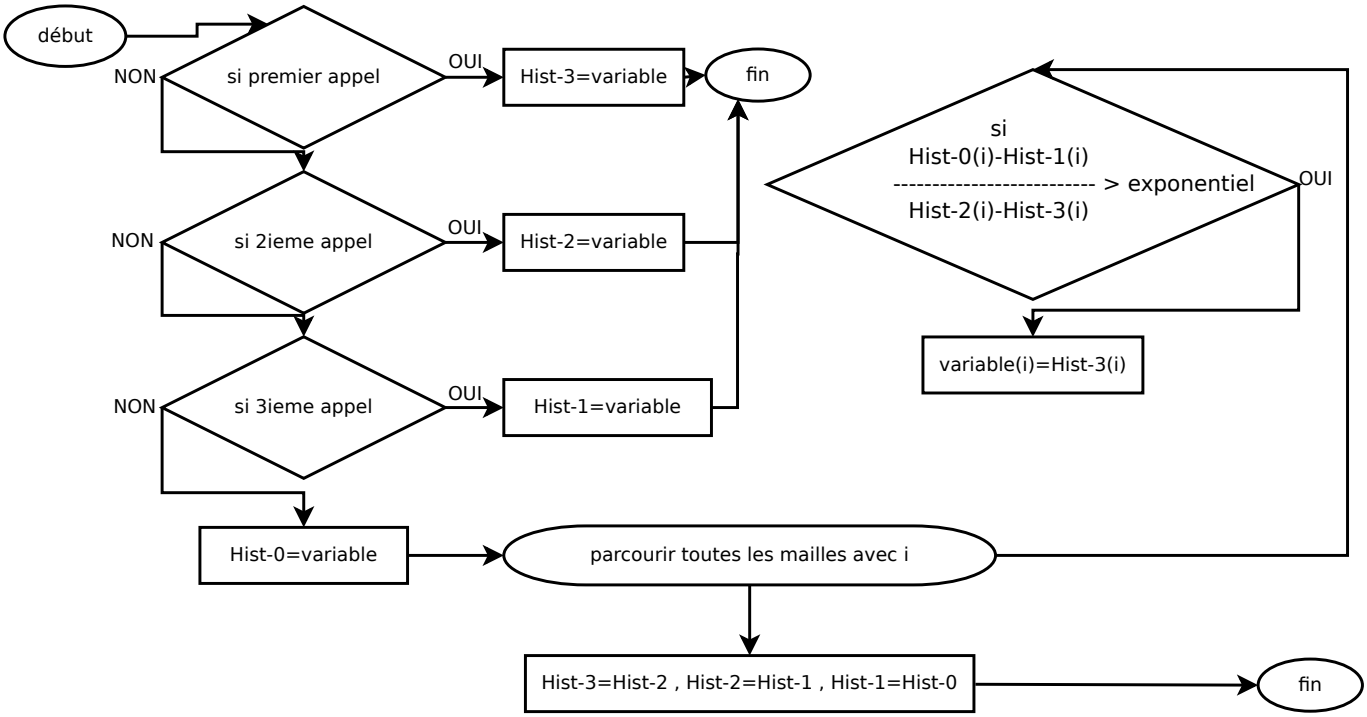


FIGURE 3.22 – Algorithme de correction d'instabilités par recherche d'évolution exponentiel

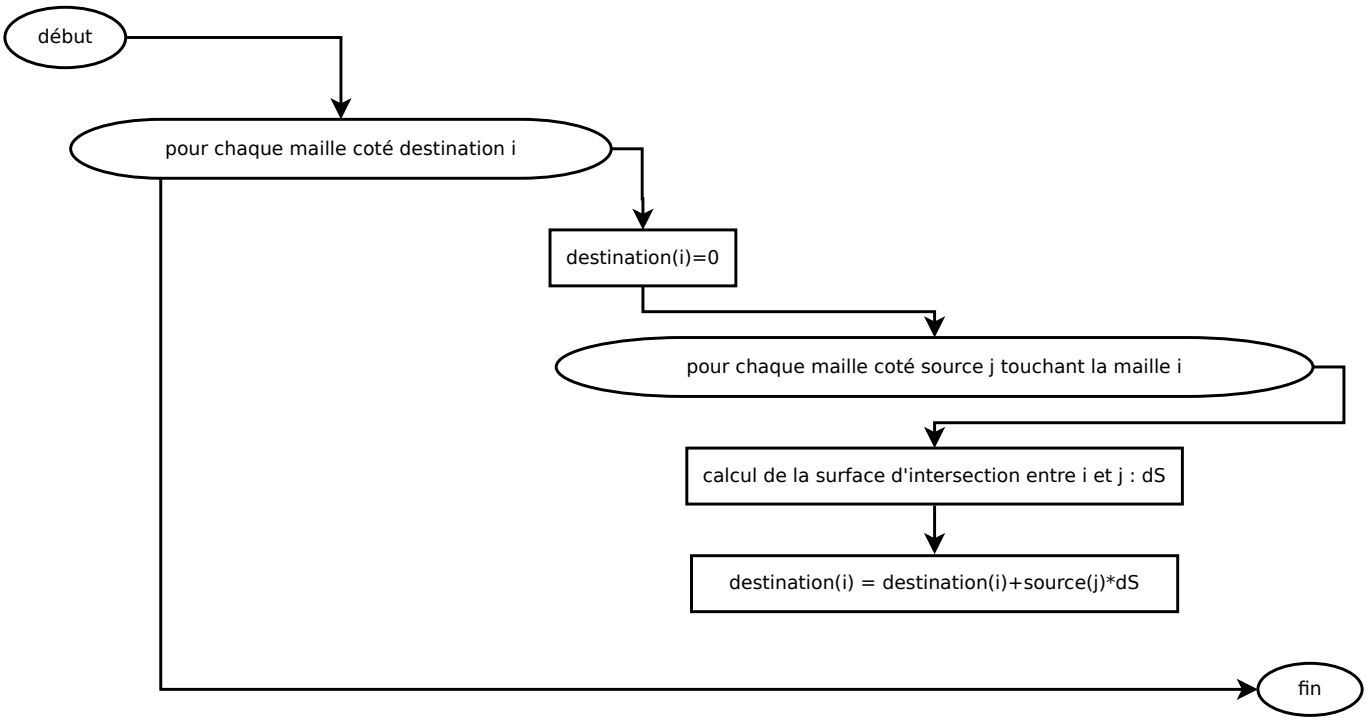


FIGURE 3.23 – Algorithme de la fonction préprogrammée INTEGRALE_ INTERMAIL

3.3.8 La perspective d'un compilateur vers du FPGA en deux étapes

Le fait de passer par le développement d'un compilateur pour développer un modèle offre des possibilités intéressantes de transpositions de la programmation de ce même modèle. En effet, il est possible de garder la source script du programme sans modification et de faire à partir de cette même source un programme qui tournerait sur un FPGA. Pour ce faire, il suffirait de développer un compilateur reprenant tous les modules pré-cités mais générant le programme en VHDL plutôt qu'en langage C.

Mais comme nous l'avons expliqué dans le chapitre 1, la programmation d'un FPGA est différente de la programmation d'un CPU car le VHDL (langage de programmation du FPGA) est un langage de description. Ainsi, on peut revenir à notre conception d'algorithme avec des axes de causes/conséquences qui correspondent mieux au fonctionnement du FPGA.

L'idée serait de faire cette compilation en plusieurs temps :

1. D'abord compiler le programme en langage C mais en remplaçant les équations par des fonctions qui écriraient les équations et de même pour les conditions. Ainsi, il serait facile de prendre notre modèle en langage C et de lui appliquer un script de conversion pour obtenir un tel programme.
2. Lancer le programme juste créé et le faire écrire dans un fichier à part. On aurait alors un programme équivalent au programme de base, mais de plus bas nivaux puisqu'il n'y aurait plus que des conditions et des équations.
3. On utilise un programme qui va parcourir ce programme de bas nivaux et établir toutes les dépendances entre les équations et les conditions.
4. Une fois les dépendances établies, il est possible de générer directement le code en VHDL.

Cette approche permettrait d'éviter une part importante du débogage en s'appuyant sur des parties de code déjà déboguées et en utilisant des systèmes automatisés qui ne se trompent pas.

3.4 Conclusion partielle

Afin de développer un programme rapide, il est possible d'utiliser différentes tactiques s'appuyant sur une autre manière de percevoir les algorithmes. Cette même manière de percevoir les algorithmes en décomposant les taches à effectuer en fonction des nécessités sert aussi de base à la conception pour faire du calcul parallèle.

On distingue trois nivaux de parallélisations :

— au niveau de Gauss-Jourdan ;
— au niveau du remplissage de matrice ;
— au niveau de l'anode et de la cathode.

Les parallélisations au niveau de l'anode, de la cathode et des autres modules en général engendrent une problématique de synchronisation entre les taches de calcul. Cette synchronisation est faite par une boucle de calcul qui contient les modèles statiques fluidiques et qui met les paramètres à jour dans tous les autres modules à la fin de chaque itération de calcul.

Pour programmer ces algorithmes et parallélisations, un compilateur transforme des modules paramétrés sous forme d'un scripte en un code en langage C. Ce compilateur fonctionne en imbriquant des fonctions préprogrammées les unes dans les autres. On distingue les fonctions préprogrammées pour les calculs de base :

— l'application d'une formule sur toutes les mailles ;
— la recherche de valeur dans une table d'interpolation.

Les fonctions préprogrammées pour gérer l'assemblage des autres fonctions :

— l'application d'une fonction sur toutes les mailles ;
— l'assemblage de plusieurs fonctions entre elles pour en former une nouvelle.

Les fonctions préprogrammées pour résoudre des systèmes et des équations :

— l'application de la méthode dichotomique ;
— l'application de Gauss-Jourdan sur un système ;
— l'application de Gauss-Jourdan sur des systèmes indépendants générés pour chaque maille ;
— l'application de Gauss-Jourdan sur un système entier généré à partir de toutes les mailles et d'une carte de configuration.

Il y a une seule fonction préprogrammée qui permet à l'aide d'un système multi-agents de résoudre les problèmes explicites le long des flux. Vient ensuite, les fonctions préprogrammées pour le calcul parallèle :

— la mise en place d'une fonction dans une tache parallèle séquencée ;
— la synchronisation intelligente de deux taches qui permet de ne pas en interrompre une au milieu d'une itération de calcul ;
— un système spécial de recherche et d'élimination des instabilités naissantes.

Enfin, une fonction spéciale permet d'intégrer les valeurs associées d'une couche de maille à une autre couche de maille différente.

Le grand intérêt de cette programmation modulaire et de laisser la perspective de pouvoir passer directement le scripte dans un autre compilateur pour l'implémenter plus tard dans un FPGA.

Chapitre 4

Validation du modèle programmé

4.1 Validation physique

4.1.1 Recherche des paramètres

Tous les paramètres d'entrées utilisés dans le programme sont donnés avec leurs valeurs et par modules dans les tables 4.2, 4.1, 4.5, 4.3 et 4.4. Ils proviennent essentiellement d'un modèle développé pour la pile à combustible Ballard Nexa 1.2 kW dans [27].

4.1.1.1 L'estimation initiale

Les paramètres **Cat I** sont directement prélevés dans la littérature et notamment dans un précédent modèle sur la même pile à combustible [27]. Quelques autres valeurs intrinsèques aux gaz de réaction ont été retrouvé à partir de Wikipedia, c'est le cas de la viscosités de l'air par exemple ou de la masse molaire de l'azote, etc. Certaines valeurs viennent d'estimations (des moyennes pondérées pour les viscosités des mélanges, des bilans pour les masses molaires etc...).

Les paramètres **Cat II** sont plus difficiles d'accès car ils ne sont pas visibles de l'extérieur, deux configurations standards sont prises pour représenter ces canaux, la configuration série pour le coté anode et la configuration parallèle pour le coté cathode. Ensuite, ces configurations sont posées sur le maillage de manière optimale. Cela nous a donné les deux matrices 4.1 et 4.2.

1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1
1	0	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	0	1
1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1
1	0	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	0	1
1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1
1	0	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	0	1
1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1
1	0	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	0	1
1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1
-100	0	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	0	-200
1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1
1	0	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	0	1
1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1
1	0	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	0	1
1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1
1	0	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	0	1
1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1
1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1

FIGURE 4.1 – Le paramètre config pour la cathode

1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
-100	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1
1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	0	1
1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1
1	0	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1
1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	0	1
1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1
1	0	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1
1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	0	1
1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1
1	0	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1
1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	0	1
1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1
1	0	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-200
1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1

FIGURE 4.2 – Le paramètre config pour l'anode

Les paramètres **Cat III** sont de simples définitions de conditions aux limites de bords pour les calculs. Soient les figures 4.7, 4.8, 4.9, 4.12, 4.11 et 4.10.

Les paramètres **Cat IV** sont des paramètres déterminés directement par des essais du programme pour permettre son bon fonctionnement.

Les paramètres **Cat V** doivent être initiés en fonction des conditions initiales de fonctionnement de la pile et remis à jour pendant sont fonctionnement.

Les paramètres fluidiques coté Cathode				
Symb	Valeur	Unité	Description	Cat
$Preact$	1.0×10^{5}	Pa	la pression de l'air utilisée du coté cathode	I
mu	1.8×10^{-5}	$Pa \cdot s$	la viscosité dynamique moyenne du mélange air/vapeur dans la cathode	I
$porosite$	0.45	NC	la porosité de la GDL coté cathode	I
Kp	1.76×10^{-11}	m	coefficient de perte de charge dans la GDL coté cathode	I
$tortuosite$	1.5	m	tortuosité de la GDL coté cathode	I
K	32.0	NC	paramètre empirique lié aux pertes de charge dans les canaux coté cathode modifié par la simplification	I
$Ainlet$	4.0×10^{-7}	m^2	section de l'entrée qui alimente la cathode en air	I
$LGDL$	4.0×10^{-4}	m	épaisseur de la GDL coté cathode	I
Ha	60.0	%	l'humidité de l'air entrant coté cathode	V
$Ecreel$	1.0	mm	l'écart standard entre deux canaux du coté cathode	II
B	1.0	NC	le taux de simplification du coté cathode	II
$lcanal$	1.0	m	la longueur du canal le plus long du coté cathode	II
$prof$	6.32×10^{-4}	m	la profondeur des canaux du coté cathode	I
$config$	cf fig 4.1	$\mathbb{Z}$	la disposition des canaux du coté cathode	II
$configGDL$	cf fig 4.7	$\mathbb{Z}$	les bornes de la GDL coté cathode	III
dx	cf fig 4.3	m	la longueur des mailles coté cathode	II
dy	cf fig 4.4	m	la hauteur des mailles coté cathode	II
Age	cf fig 4.15	NC	la répartition relative de la porosité de la GDL dans la cathode	VI
Age_{min}	0.9	NC	le minimum relatif de répartition dans la cathode	VI
Age_{max}	1.0	NC	le maximum relatif de répartition dans la cathode	VI

TABLE 4.1 – Les paramètres fluidiques coté Cathode

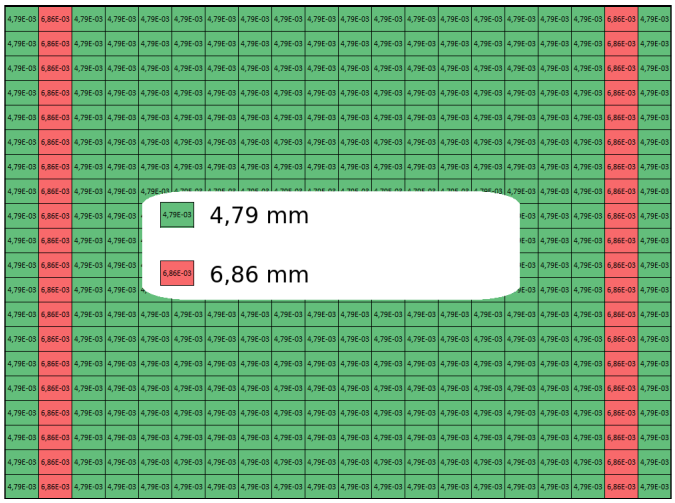


FIGURE 4.3 – Le paramètre dx pour la cathode

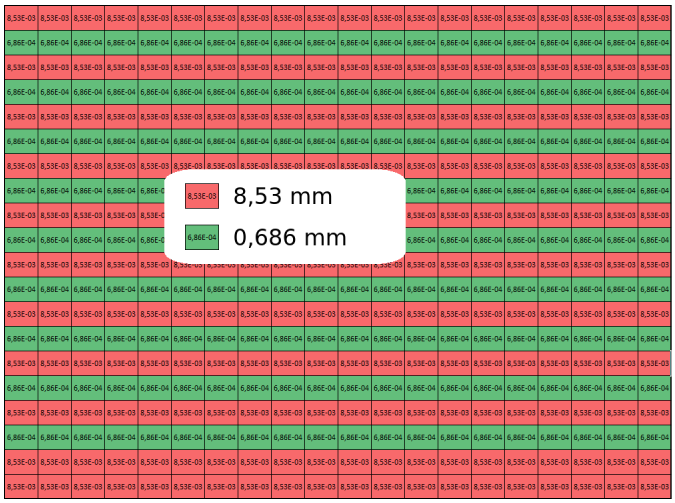


FIGURE 4.4 – Le paramètre dy pour la cathode

Les paramètres fluidiques coté anode				
Symb	Valeur	Unité	Description	Cat
$Preact$	1.0×10^5	Pa	la pression de l'air utilisée du coté anode	I
mu	9.3×10^{-6}	$Pa \cdot s$	la viscosité dynamique du dihydrogène	I
$porosite$	0.45	NC	la porosité de la GDL coté anode	I
Kp	1.76×10^{-11}	m	coefficient de perte de charge dans la GDL coté anode	I
$tortuosite$	1.5	m	tortuosité de la GDL coté anode	I
K	32.0	NC	paramètre empirique lié aux pertes de charge dans les canaux coté anode modifié par la simplification	I
$Ainlet$	4.0×10^{-7}	m^2	section de l'entrée qui alimente l'anode en air	I
$LGDL$	4.0×10^{-4}	m	épaisseur de la GDL coté anode	I
Hh	60.0	%	l'humidité de l'air entrant coté anode	V
$Vanode$	5.0×10^{-6}	m^3	le volume équivalent du coté anode	I
$Ecreel$	1.0	mm	l'écart standard entre deux canaux du coté anode	I
B	1.0	NC	le taux de simplification du coté anode	I
$lcanal$	1.0	m	la longueur du canal le plus long du coté anode	I
$config$	cf fig 4.2	$\mathbb{Z}$	la disposition des canaux du coté anode	II
$configGDL$	cf fig 4.8	$\mathbb{Z}$	les bornes de la GDL coté anode	III
$prof$	4.32×10^{-4}	m	la profondeur des canaux du coté anode	I
dx	cf fig 4.5	m	la longueur des mailles coté anode	II
dy	cf fig 4.6	m	la hauteur des mailles coté anode	II
Age	cf fig 4.16	NC	la répartition relative de la porrosité de la GDL dans l'anode	VII
Age_{min}	0.9	NC	le minimum relatif de répartition dans l'anode	VII
Age_{max}	1.0	NC	le maximum relatif de répartition dans l'anode	VII

TABLE 4.2 – Les paramètres fluidiques coté anode

Les paramètres pour la membrane				
Symb	Valeur	Unité	Description	Cat
lBi	18.0	NC	le contenu en eau initiale de la membrane	V
LM	1.5×10^{-4}	m	l'épaisseur de la membrane	I
dt	0.1	s	le pas de temps pour le calcul dynamique du contenu en eau dans la membrane	IV
$configM$	cf fig 4.9	$\mathbb{Z}$	les bornes de la membrane	III
Age	cf fig 4.17	NC	la répartition relative du vieillissement de la membrane	VII
Age_{min}	0.9	NC	le minimum relatif de répartition dans la membrane	VII
Age_{max}	1.0	NC	le maximum relatif de répartition dans la membrane	VII

TABLE 4.3 – Les paramètres pour la membrane

Les paramètres thermique				
Symb	Valeur	Unité	Description	Cat
$Lcoul$	5.0×10^{-3}	m	l'épaisseur de couche de refroidissement qui contribue à refroidir la cellule de chaque coté	I
$Tamb$	20.0	^oC	la température ambiante	V
$pfan$	0.1	%	pourcentage d'activation du ventilateur	VI
fan	0.05	$m^3 \cdot s$	débit volumique de référence à $pfan = 100\%$ pour le fluide de refroidissement	I
$DTtherm$	0.01	s	le pas de temps pour le calcul explicite dynamique thermique	IV
Hta	38.0	$W \cdot m^{-2} \cdot K^{-1}$	coefficient de convection des gaz de réaction dans les canaux coté cathode	I
Hth	4.0	$W \cdot m^{-2} \cdot K^{-1}$	coefficient de convection des gaz de réaction dans les canaux coté anode	I
$Cvtcool$	1.256×10^3	$J \cdot K^{-1} \cdot m^{-3}$	la capacité thermique volumique du fluide de refroidissement	I
$Cvtelec$	1611734.4	$J \cdot K^{-1} \cdot m^{-3}$	la capacité thermique volumique des plaques bipolaires	I
$Cvtgdl$	1611734.4	^oC	la capacité thermique volumique de la GDL	I
$Cveau$	1000.0	$J \cdot K^{-1} \cdot m^{-3}$	la capacité thermique volumique de la vapeur d'eau	I
$THCL$	5.2×10^1	$W \cdot m^{-1} \cdot K^{-1}$	la conductivité thermique des plaques bipolaires	I
$Cvair$	1000.0	$J \cdot K^{-1} \cdot m^{-3}$	la capacité thermique volumique de l'air	I
$Cvhydr$	97.72	$J \cdot K^{-1} \cdot m^{-3}$	la capacité thermique volumique de l'hydrogène	I
CvM	2167000.0	$J \cdot K^{-1} \cdot m^{-3}$	la capacité thermique volumique de la membrane	I
CmE	2010.0	$J \cdot K^{-1} \cdot Kg^{-1}$	la capacité thermique massique de la vapeur d'eau	I
CmO	920.0	$J \cdot K^{-1} \cdot Kg^{-1}$	la capacité thermique massique du dioxygène	I
LtE	2.24×10^6	$J \cdot Kg^{-1}$	la chaleur latente massique d'évaporation de l'eau	I
$THGDL$	3.0×10^1	$W \cdot m^{-1} \cdot K^{-1}$	la conductivité thermique de la GDL	I
THM	5.2×10^1	$W \cdot m^{-1} \cdot K^{-1}$	la conductivité thermique de la membrane	I
$Hcoul$	38.0	$W \cdot m^{-2} \cdot K^{-1}$	le coefficient de convection dans les canaux de refroidissement	I
$Henv$	20.0	$W \cdot m^{-2} \cdot K^{-1}$	le coefficient de convection avec l'extérieur	I
$Hgdl$	38.0	$W \cdot m^{-2} \cdot K^{-1}$	le coefficient de convection dans la GDL	I
$alfa$	0.5	NC	coefficient empirique de symétrie qui ajuste la répartition des pertes entre l'anode et la cathode	I
LCa	6.32×10^{-4}	m	profondeur des canaux du coté de la cathode	I
LCh	4.32×10^{-4}	m	profondeur des canaux du coté de l'anode	I
LBa	5.642×10^{-4}	m	épaisseur de la base de la plaque bipolaire du coté de la cathode	I
LBh	8.182×10^{-4}	m	épaisseur de la base de la plaque bipolaire du coté de l'anode	I
$LGDL$	4.0×10^{-4}	m	épaisseur des GDL	I
LM	1.5×10^{-4}	m	épaisseur de la membrane	I
Ti	20.0	^oC	la température initiale de la pile	V
$configfan$	cf fig 4.11	$\mathbb{Z}$	les conditions aux limites pour le circuit de refroidissement	VI
$fluxrefx$	cf fig 4.13	NC	les vitesses relatives des gaz de refroidissement dans la direction $\overrightarrow{x}$	VI
$fluxrefy$	cf fig 4.14	NC	les vitesses relatives des gaz de refroidissement dans la direction $\overrightarrow{y}$	VI
$configT$	cf fig 4.12	$\mathbb{Z}$	un fichier de configuration spécial qui donne les conditions aux limites pour les phénomènes de conductions dans le plan de la cellule	III

TABLE 4.4 – Les paramètres thermiques

Les paramètres Électrochimiques				
Symb	Valeur	Unité	Description	Cat
$Vcor$	0.0	V	une tension de correction pour ajuster le modèle	I
$Ioref$	2.416	$A \cdot m^{-2}$	la densité de courant de référence	I
Po	101325.0	Pa	la pression de référence	I
$Jcref$	0.1	$A \cdot m^{-2}$	densité de courant de fuite	I
Ca	-4.5	NC	coefficient d'interpolation	IV
Cb	0.23	NC	coefficient d'interpolation	IV
Cc	0.08	NC	coefficient d'interpolation	IV
Cd	0.0226	NC	coefficient d'interpolation	IV
Ce	5.5	NC	coefficient d'interpolation	IV
Cf	3.6363636	NC	coefficient d'interpolation	IV
Cg	0.012	NC	coefficient d'interpolation	IV
Ua	0.85	V	tension choisie pour l'interpolation polynomiale	IV
Ub	0.7	V	tension choisie pour l'interpolation polynomiale	IV
Uc	0.55	V	tension choisie pour l'interpolation polynomiale	IV
Ud	0.45	V	tension choisie pour l'interpolation polynomiale	IV
Ue	0.4	V	tension choisie pour l'interpolation polynomiale	IV
Lo	0.1	m	la longueur d'une cellule	I
La	0.1	m	la largeur d'une cellule	I
$configI$	cf fig 4.10	$\mathbb{N}$	les bornes pour le calcul de répartition de courant	III
Age	cf fig 4.17	NC	la répartition relative du vieillissement de la couche catalytique	VII
Age_{min}	0.9	NC	le minimum relatif de répartition dans la couche catalytique	VII
Age_{max}	1.0	NC	le maximum relatif de répartition dans la couche catalytique	VII

TABLE 4.5 – Les paramètres électrochimiques

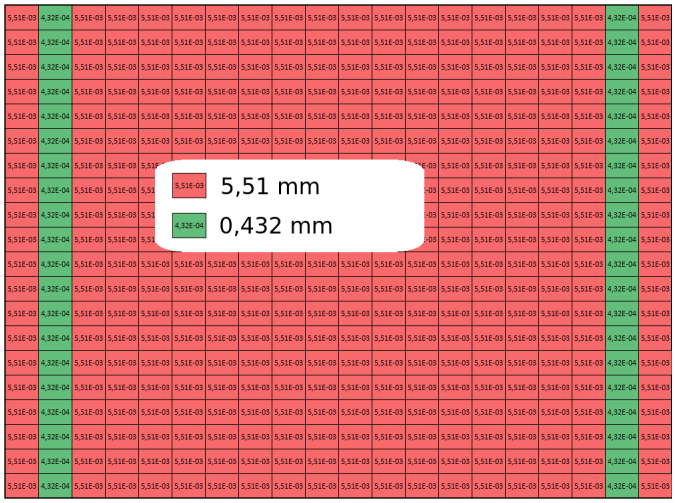


FIGURE 4.5 – Le paramètre dx pour l'anode

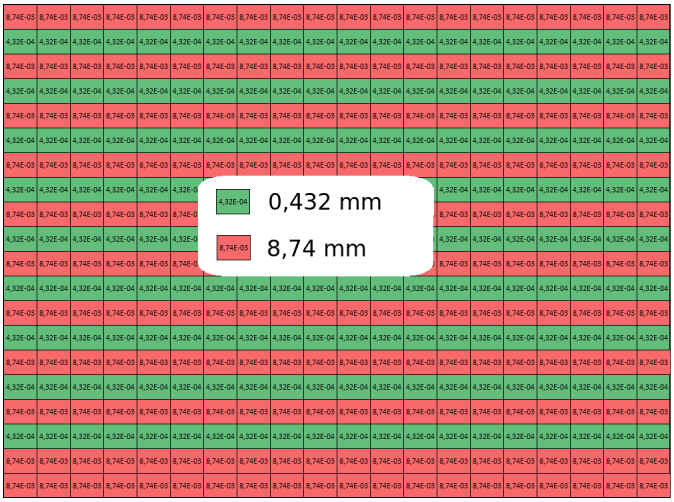


FIGURE 4.6 – Le paramètre dy pour l'anode

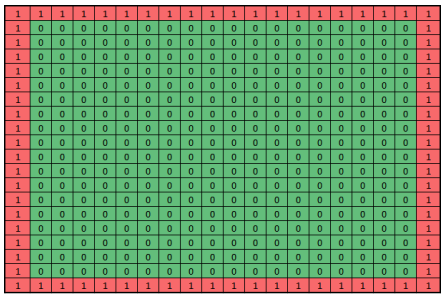


FIGURE 4.7 – Le paramètre configGDL pour la cathode

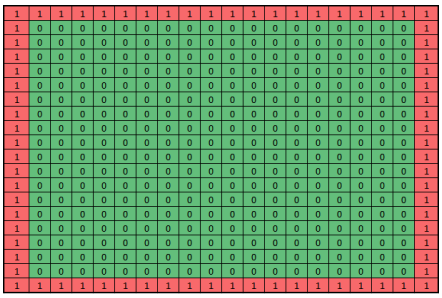


FIGURE 4.8 – Le paramètre configGDL pour l'anode

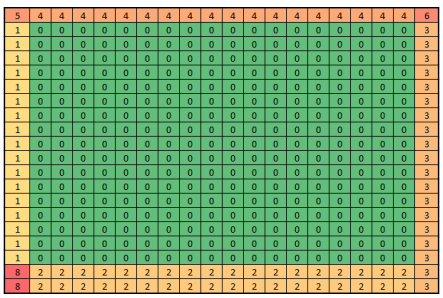


FIGURE 4.9 – Le paramètre configM pour la membrane

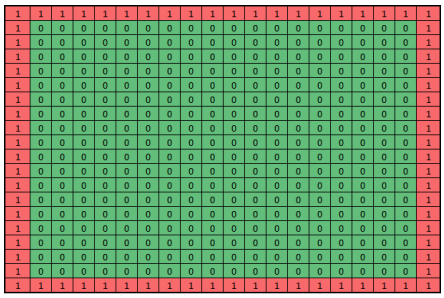


FIGURE 4.10 – Le paramètre configI pour le module éléctrochimique

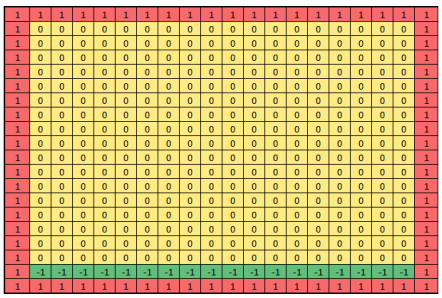


FIGURE 4.11 – Le paramètre configfan pour le circuit de refroidissement du module thermique

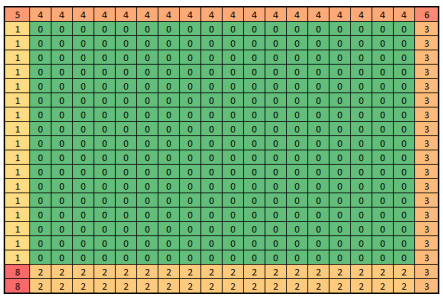


FIGURE 4.12 – Tableau du paramètre configT pour le module thermique

Les paramètres **Cat VI** découlent d'une étude [16]. Les répartitions des $fluxrefx$ et $fluxrefy$ sont données dans les figures 4.13 et 4.14.

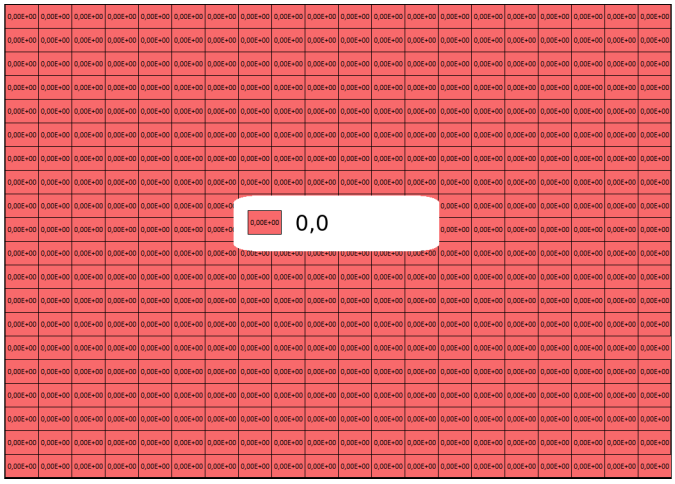


FIGURE 4.13 – Le paramètre fluxrefx



FIGURE 4.14 – Le paramètre fluxrefy

On remarque que la matrice $fluxrefx$ est nulle, c'est parce que tous les canaux de refroidissement sont dans la direction $\overrightarrow{y}$.

Les paramètres **Cat VII** sont des paramètres spéciaux pour représenter le vieillissement. En effet, le vieillissement n'est pas uniforme dans une cellule car il est catalysé par la chaleur, l'humidité, etc. Donc quand on fait les essais sur une pile déjà âgée (c'est le cas ici), l'utilisation de paramètres globaux comme la porosité ($porosite$) ou la densité de courant de référence ($i0ref$) fausse le calcul car ces paramètres varient sur la surface. On décide donc de proposer une répartition approximative et ajustable sur ces paramètres. On a choisi de traiter trois dégradations principales :

— le vieillissement de la membrane et sa perte de conductivité ;
— la compression de la GDL lors de l'assemblage ;
— le vieillissement de la couche catalytique et donc la baisse de son pouvoir catalytique.

Pour la compression de la GDL, on sait que les contraintes qui compriment la GDL se trouvent là où il n'y a pas de canaux. Donc sur nos maillages, les mailles au dessus des canaux auront la plus grande porosité et les autres mailles la plus faible comme le montre les figures 4.15 et 4.16 pour la cathode et l'anode.

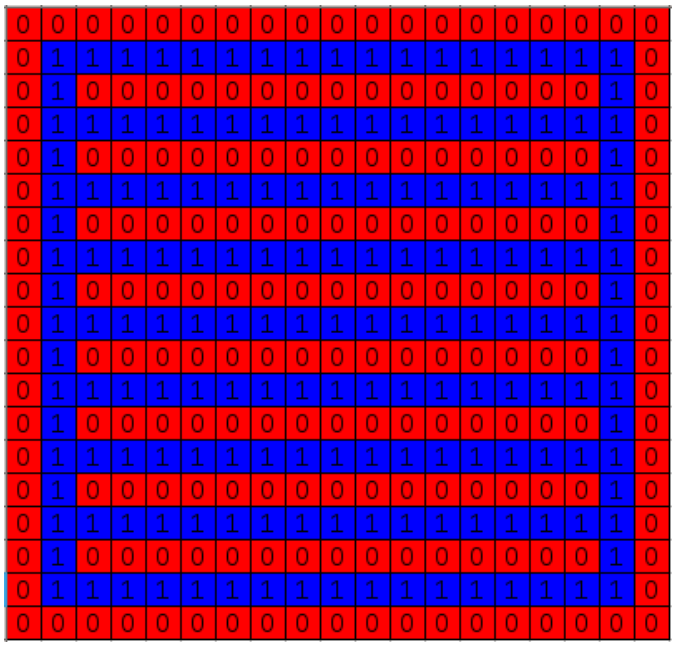


FIGURE 4.15 – Le paramètre *Age* pour la cathode

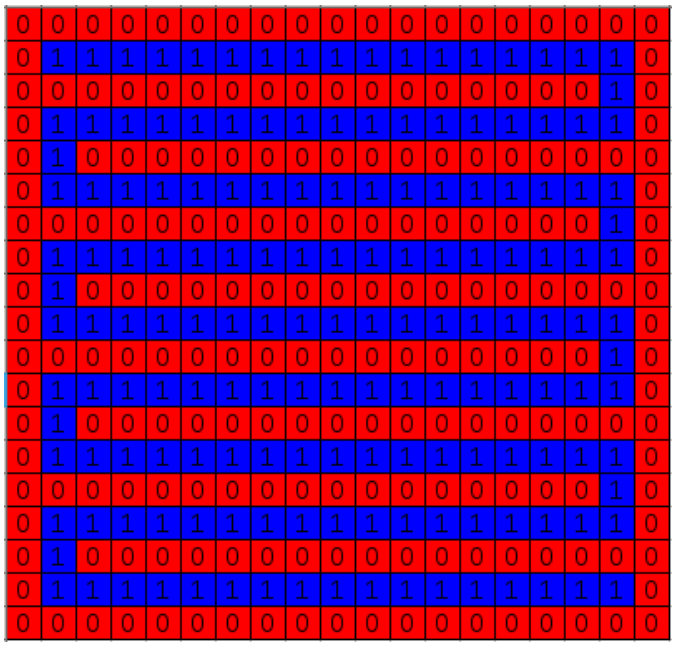


FIGURE 4.16 – Le paramètre *Age* pour l'anode

Pour le vieillissement de la membrane et de la couche catalytique, il est du essentiellement à des réactions chimiques de corrosions. Or, 4 facteurs cinétiques sont liés à la corrosion :

- la température ;
- l'humidité (la présence abondante d'eau) ;
- un courant élevé ;
- une tension élevée et cyclique.

Or ici, on ne s'intéresse qu'à la répartition du vieillissement donc on met de coté la tension qui est uniforme et on va travailler avec les trois autres paramètres. Comme on ne connaît pas encore exactement la relation mathématique qui lie ces trois paramètres au vieillissement, on va tout poser linéairement (première approximation) soit l'équation 4.1.

$$Age = 1 - \frac{\rho_{H_2O} - MIN(\rho_{H_2O})}{MAX(\rho_{H_2O}) - MIN(\rho_{H_2O})} \times \frac{T - MIN(T)}{MAX(T) - MIN(T)} \times \frac{J - MIN(J)}{MAX(J) - MIN(J)} \tag{4.1}$$

Où :

- $MIN(x)$ le minimum de x sur la surface ;
- $MAX(x)$ le maximum de x sur la surface ;
- ρ_{H_2O}, T et J respectivement la densité molaire en eau, la température et la densité de courant au nivau de la couche catalytique du coté de la cathode.

On prendra la moyenne de ces valeurs sur un profil de courant aléatoire simulé. Ceci nous donne la répartition de la figure 4.17.

Enfin, les paramètres ajustables Age_{min} et Age_{max} sont utilisés lors du lancement du programme pour réajuster les matrices *Age* afin que les 0.0 correspondent aux Age_{min} et les 1.0 aux Age_{max}.

Dans le cas du vieillissement de la couche catalytique, le paramètre *Age* agira comme dans l'équation 4.2.

$$I_0(n,m) = I_0^{ref} \times Age \times \Delta S \tag{4.2}$$

Dans le cas de la membrane, le paramètre *Age* agira comme dans l'équation 4.3.

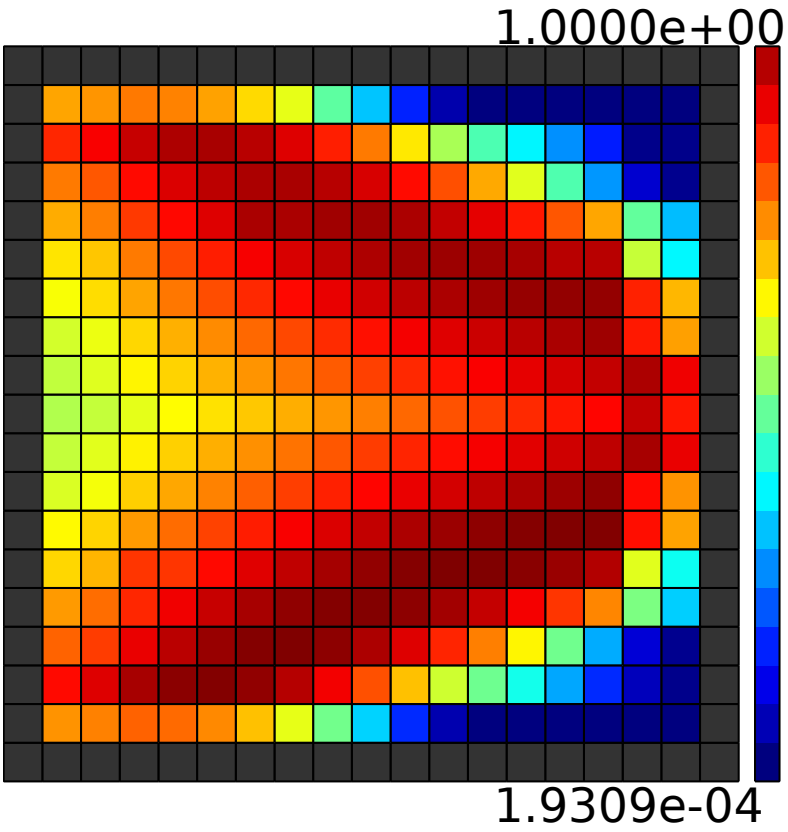


FIGURE 4.17 – la répartition *Age* pour la membrane et la couche catalytique (ratio de 0 à 1)

$$
\begin{aligned}
R_{elec} &= \sum\Big(\frac{1}{0.5139 Age\lambda_{z1}-0.326)exp\big(1268.0\big(\frac{1}{303}-\frac{1}{T}\big)\big)\frac{\Delta S}{l_{mem/5}}} \\
&+ \frac{1}{0.5139 Age\lambda_{z2}-0.326)exp\big(1268.0\big(\frac{1}{303}-\frac{1}{T}\big)\big)\frac{\Delta S}{l_{mem/5}}} \\
&+ \frac{1}{0.5139 Age\lambda_{z3}-0.326)exp\big(1268.0\big(\frac{1}{303}-\frac{1}{T}\big)\big)\frac{\Delta S}{l_{mem/5}}} \\
&+ \frac{1}{0.5139 Age\lambda_{z4}-0.326)exp\big(1268.0\big(\frac{1}{303}-\frac{1}{T}\big)\big)\frac{\Delta S}{l_{mem/5}}} \\
&+ \frac{1}{0.5139 Age\lambda_{z5}-0.326)exp\big(1268.0\big(\frac{1}{303}-\frac{1}{T}\big)\big)\frac{\Delta S}{l_{mem/5}}}\Big)
\end{aligned}
\tag{4.3}
$$

4.1.1.2 L'ajustement

4.1.1.2.1 Les paramètres du modèle

Il y a plusieurs réserves à émettre au sujet des paramètres d'un modèle :

- les paramètres fournis pour une pile à combustible ont été déterminés d'une certaine manière et avec une certaine précision :
  - les paramètres géométriques tels que les épaisseurs sont forcément soumis à des erreurs de planéités dûs aux efforts de compressions des différentes couches lors de l'assemblage.
  - les porosités aussi sont soumises à ce genre d'altérations.
  - la mesure d'un support donné au micromètre près n'est pas rigoureuse, il n'est pas réellement possible de connaître, produire et assembler de tels supports avec une telle précision (à un coût raisonnable).
  - les cellules de pile à combustible sont produites en série, on ne peut pas mesurer toutes les couches une par une à chaque fois, donc les valeurs fournies sont des valeurs moyennes.
  - la plupart des paramètre sont empiriques et proviennent d'un ajustement sur un autre modèle.
- les paramètres changent au cours du temps :
  - il y a la corrosion qui va changer les propriétés des matériaux des couches et leurs épaisseurs.
  - il y a les ruptures mécaniques (fissures, pinholes), qui même microscopiques, changent les propriétés physiques des assemblages.

Finalement, même avec un modèle parfait, on ne disposerait pas de résultats parfaits en entrant les paramètres à notre portée car notre connaissance de ces paramètres est approximative et est interprétée sur la base d'hypothèses simplificatrices.

Le modèle étant lui même une représentation approximative du système sur la base d'hypothèses simplificatrices, ses paramètres ont leurs influences propres. Ainsi, chaque paramètre physique n'a pas la même valeur en fonction du modèle de représentation auquel il appartient. L'écart entre les valeurs d'un même paramètre dans différentes représentations du système ne doit pas être trop important pour que l'on puisse considérer ce paramètre comme pertinent.

Ainsi, il faut chercher la valeur équivalente des paramètres dans le modèle au voisinage des valeurs de mesure. En faisant ça, on émet deux hypothèses qui peuvent être validées si le modèle donne des résultats qui correspondent avec les mesures :

— le modèle est une représentation suffisamment fidèle de la réalité.
— les paramètres sur lesquels s'appuient la modélisation sont pertinents.

4.1.1.2.2 La complexité de recherche

Il y a beaucoup de paramètres à chercher, la complexité de recherche de ces paramètres est de l'ordre de $Resolution^{Nb_{params}}$ avec :

— $Resolution$, le nombre de possibilités considérées comme vraisemblables (proche des valeurs de mesure) ;
— Nb_{params}, le nombre de paramètres dans le modèle.

Comme il s'agit d'un modèle 2D, les paramètres sont en réalité des champs paramétriques. Dans notre cas, on a divisé l'espace en un tableau de 19×19 volumes de contrôle. Donc on aurait une recherche de complexité $Resolution^{Nb_{params} \times 19 \times 19}$.

La complexité est trop importante en l'état, il faut donc faire des hypothèses pour simplifier cette recherche de paramètres, soit :

— certains paramètres sont constants sur toute la surface ;
— certains paramètres sont soit très proches de la mesure, soit sont assez peu influents pour qu'une légère différence soit sans conséquence.

Ainsi, on choisit un nombre restreint de paramètres que l'on considère comme importants et potentiellement éloignés de la mesure :

— $porosite$: la porosité de la couche de diffusion ;
— $LGDL$: l'épaisseur de la couche de diffusion ;
— Ha : l'humidité injectée dans l'hydrogène avant d'entrer dans l'anode ;
— $Ecreel$: écart réel entre les canaux ;
— B : le taux de simplification ;
— $lcanal$: la largeur des canaux ;
— lBi : le contenu en eau de la membrane au démarrage de la pile ;
— LM : l'épaisseur de la membrane ;
— $I0ref$: le courant de référence pour les pertes par activations ;
— $Jcref$: le courant de fuite de référence ;
— $pfana$: la vitesse maximum du fluide de refroidissement ;
— $Hcoul$: le coefficient de convection dans les circuit de refroidissement ;
— Ka : le coefficient de frottement des gaz dans la cathode ;
— Kh : le coefficient de frottement des gaz dans l'anode.

La variabilité des paramètre sur la surface de la cellule est représentée par les paramètres relatifs du vieillissement. On émet donc l'hypothèse que c'est le vieillissement et la compression de la GDL qui dominent la répartition des paramètres sur la surface de la cellule.

4.1.1.2.3 La stratégie d'ajustement

Pour chercher les valeurs optimales des paramètres, il faut quantifier la qualité de ces valeurs. Pour ce faire, on compare le potentiel et la température estimée par le modèle à partir de ces paramètres avec le résultat d'une mesure pendant une expérience. L'équation 4.4 donne le calcul de cette quantification :

$$Err = \frac{1}{Nb_{aqui}} \sum_{i=1}^{Nb_{aqui}} \left(\left(Ui_{cell}^{exp} - Ui_{cell}^{mod} \right)^2 + \left(Ti_{cell}^{exp} - Ti_{cell}^{mod} \right)^2 \right) \tag{4.4}$$

Où :

— Nb_{aqui} est le nombre d'acquisitions faites pendant l'expérience ;
— U_{cell}^{exp} et T_{cell}^{exp} sont respectivement les tensions et températures moyennes des cellules mesurées ;
— U_{cell}^{mod} et T_{cell}^{mod} sont respectivement les tensions et températures moyennes des cellules estimées par le modèle.

Ainsi, plus Err est petit et plus la qualité des valeurs des paramètres est considérée comme bonne.

Comme on ne dispose pas de la puissance de calcul pour faire une recherche paramétrique avec un algorithme génétique, on va utiliser une méthode inspirée de la méthode de Newton. On estime toutes les dérivés de Err par rapport à chaque paramètre ($\frac{\partial Err}{\partial LGDL} \ldots$) puis on incrémente chaque paramètre en fonction de la valeur de la dérivé qui lui est associée et on recalcule Err. Ce procédé est répété encore et encore jusqu'à ce que le résultat soit satisfaisant. L'algorithme 4.18 explique dans le détail comment le programme d'ajustement fonctionne.

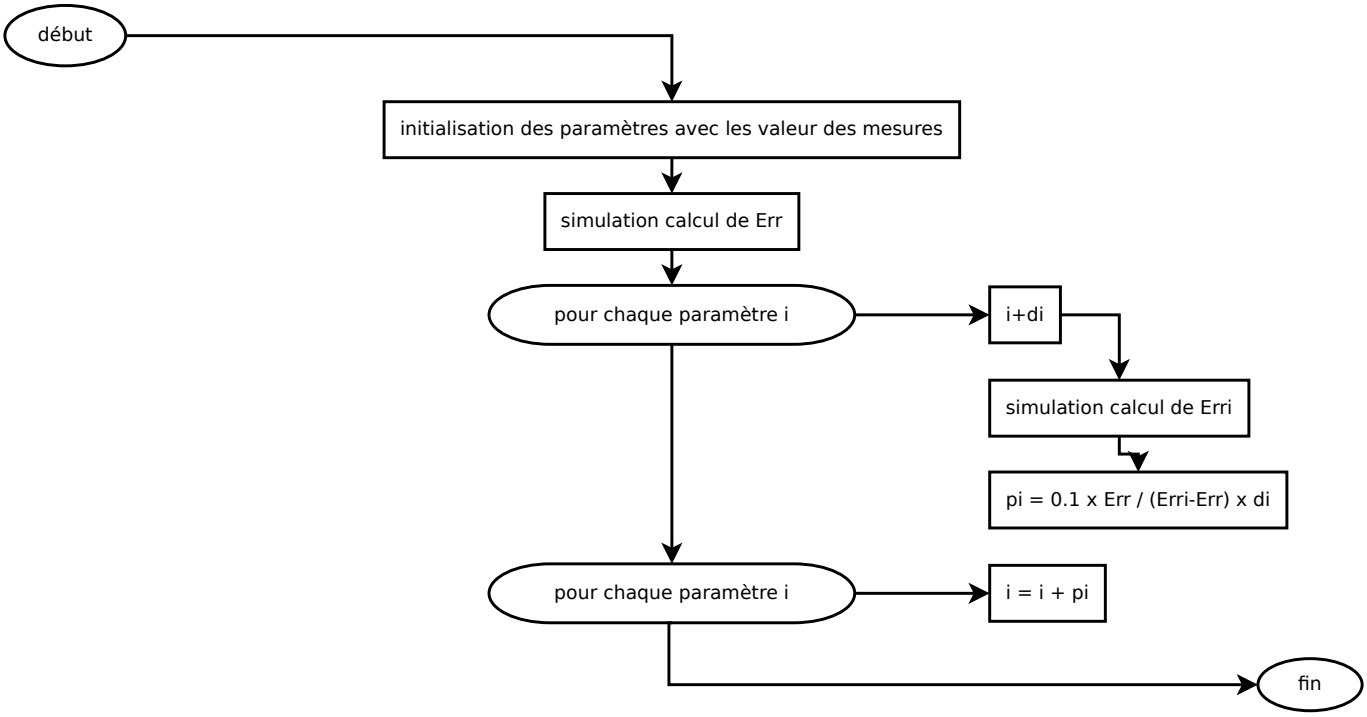


FIGURE 4.18 – Algorithme de recherche des paramètres du modèle

Ainsi, le programme tend vers la solution itération après itération. Cependant, il ne permet pas toujours d'atteindre la solution optimale du premier coup car il va conduire Err vers des extremums locaux. Il convient donc de faire plusieurs essais en partant de valeurs proches de celles fournies par les mesures.

Enfin, lorsque le résultat semble bon. On applique une fois encore cet algorithme en partant du résultat mais en faisant varier les paramètres Min et Max liés aux répartitions des paramètres du vieillissement.

4.1.2 Validation expérimentale

Deux expériences sont réalisées pour valider le modèle :

— une expérience dont les acquisitions sont utilisées pour ajuster les paramètres du modèle ;
— une expérience dont les acquisitions sont utilisées après ajustement pour valider le modèle.

Les deux expériences réalisées se passent de la même manière. Une pile à combustible (Ballard Nexa 1.2 kW) est reliée à un programme Labview qui récupère les données fournies par son système interne et a une charge qui laisse passer du courant en suivant un profil de courant pré-généré aléatoirement pour ne pas influencer l'expérience.

Ensuite, les simulations qui sont réalisées s'appuient sur les données acquises pendant l'expérience telles que le débit du compresseur, la température de l'air, la puissance relative du ventilateur de refroidissement et le courant pour calculer les tensions et températures des cellules.

On peut alors projeter et comparer ces résultats sur des courbes telles que les figures 4.19.

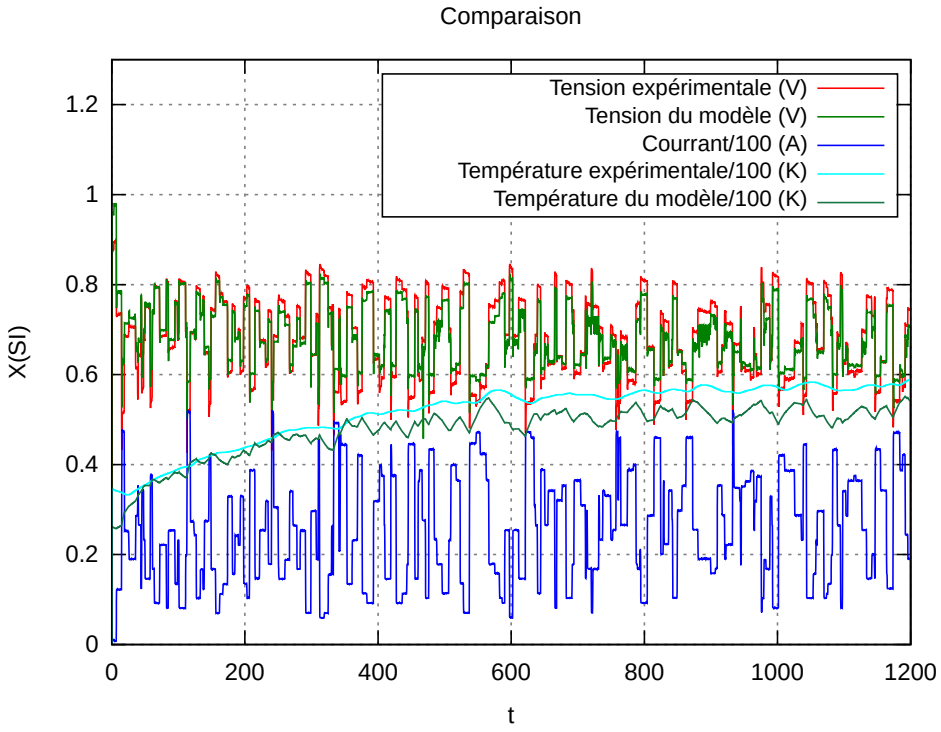


FIGURE 4.19 – Résultat de l'ajustement du modèle sur les valeurs expérimentales

On observe que l'erreur moyenne sur la prédiction de la tension qui est de 5%. Par contre la prédiction de la température est un peu moins précise. Cependant, il faut remarquer que la température n'est pas mesurée dans la cellule mais en sortie du stack alors que le modèle ne calcule la température que dans les cellules. Ainsi, la comparaison entre la température du modèle et la température expérimentale est approximative.

4.2 Validation numérique

4.2.1 Estimation des erreurs des calculs statiques dans les canaux

Le système de calcul des pressions dans les canaux est un calcul numérique par des méthodes d'éléments finis. Il faut donc faire des études de convergence en fonction du nombre de mailles et estimer l'erreur.

4.2.1.1 La convergence du calcul des pressions

Dans ce type de calcul, l'erreur croit en s'éloignant des conditions aux limites. On prendra donc comme valeur de référence, les valeurs les plus éloignées des conditions aux limites pour plusieurs nombres de mailles. Les figures 4.20 et 4.21 sont les résultats de l'étude de convergence (avec une seule itération) pour les pressions partielles des gaz et pour le flux de sortie de la cathode.

On peut constater que pour plus de 300 mailles, les pressions commencent à être calculées avec une bonne precision mais qu'un nombre de mailles plus important est nécessaire pour calculer le flux de sortie du coté cathode.

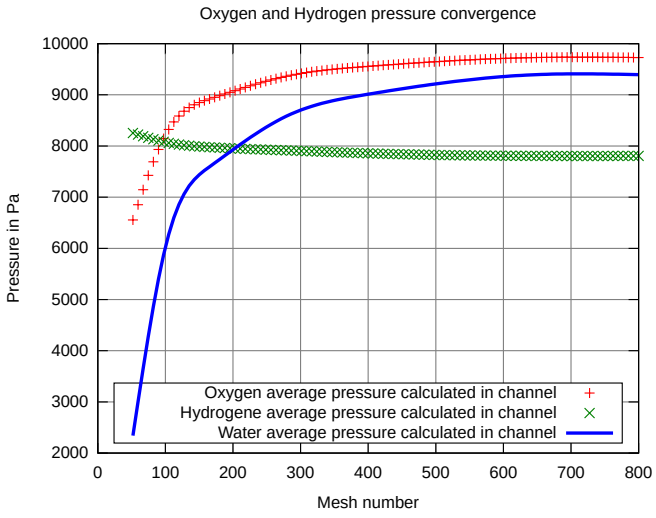


FIGURE 4.20 – Étude de convergence des pressions partielles

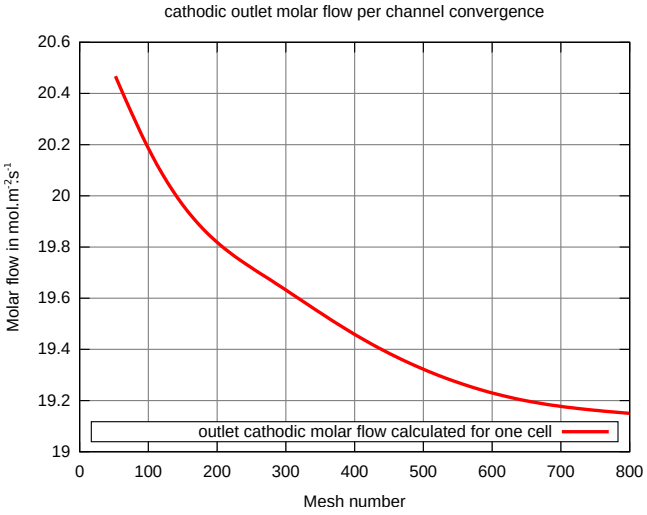


FIGURE 4.21 – Étude de convergences des flux de sortie de la cathode

4.2.1.2 La possibilité de se passer du re-calcul des volumes molaires

Pendant le calcul des pressions partielles des gaz dans les canaux et la couche catalytique, plusieurs itérations ont lieu durant lesquelles le volume molaire dans chaque maille est recalculé à partir de la pression à l'itération précédente. Il est intéressant d'observer que s'il y avait une seule itération de calcul et que le volume molaire était considéré comme constant, l'erreur ne serait pas trop importante.

L'erreur engendrée par cette hypothèse dépendrait du ratio de la différence de pression entre l'entrée et la sortie sur la pression moyenne. Ainsi, l'erreur est linéairement liée à la longueur des canaux comme on peut le voir dans la figure 4.22. On remarque que l'erreur relative est très faible : 0.011%.

Le maillage semble avoir aussi une influence sur l'erreur due à cette hypothèse comme le montre la figure 4.23. On obtient une erreur de moins de 5% pour une différence de pression de 15% entre l'entrée et la sortie. Cette hypothèse est donc acceptable dans le champs d'application typique des piles à combustible.

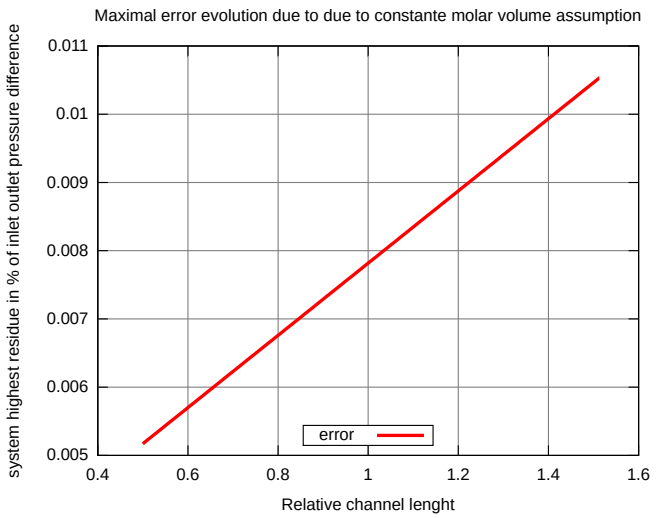


FIGURE 4.22 – Erreur générée par l'hypothèse de volume molaire constant pour le calcul des pressions dans les canaux en fonction de la longueur des canaux

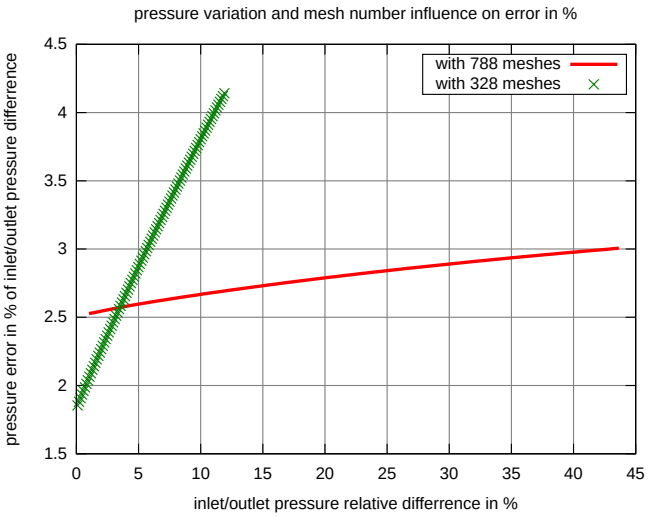


FIGURE 4.23 – Erreur générée par l'hypothèse de volume molaire constant pour le calcul des pressions dans les canaux en fonction du nombre de mailles et de la différence de pression entrée sortie

Enfin, la figure 4.24 montre la répartition de l'erreur sur une configuration parallèle où l'entrée est en bas à gauche et la sortie en haut à droite en s'appuyant sur le deuxième membre du système d'équation utilisé

pour le calcul des pressions dans les canaux. On observe aussi que cette erreur croit le long des canaux.

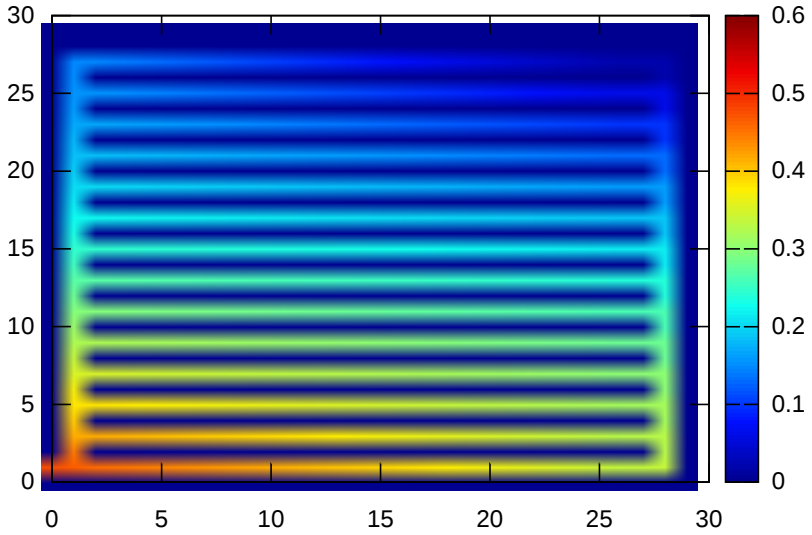


FIGURE 4.24 – La répartition de l'erreur dans les canaux liée à l'hypothèse du volume molaire constant

4.2.2 Estimation des erreurs des calculs dans la couche de diffusion

Afin, d'observer le réalisme du modèle de diffusion dans la GDL, on compare sur une itération, un calcul statique du même type que celui fait pour les canaux en 3D avec 5 couches de mailles et notre système de calcul. Les figures 4.25 et 4.26 représentent respectivement des résultats de notre modèle et du système de calcul statique 3D. Il s'avère en comparant les résultats obtenus valeur par valeur que si les valeurs sont proches les unes des autres, les écarts de densités molaires calculés au niveau de la couche catalytique entre les mailles au dessus des canaux et les mailles entre les canaux sont très différents (plus de 100% d'erreur). Rien n'indique cependant que le modèle 3D puisse être considéré comme une référence car l'espacement entre les canaux est grandement sur-estimé. Ainsi, il faut émettre des réserves sur les chutes de densité molaire estimées par le modèle entre les canaux.

Cependant, il faut rappeler que la variation relative des densités molaires dans une itération sur l'ensemble de la cellule est inférieure à 5%. L'écart de densité molaire entre les mailles au dessus des canaux et les mailles entre les canaux est bien plus faible que la variation de densité molaire sur la surface de la cellule. L'écart est donc infime, il n'y a donc rien de grave ou de surprenant à ce que l'on ne puisse pas le prédire avec exactitude.

Le rôle du système de calcul des densités molaires au niveau de la couche catalytique permet de faire la transition entre une répartition de densité sur des canaux et une surface de répartition de densité molaire. C'est plus un filtre graphique qu'un véritable système de calcul par éléments finis. Si il n'y avait qu'une seule itération de calcul, calculer des moyennes locales de densités molaires entre les canaux pourrait suffire. Mais la nécessité du calcul en plusieurs itérations couplées avec le calcul de la répartition de courant impose une pondération intelligente dans ce calcul est une estimation des flux sortants et entrants des canaux.

4.2.3 Stabilité numérique du système itératif général

Lors des itérations, la répartition des densités molaires au niveau de la couche catalytique se déplace pour tendre vers un équilibre où toutes les équations sont satisfaites.

Cependant, si on continue à faire des itérations, il arrive que le système devienne instable. On décide donc de limiter le nombre d'itérations à un nombre maximum qui varie en fonction de la stabilité du système.

Une autre complication, c'est le fait qu'en fonction de l'état initial de la répartition des densités molaires, l'équilibre ne se fait pas de la même manière à la dernière itération. Ainsi, le résultat final dépend des conditions initiales (ce qui est un peu perturbant pour un système de calcul statique). Donc, il peut être intéressant de pousser les recherches de ce coté pour voir si ce système physique est de nature à avoir plusieurs points d'équilibres dépendant des conditions initiales.

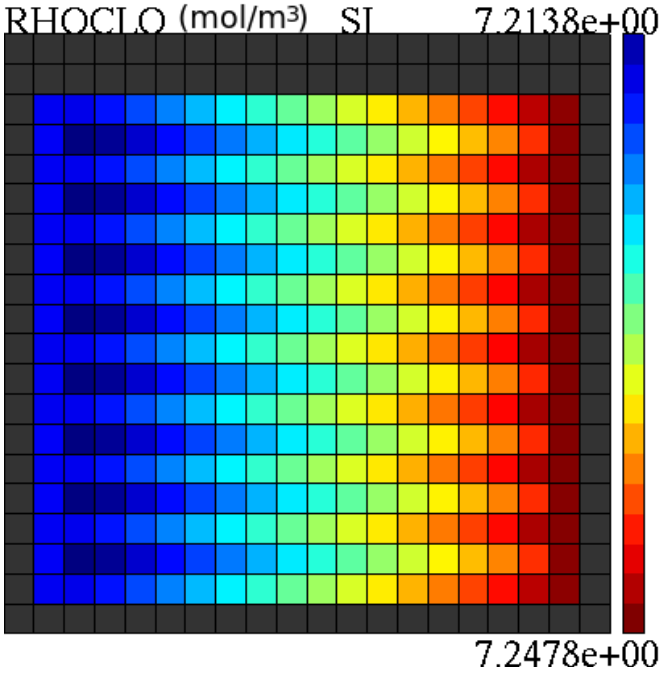


FIGURE 4.25 – Une répartition type de densités molaires d'oxygène au niveau de la couche catalytique après une itération

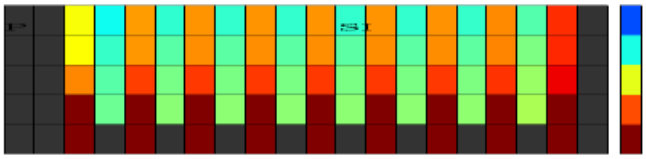


FIGURE 4.26 – Répartition transversale de la pression dans la couche de diffusion calculée avec un système statique 3D de 5 couches de mailles

4.3 Validation temps réel

4.3.1 Performance de l'optimisation des calculs statiques dans les canaux

Il existe dans la littérature des études de vitesse de calcul par éléments finis pour des applications en temps réel (pour des systèmes simples dynamiques ou pour la robotique). Par exemple, Audette et al. Huthwaite [8] propose un système de calcul par éléments finis pour calculer les mouvements d'un robot à 6 parties ("parts"). Hambli et al. [30] décrit une méthode pour développer un système temps réel en entraînant un réseau de neurones avec les résultats d'un système de calcul par éléments finis. Finalement, dans un article plus spécialisé, [36], un système de calculs temps réel par éléments finis est présenté pour tourner sur un GPU, mais un tel système est plus difficile à intégrer dans un système embarqué (moins classique).

Le module statique de calcul fluidique dans les canaux est optimisé, la mémoire vive utilisée en fonction du nombre de mailles est donnée dans la table 4.3.1. La mémoire utilisée par le module dépasse 5 MB pour plus de 400 mailles. Si on considère que 300 mailles sont suffisantes pour avoir un calcul assez précis, on peut conclure que ce module peut tourner dans un système embarqué. Cela est d'autant plus important que c'est le module de calcul du modèle qui a la plus haute complexité et qui est le plus gourmand en mémoire.

Nombre de mailles	104	200	328	556
Mémoire utilisée (kB)	916	1744	3428	8072

TABLE 4.6 – Mémoire vive utilisée en fonction du nombre de mailles

Pour vous donner une idée de la puissance de ces optimisations, la Figure 4.27 compare la mémoire nécessaire pour faire les calculs avec notre module avec un système de calcul classique non optimisé. Cette figure montre que la mémoire économisée est d'autant plus importante que le nombre de mailles est important.

Le nombre de mailles a une répercussion très importante sur le temps de calcul (complexité X^3). La table 4.3.1 donne le temps de calcul d'une itération en fonction du nombre de mailles.

Nombre de mailles	104	200	328	556
Temps de calcul	6.3 ms	39.5 ms	162 ms	744 ms

TABLE 4.7 – Temps de calcul en fonction du nombre de mailles (avec un processeur de 1.4 GHz)

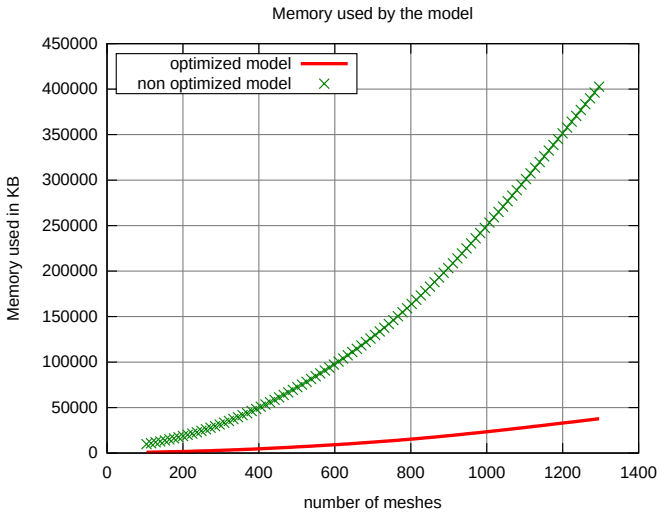


FIGURE 4.27 – Mémoire nécessaire pour faire tourner le module fluidique statique au nivaux des canaux en fonction du nombre de mailles

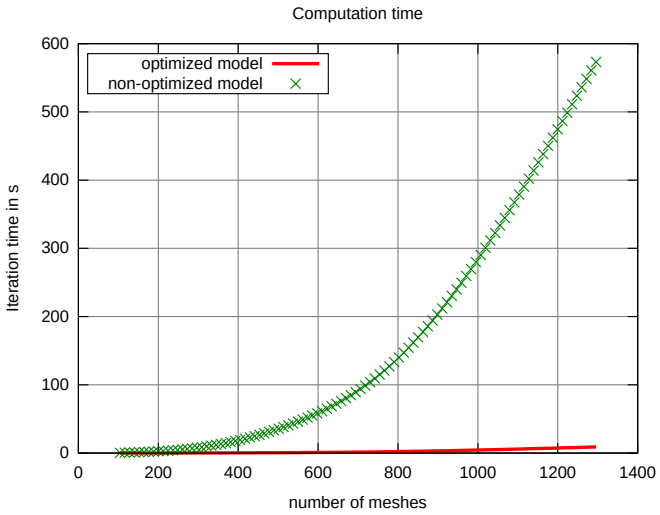


FIGURE 4.28 – Le temps de calcul d'une itération du module fluidique statique au nivaux des canaux en fonction du nombre de mailles

$n \times m$	100	400	1600
temps en ms	10	40	230

TABLE 4.8 – Les temps de calcul avec la méthode classique

Au delà de 600 mailles, il faut plus d'une seconde pour faire le calcul. Mais pour 400 mailles, 0.4 seconde est suffisante, ce qui est satisfaisant pour un système de calcul statique en temps réel comme le notre.

La Figure 4.28 donne elle aussi une idée des temps de calcul qu'aurait nécessité un module non optimisé. On remarque que le gaine sur le temps de calcul est plus important que celui sur la taille de la mémoire. Le gain augmente considérablement avec le nombre de mailles. Cette figure nous montre aussi que pour un nombre de maille important, même optimisé, le modèle a un temps de calcul trop important. Ainsi, un compromis est nécessaire sur l'erreur numérique.

4.3.2 Performance de l'optimisation des calculs dans la couche de diffusion

Le temps de calcul d'une itération avec le module des canaux et celui de la couche de diffusion réunis est de $200ms$ pour 400 mailles avec un processeur de $3GHz$. Dans les mêmes conditions avec un modèle statique 3D en 5 couches pour la GDL, il faut 112s. L'optimisation du calcul dans la GDL est incontournable pour une application temps réel.

4.3.3 Performance des techniques d'optimisation pour le calcul des répartitions de courant

Les temps de calcul sont exprimés dans le tableau 4.9 en fonction du nombre de volumes de contrôle $(m \times n)$.

On remarque que les temps de calcul peuvent bien être optimisés, mais que cette optimisation n'est pas critique pour notre modèle. En effet, les temps de calcul initiaux sont suffisamment courts à l'état classique.

Une autre remarque importante, c'est qu'en fonction du support de calcul utilisé, certaines optimisations sont moins intéressantes que d'autres. Le tableau 4.10 fait le bilan des intérêts de ces optimisations.

$n \times m$	100	400	1600
temps classique en ms	10	40	230
temps optimisé en ms	0.1	0.5	2.3

TABLE 4.9 – Les temps de calcul avec l'algorithme optimisé totalement

	Hautes variations	Charges stables
FPGA	— Usage de la table des courants plus intéressant car plus facile à programmer pour un FPGA et plus précise pour des applications à hautes variations. — La construction du polynôme pour retirer la deuxième boucle dichotomique n'est pas recommandée ici car elle serait difficile à programmer dans un FPGA et on ne manque pas de vitesse avec ce matériel.	— La table des courants ici n'est pas très utile, la formule interpolée remplira bien son rôle et sera plus facile à programmer. — La construction du polynôme pour retirer la deuxième boucle dichotomique n'est pas recommandée ici car elle serait difficile à programmer dans un FPGA et on ne manque pas de vitesse avec ce matériel.
GPU	— En fonction de la mémoire disponible, il peut être plus ou moins intéressant d'utiliser la table des courants. — La construction du polynôme pour faire sauter la deuxième boucle est tout indiquée ici car parfaitement adaptable pour du calcul parallèle.	— La table des courants ici n'est pas très utile, la formule interpolée remplira bien son rôle et sera plus facile à programmer. — La construction du polynôme est tout indiquée ici car parfaitement adaptable pour du calcul parallèle.
CPU	— En fonction de la mémoire disponible, il peut être plus ou moins intéressant d'utiliser la table des courants. — Il est plus rapide ici de laisser la deuxième dichotomie et de ne pas utiliser le polynôme qui est moins rapide en calcul non parallèle.	— La table des courants ici n'est pas très utile, la formule interpolée remplira bien son rôle et sera plus facile à programmer. — Il est plus rapide ici de laisser la deuxième dichotomie et de ne pas utiliser le polynôme qui est moins rapide en calcul non parallèle.

TABLE 4.10 – Avantages et inconvénients des optimisations pour le calcul de la répartition du courant en fonction du matériel et des charges étudiées

4.3.4 Performance des modules dynamiques explicites

4.3.4.1 Les performances en temps de calcul

Un essai a été réalisé dans lequel le programme envoyait un message d'erreur à chaque fois que le calcul dynamique prenait du retard par rapport au temps réel. En une dizaine de secondes, une dizaine de messages d'erreurs sont apparus (on évitera d'être plus précis en raison de l'aspect chaotique d'une telle expérience). Si on divise la valeur des pas de temps par dix, on obtient environ dix fois plus de messages d'erreurs. Si on multiplie la valeur des pas de temps par dix, il continue à y avoir des messages d'erreurs.

Plus tard, le temps de calcul réel d'une itération a été mesuré en sauvegardant un historique avec l'horloge utilisée par le programme. Il s'avère que sur un ordinateur de bureau, le temps de calcul d'une itération est inférieur à $1ms$ qui est aussi la résolution de l'horloge utilisée par le programme. Ainsi, même avec une puissance de calcul largement supérieure à ce qui est nécessaire pour faire tourner les modules dynamiques qui ont un pas de temps de l'ordre de $0.01s$ minimum, il y aura toujours des retards. On peut émettre l'hypothèse que ces retards viennent du fait que l'ordinateur ne fait pas seulement tourner le programme du modèle mais aussi en même temps d'autres programmes liés à son système d'exploitation. Il est possible que par moments le CPU ne soit pas disponible pendant une petite fraction de seconde de temps à autre. Cela justifie d'autant plus l'utilisation d'un système de rattrapage des retards.

4.3.4.2 La gestion des instabilités

Il y a en effet des instabilités qui apparaissent de manière chaotique plus ou moins de temps après le lancement du programme ou pas du tout. Ces instabilités apparaissent surtout dans les couches dynamiques de calculs situées entre deux couches statiques. Soit :

— la partie thermique pour la base de la plaque bipolaire ;
— le modèle de la membrane.

Le système de prévention contre les instabilités ne parvient pas 100% du temps à faire revenir le système à la normale et éviter l'instabilité. Cependant il permet toujours au système de continuer à fonctionner moyennant une erreur raisonnable ($< 10\%$) en attendant un changement de régime de courant qui ramènera le modèle à un fonctionnement normal. On distingue plusieurs cas de figure :

— les instabilités font "scintiller" la répartition des variables mais les valeurs restes proches des bonnes valeurs(voir figures 4.29 et 4.30) ;
— une erreur locale augmente pendant une fraction de seconde avant de disparaître (voir figure 4.31) ;
— le système est dépassé et les valeurs de bornes dominent une partie de la surface de la cellule (cas le plus défavorable, voir figure 4.32).

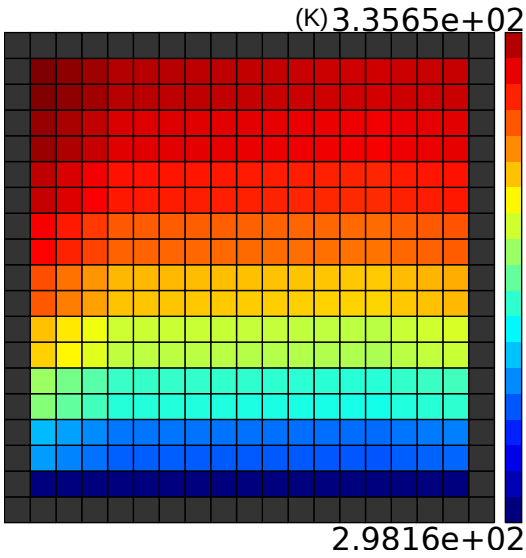


FIGURE 4.29 – Répartition de température du fluide de refroidissement en régime stable

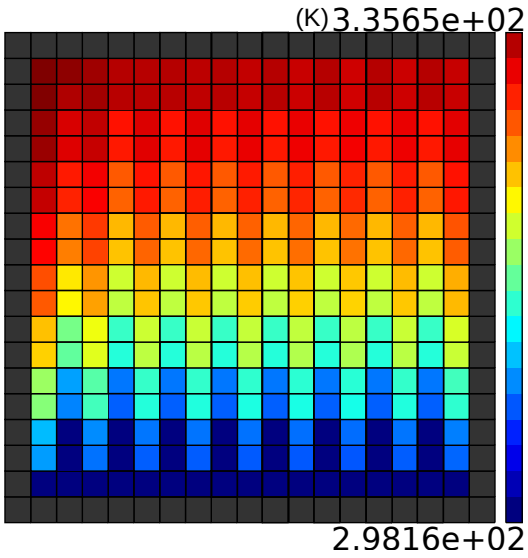


FIGURE 4.30 – Répartition de température du fluide de refroidissement en régime "scintillant"

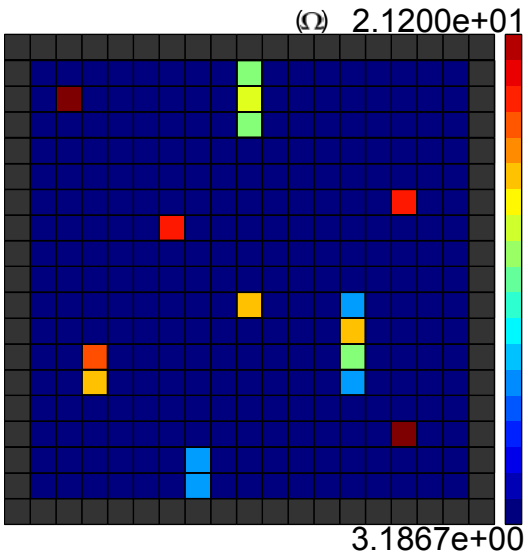


FIGURE 4.31 – Répartition de la résistance de la membrane avec des pic d'erreurs locales

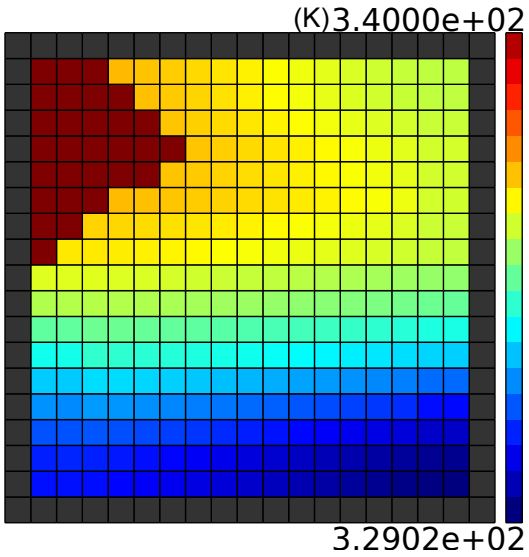


FIGURE 4.32 – Répartition de température de la base de la plaque bipolaire en cas d'erreur grave

La conséquence de ces instabilités ponctuelles sous contrôle se voit sur les tensions délivrées par le modèle. La figure 4.33 montre une étape intermédiaire visant à ajuster le modèle sur les résultats expérimentaux obtenus avec une Ballard Nexa 1.2kW. On voit que la courbe des tensions du modèle est plus bruitée que la courbe des résultats expérimentaux. Le modèle devient lui même un système plus complexe à prédire que ce qu'il modélise.

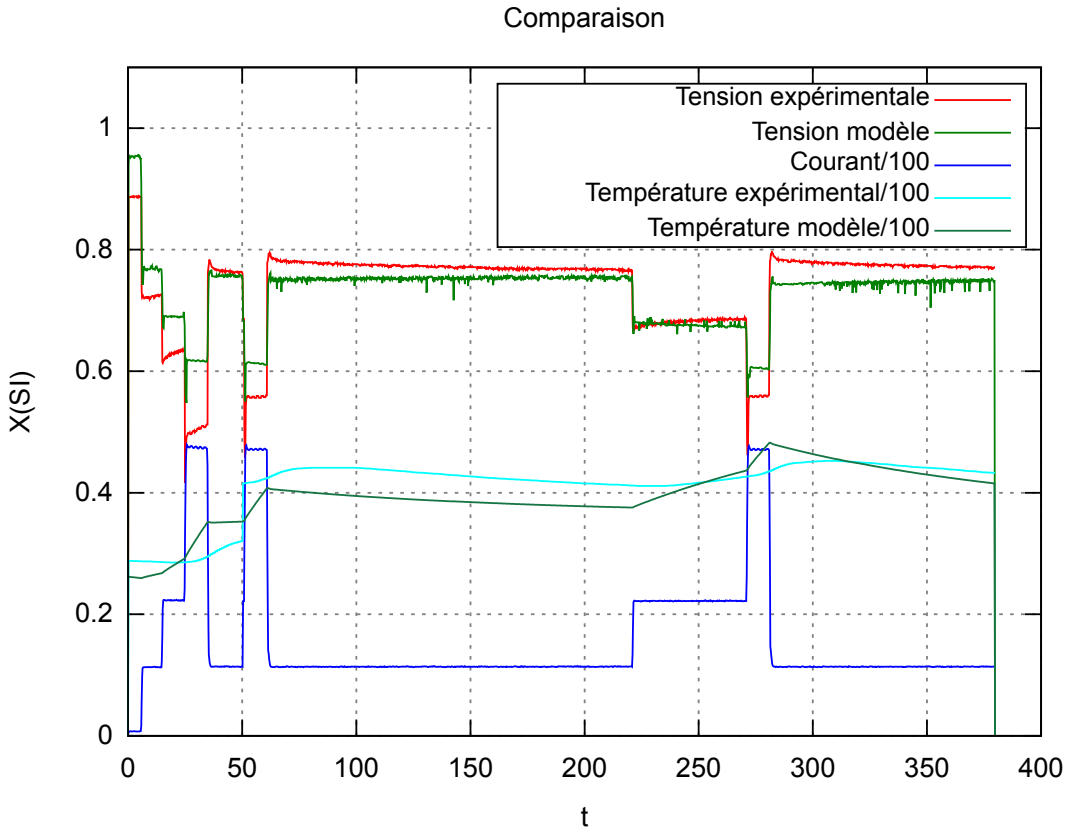


FIGURE 4.33 – Résultat intermédiaire d'ajustement du modèle (en état instable) à partir de données expérimentales

4.3.5 Performance des techniques de calculs parallèles

4.3.5.1 Bilan sur les types d'optimisations en calcul parallèle expérimentés (RAPPEL)

4.3.5.1.1 La parallélisation de l'anode et de la cathode

Comme l'anode et la cathode sont indépendantes l'une de l'autre (séparées par le modèle dynamique de la membrane), on peut séparer leurs calculs dans deux taches parallèles.

4.3.5.1.2 La génération de matrice par un complexe de zones calculées en parallèles

La génération de matrices est très présente dans tous les algorithme du modèle. Il peut donc être intéressant de l'optimiser avec un système parallèle tel que celui présenté dans la figure 4.34 et pouvant aussi être fait par un GPU.

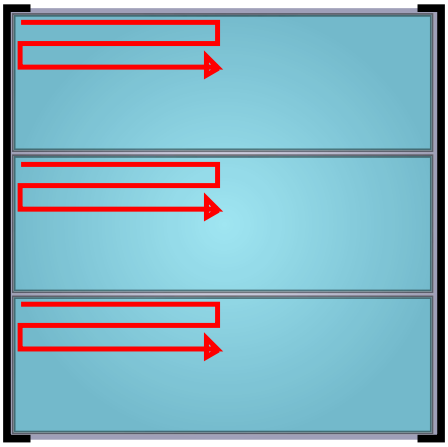


FIGURE 4.34 – Remplissage multi-taches d'une matrice

4.3.5.1.3 La parallélisation de l'algorithme de l'élimination de Gauss-Jordan

Il est difficile de paralléliser un tel algorithme qui est de nature récurrente. Cependant durant une itération, certaines parallélisations peuvent quand même êtres faites :

- Le plus haut coefficient peut être recherché dans plusieurs zones de la matrice en même temps.
- Les échanges de ligne de la matrice peuvent être réalisés avec le même principe que dans la figure 4.34.
- Les soustractions utilisées pour réduire les lignes peuvent aussi être parallélisées avec le même principe.

4.3.5.2 Résultats de l'étude et analyse

Ces essais ont été faits sur le modèle alors qu'il était composé d'un modèle 2D pour la partie fluidique des canaux et de la couche de diffusion coté anode et cathode et de modèles 1D pour le reste.

4.3.5.2.1 Les résultats mono tache non parallélisée

Une fois encore, le nombre de mailles a une influence sur les résultats et l'importance de l'optimisation du modèle. Le tableau 4.11 présente donc le temps de calcul d'une itération du modèle complet en fonction du nombre de mailles.

Nombre de mailles	Temps de calcul	Mémoire utilisée
100	4.3 ms	916 kB
400	141 ms	8072 kB
900	1827 ms	37.7 kB

TABLE 4.11 – Temps de calcul expérimental pour un système mono-tache

4.3.5.2.2 Les gains des optimisations en calcul parallèle

Afin de s'assurer de la qualité des résultats, les optimisations sont testées une à une. Pour pouvoir mesurer les différences infimes et rendre le temps du lancement négligeable, 1000 itérations de calculs sont faites et le temps de calcul nécessaire mesuré est ensuite divisé par 1000.

Les résultats obtenus sont donnés dans le tableau 4.12. On peut voir que pour 100 mailles ou moins, la parallélisation n'est pas vraiment une bonne idée à cause des instabilités qu'elle provoque et probablement du coût de calcul supplémentaire qu'elle nécessite. C'est la première optimisation (la parallélisation des calculs de l'anode et de la cathode) qui est la plus intéressante. Les autres optimisations ne deviennent intéressantes (voir applicable) seulement pour un nombre important de mailles.

Nombre de mailles	paral anode et cathode	paral remplissage matrice	paral Gauss-Jourdan
100	2.88(70%) ms	6.2(215%) ms	unstable ms
400	79.9(57%) ms	81.9(102%) ms	100(125%) ms
900	1019(56%) ms	1018(99.9%) ms	992(97.4%) ms
usage CPU(4 coeurs)	47.2%	50%	47%

TABLE 4.12 – Résultat des temps de calcul optimisés par un calcul parallèle

4.4 Conclusion partielle

La construction de la pile à combustible virtuelle se fait grâce à des paramètres issus :
— de la littérature ;
— de standards ;
— d'hypothèses de conditions aux limites ;
— de paramètres empiriques ;
— d'études spécifiques réalisées en interne ;
— d'hypothèses sur les conséquences du vieillissement.

Afin de prouver que la pile virtuelle a un comportement équivalent à une pile réelle, on applique un profil de courant à une pile réelle et on mesure sa tension pour la comparer à celle de la pile virtuelle. Malgré la complexité de la phase de recherche et d'ajustement des paramètres de la pile virtuelle, on arrive à une erreur moyenne inférieure à 5% sur la tension de la pile virtuelle par rapport à la pile réelle. Cependant, ces résultats sont obtenus avec un simple algorithme de régression linéaire appliqué sur une partie seulement des paramètres. Il est possible qu'avec des ordinateurs plus puissants d'autres algorithmes plus complexes puissent permettre un meilleur ajustement.

Bien que l'erreur numérique soit contrôlée, le modèle est en proie à des instabilités d'origine chaotique liées au calcul parallèle et à la prédiction dynamique explicite. Ces instabilités sont contrôlées et compensées de sorte que les valeurs des grandeurs de la pile virtuelle s'éloignent jamais trop des valeurs de la pile réelle. Cependant, le comportement de la pile à combustible virtuelle devient plus complexe car une sorte de "bruit" important vient se rajouter.

Les performances temps réel du programme de calcul sont suffisantes pour pouvoir faire tourner la pile virtuelle sur un ordinateur de bureau doté d'un CPU multi coeur (2 GHz, 4 coeurs au moins).

Chapitre 5

Analyse des résultats obtenus par le modèle multidimensionnel

Toutes les figures qui seront présentées dans ce chapitre sont des répartitions de grandeurs physiques dans le plan d'une cellule de pile à combustible orientée comme sur les figures 4.1 et 4.2 respectivement pour la cathode et l'anode. Le système de refroidissement par ventilateur va de bas en haut sur les figures. L'entrée des gaz se situe à gauche et la sortie à droite. Chaque carré représente une maille, et la valeur calculée en cette maille est directement donnée par sa couleur sans interpolation afin d'avoir une visibilité optimale sur les résultats.

Dans ce chapitre, les résultats sont obtenus à partir d'une configuration de pile à combustible virtuelle spécifique afin de faire ressortir facilement les propriétés et influences relatives des répartitions de grandeur physique. Dans une première partie on s'intéresse aux répartitions en régime permanent à bas courant puis à haut courant en étudiant séparément les résultats fluidiques, thermiques et électriques. Dans une deuxième partie on s'intéresse à l'évolution des grandeurs en fonction du courant avec des résultats d'évolutions statiques et dynamiques (suite à un échelon de courant).

Pour chaque résultat présenté, une série d'observation et d'hypothèse est donnée. Chaque observation et hypothèse sont nomées "$O^{domaine}_{numero}$" pour les observations et "$H^{domaine}_{numero}$" pour les hypothèses. Ce référencement est utilisé à la fin de chaque section pour construire des analyses, ainsi des tableaux récapitulatifs sont aussi donnés pour se référer à une observation.

5.1 En régime permanent

5.1.1 Courant faible

5.1.1.1 Résultats fluidiques

Les figures 5.1 et 5.2 donnent lieu aux observations suivantes :

— $O_1^{fluidic}$: les pressions des gaz dans les canaux varient de manière monotone de l'entrée à la sortie pour les bas courants.

— $O_2^{fluidic}$: les pressions des gaz dans les canaux ont une variation relative très faible ($< 1\%$) pour des bas courants.

— $H_1^{fulidic}$: comme la variation de pression dans les canaux est faible et inversée du coté cathode, on peut émettre l'hypothèse que le phénomène de frottement dans les canaux ne joue pas un rôle prépondérant.

— $Hp_1^{fluidic}$: c'est un ratio entre le débit de gaz fourni par le compresseur et le courant qui conditionne la variation de la pression dans les canaux du coté cathode et si la distribution de la pression sera croissante ou décroissante.

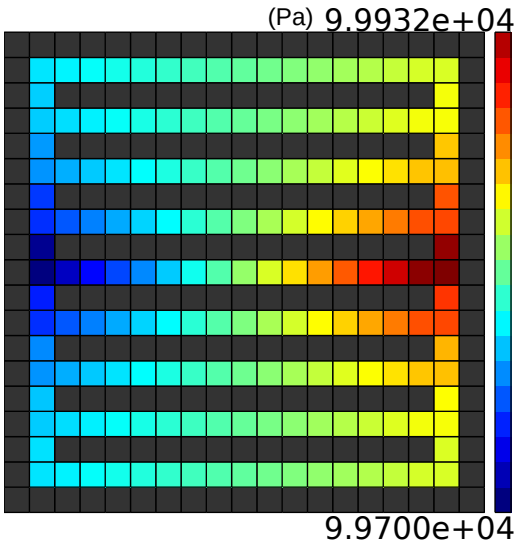


FIGURE 5.1 – Répartition de la pression dans la cathode pour un courant de 5A en régime permanent

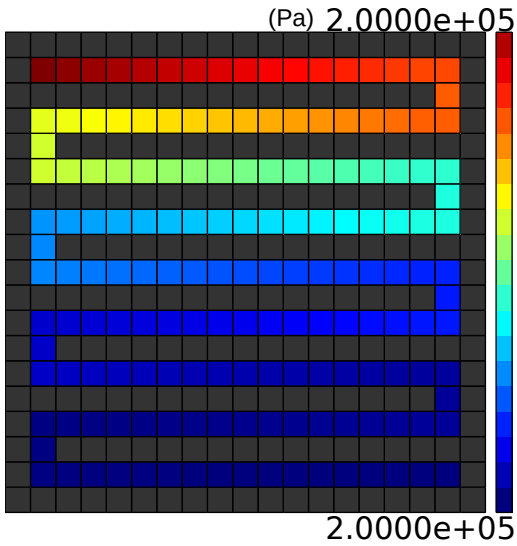


FIGURE 5.2 – Répartition de la pression dans l'anode pour un courant de 5A en régime permanent

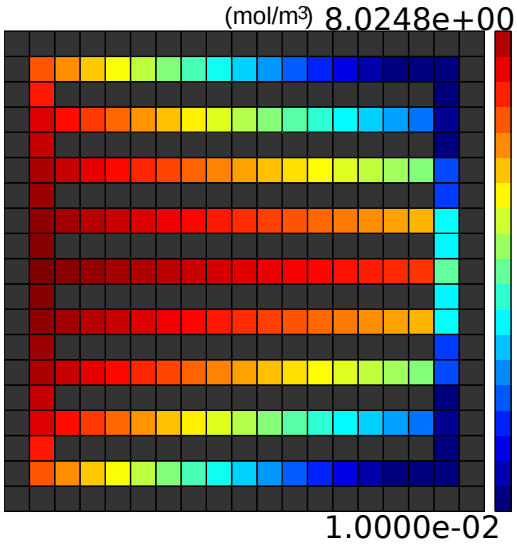


FIGURE 5.3 – Répartition de la densité molaire de O_2 dans les canaux coté cathode pour un courant de 5A en régime permanent

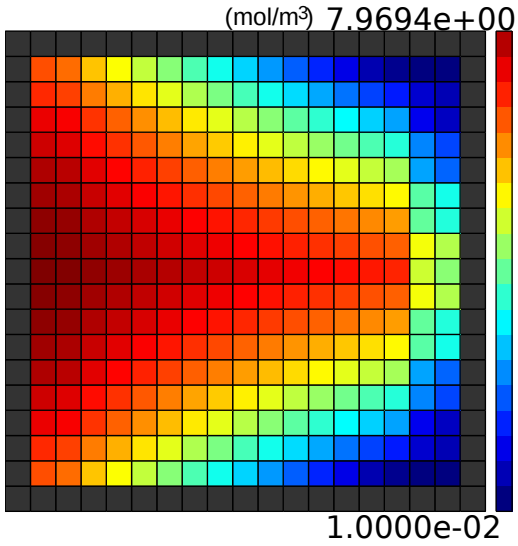


FIGURE 5.4 – Répartition de la densité molaire de O_2 dans la couche catalytique coté cathode pour un courant de 5A en régime permanent

Les figures 5.3 et 5.4 donnent lieu aux observations suivantes :

— $O_3^{fluidic}$: la répartition de l'oxygène dans la couche catalytique suit la répartition de l'oxygène dans les canaux pour les bas courants.

— $O_4^{fluidic}$: la répartition de l'oxygène dans les canaux suit une logique simple de l'appauvrissement en réactifs le long des canaux de l'entrée à la sortie pour les bas courants.

— $O_5^{fluidic}$: l'appauvrissement relatif en oxygène entre l'entrée et la sortie est important ($> 50\%$) pour les bas courants.

— $Hp_2^{fluidic}$: l'appauvrissement relatif en oxygène entre l'entrée et la sortie est conditionné par un ratio entre le débit d'entrée et le courant.

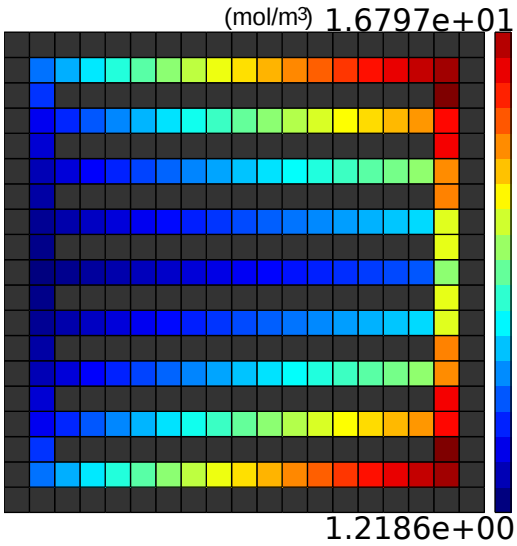


FIGURE 5.5 – Répartition de la densité molaire de H_2O dans les canaux coté cathode pour un courant de 5A en régime permanent

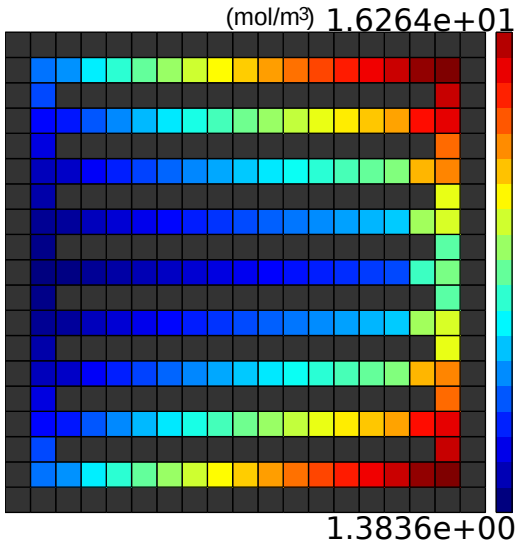


FIGURE 5.6 – Répartition de la densité molaire de H_2O dans la couche catalytique coté cathode pour un courant de 5A en régime permanent

Les figures 5.5 et 5.6 donnent lieu aux observations suivantes :
- $O_6^{fluidic}$: la variation relative en concentration d'eau sur la surface de la cellule suit un schéma inverse à celle de l'oxygène pour les bas courants.
- $O_7^{fluidic}$: la variation relative en concentration d'eau est très importante ($> 90\%$) pour les bas courants.
- $O_8^{fluidic}$: la répartition de l'eau dans la couche catalytique suit la répartition de l'eau dans les canaux pour les bas courants.
- $H_2^{fluidic}$: la répartition des concentrations en eau est directement liée à la répartition des concentrations en oxygène.

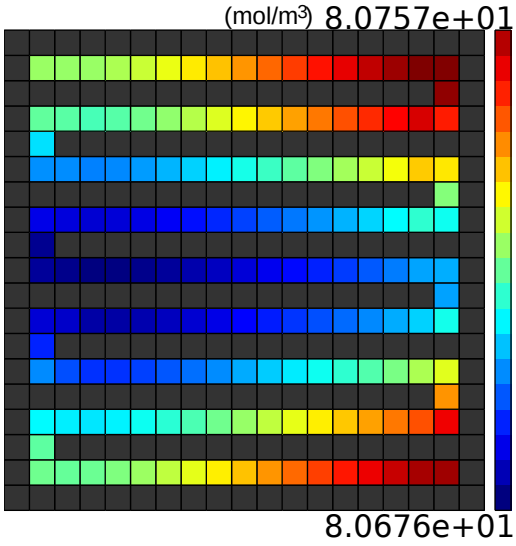


FIGURE 5.7 – Répartition de la densité molaire de H_2 dans les canaux coté anode pour un courant de 5A en régime permanent

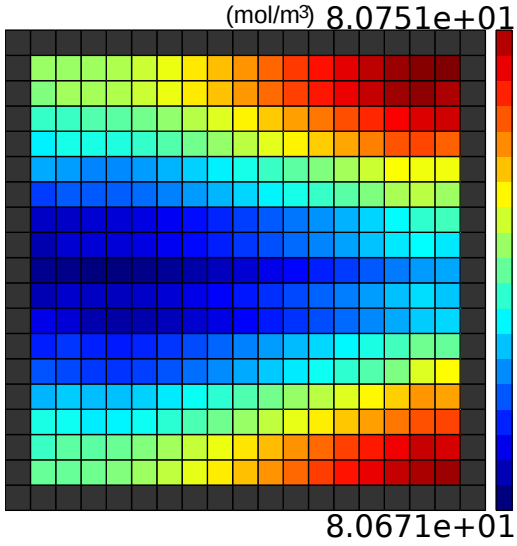


FIGURE 5.8 – Répartition de la densité molaire de H_2 dans la couche catalytique coté anode pour un courant de 5A en régime permanent

Les figures 5.7 et 5.8 donnent lieu aux observations suivantes :
- $O_9^{fluidic}$: la répartition de l'hydrogène dans les canaux suit la répartition de l'hydrogène dans la couche catalytique pour les bas courants.
- $O_{10}^{fluidic}$: la variation relative de densité molaire de l'hydrogène dans la couche catalytique est très faible ($< 1\%$) pour les bas courants.
- $O_{11}^{fluidic}$: la répartition de l'hydrogène dans la couche catalytique est inversée par rapport à la répartition de l'oxygène dans la couche catalytique pour les bas courants.

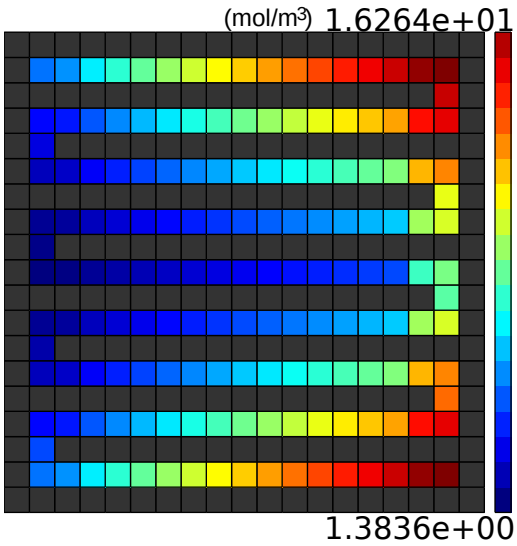


FIGURE 5.9 – Répartition de la densité molaire de H_2O dans les canaux coté anode pour un courant de 5A en régime permanent

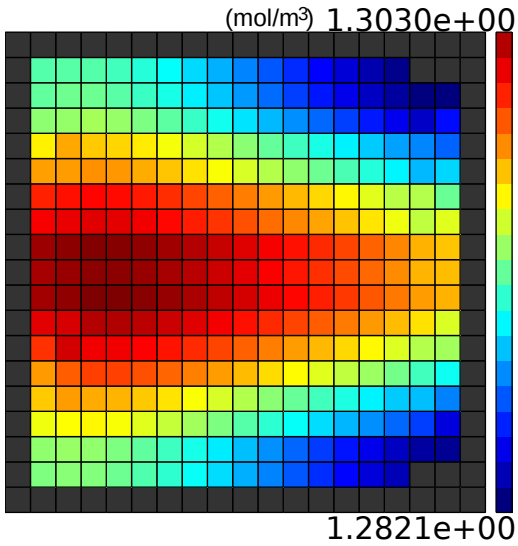


FIGURE 5.10 – Répartition de la densité molaire de H_2O dans la couche catalytique coté anode pour un courant de 5A en régime permanent

Les figures 5.9 et 5.10 donnent lieux aux observations suivantes :

— O_{12} : la répartition de la concentration d'eau suit l'inverse de la répartition de la concentration d'hydrogène dans la couche catalytique pour les bas courants.

— O_{13} : la variation de la concentration en eau ne varie pas beaucoup pour les bas courants.

$O_1^{fluidic}$	les pressions des gaz dans les canaux varient de manière monotone de l'entrée à la sortie.
$O_2^{fluidic}$	les pressions des gaz dans les canaux ont une variation relative très faible ($< 1\%$).
$O_3^{fluidic}$	la répartition de l'oxygène dans la couche catalytique suit la répartition de l'oxygène dans les canaux.
$O_4^{fluidic}$	la répartition de l'oxygène dans les canaux suit une logique simple de l'appauvrissement en réactifs le long des canaux de l'entrée à la sortie .
$O_5^{fluidic}$	l'appauvrissement relatif en oxygène entre l'entrée et la sortie est important ($> 50\%$).
$O_6^{fluidic}$	la variation relative en concentration d'eau sur la surface de la cellule suit un schéma inverse à celle de l'oxygène.
$O_7^{fluidic}$	la variation relative en concentration d'eau est très importante ($> 90\%$).
$O_8^{fluidic}$	la répartition de l'eau dans la couche catalytique suit la répartition de l'eau dans les canaux.
$O_9^{fluidic}$	la répartition de l'hydrogène dans les canaux suit la répartition de l'hydrogène dans la couche catalytique.
$O_{10}^{fluidic}$	la variation relative de l'hydrogène dans la couche catalytique est très faible ($< 1\%$).
$O_{11}^{fluidic}$	la répartition de l'hydrogène dans la couche catalytique est inversée par rapport à la répartition de l'oxygène dans la couche catalytique.
$O_{12}^{fluidic}$	la répartition de la concentration d'eau suit l'inverse de la répartition de la concentration d'hydrogène dans la couche catalytique.
$O_{13}^{fluidic}$	la variation de la concentration en eau dans l'anode ne varie pas beaucoup.
$H_1^{fulidic}$	comme la variation de pression dans les canaux est faible et inversée du coté cathode, on peut émettre l'hypothèse que le phénomène de frottement dans les canaux ne joue pas un rôle prépondérant.
$H_2^{fluidic}$	la répartition des concentrations en eau est directement liée à la répartition des concentrations en oxygène.
$Hp_1^{fluidic}$	c'est un ratio entre le débit de gaz fourni par le compresseur et le courant qui conditionne la variation de la pression dans les canaux du coté cathode et si la distribution de la pression sera croissante ou décroissante.
$Hp_2^{fluidic}$	l'appauvrissement relatif en oxygène entre l'entrée et la sortie est conditionné par un ratio entre le débit d'entrée et le courant.

TABLE 5.1 – Bilan des observations fluidiques pour les bas courants

5.1.1.2 Résultats thermiques

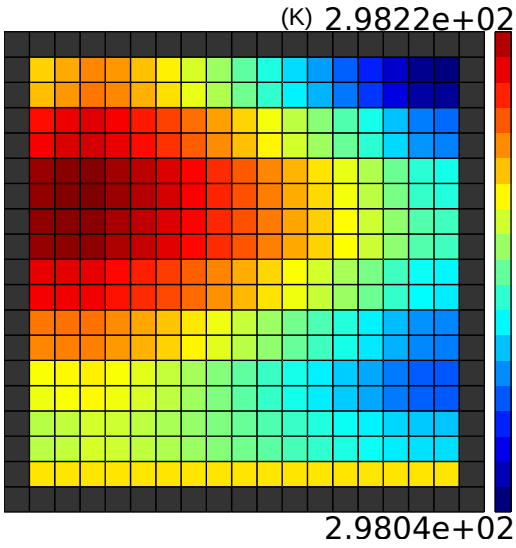


FIGURE 5.11 – Répartition de la température dans le circuit de refroidissement pour un courant de 5A en régime permanent

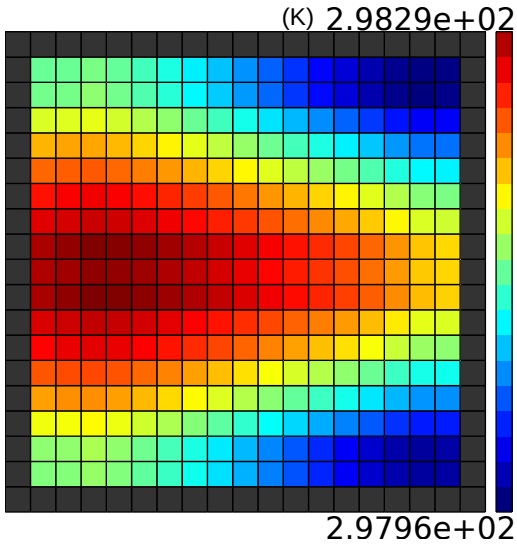


FIGURE 5.12 – Répartition de la température dans la base de la plaque bipolaire coté cathode pour un courant de 5A en régime permanent

Les figures 5.11 et 5.12 donnent lieu aux observations suivantes :

— O_1^{th} : la variation de la température dans le circuit de refroidissement est très faible ($< 1K$) pour les bas courants.

— O_2^{th} : la variation de la température dans la base de la plaque bipolaire coté cathode est très faible ($< 1K$) pour les bas courants.

— O_3^{th} : la répartition de température dans la base de la plaque bipolaire coté cathode est la même que celle de l'oxygène dans la couche catalytique pour les bas courants.

— O_4^{th} : la répartition de la température dans le circuit de refroidissement est la même que celle dans la plaque bipolaire mais translatée d'un vecteur colinéaire à la vitesse du fluide de refroidissement pour les bas courants.

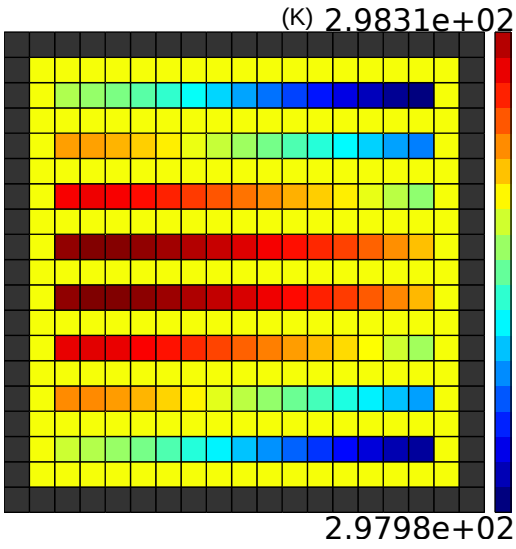


FIGURE 5.13 – Répartition de la température dans les canaux coté cathode pour un courant de 5A en régime permanent

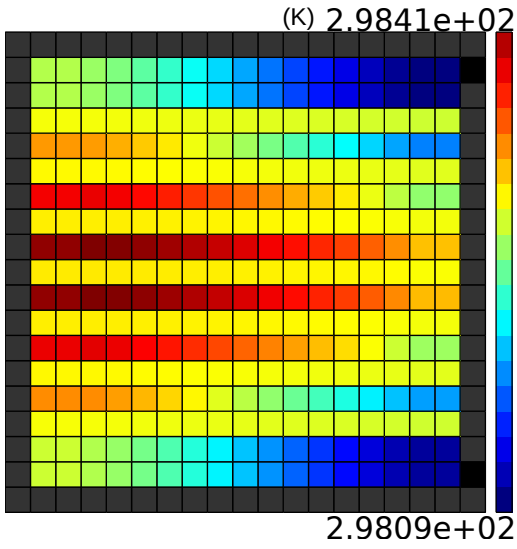


FIGURE 5.14 – Répartition de la température dans la couche catalytique coté cathode pour un courant de 5A en régime permanent

Les figures 5.13 et 5.14 donnent lieu aux observations suivantes :

— O_5^{th} : la variation de la température dans la plaque bipolaire coté cathode est très faible ($< 1K$) pour les bas courants.

— O_6^{th} : la variation de la température dans la couche catalytique coté cathode est très faible ($< 1K$) pour les bas courants.
— H_1^{th} : la répartition de température dans la plaque bipolaire coté cathode est la même que celle de l'oxygène dans la couche catalytique pour les bas courants (si on exclut la température dans les canaux).
— O_7^{th} : la répartition de température dans la couche catalytique coté cathode est la même que celle de l'oxygène dans la couche catalytique pour les bas courants (si on exclut la température au dessus des canaux).
— O_8^{th} : les températures dans la plaque bipolaire et la couche catalytique sont très proches pour les bas courants.

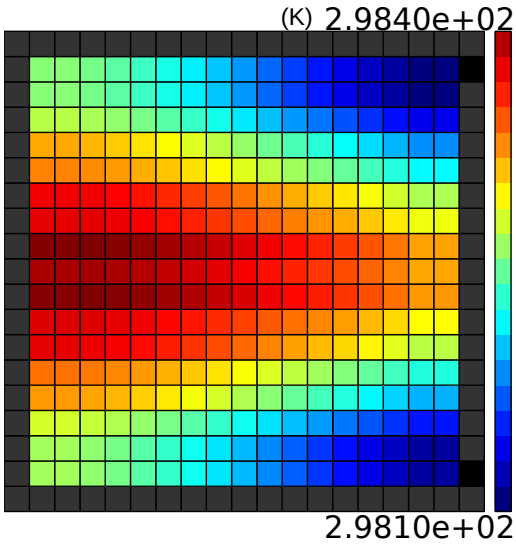


FIGURE 5.15 – Répartition de la température dans la membrane pour un courant de 5A en régime permanent

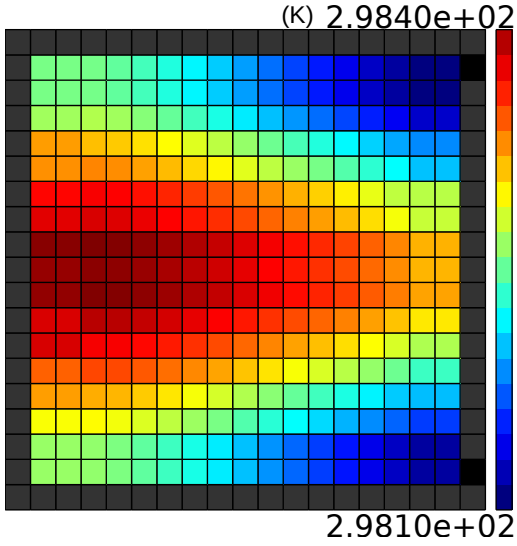


FIGURE 5.16 – Répartition de la température dans la couche catalytique coté anode pour un courant de 5A en régime permanent

Les figures 5.15 et 5.16 donnent lieux aux observations suivantes :
— O_9^{th} : les températures de la couche catalytique de l'anode et de la membrane sont très proches pour les bas courants.
— O_{10}^{th} : la variation de la température dans la couche catalytique coté anode est très faible ($< 1K$) pour les bas courants.
— O_{11}^{th} : la variation de la température dans la membrane coté anode est très faible ($< 1K$) pour les bas courants.

Les figures 5.17 et 5.18 donnent lieux aux observations suivantes :
— O_{12}^{th} : les températures de la plaque bipolaire (partie canaux) de l'anode et de la base de la plaque bipolaire sont très proches pour les bas courants.
— O_{13}^{th} : la variation de la température dans la plaque bipolaire(partie canaux) coté anode est très faible($< 1K$) pour les bas courants.
— O_{14}^{th} : la variation de la température dans la base de la plaque bipolaire coté anode est très faible ($< 1K$) pour les bas courants.

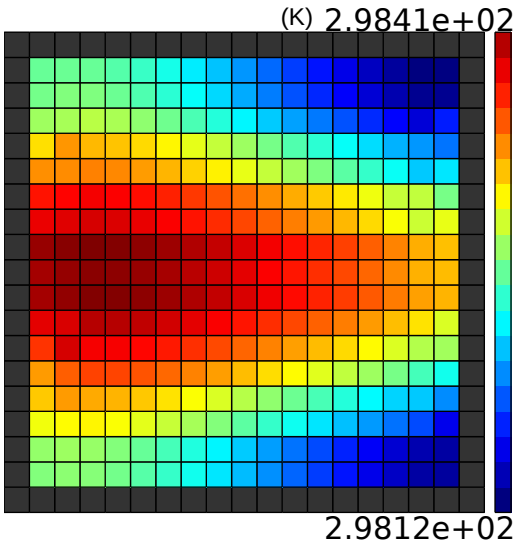


FIGURE 5.17 – Répartition de la température dans les canaux coté anode pour un courant de 5A en régime permanent

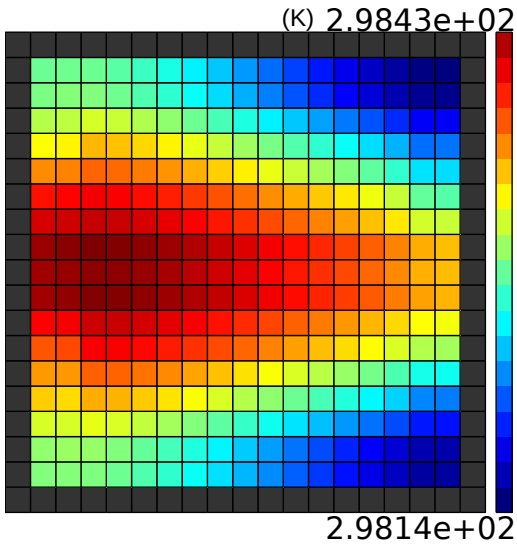


FIGURE 5.18 – Répartition de la température dans la base de la plaque bipolaire coté anode pour un courant de 5A en régime permanent

O_1^{th}	la variation de la température dans le circuit de refroidissement est très faible ($< 1K$).
O_2^{th}	la variation de la température dans la base de la plaque bipolaire coté cathode est très faible ($< 1K$).
O_3^{th}	la répartition de la température dans le circuit de refroidissement est la même que celle dans la plaque bipolaire mais translatée d'un vecteur colinéaire à la vitesse du fluide de refroidissement.
O_4^{th}	la variation de la température dans la plaque bipolaire coté cathode est très faible ($< 1K$).
O_5^{th}	la variation de la température dans la couche catalytique coté cathode est très faible ($< 1K$).
O_6^{th}	la répartition de température dans la plaque bipolaire coté cathode est la même que celle de l'oxygène dans la couche catalytique (si on exclut la température dans les canaux).
O_7^{th}	la répartition de température dans la couche catalytique coté cathode est la même que celle de l'oxygène dans la couche catalytique (si on exclut la température au dessus des canaux).
O_8^{th}	les températures dans la plaque bipolaire et la couche catalytique sont très proches.
O_9^{th}	les températures de la couche catalytique de l'anode et de la membrane sont très proche.
O_{10}^{th}	la variation de la température dans la couche catalytique coté anode est très faible ($< 1K$).
O_{11}^{th}	la variation de la température dans la membrane coté anode est très faible ($< 1K$).
O_{12}^{th}	les températures de la plaque bipolaire (partie canaux) de l'anode et de la base de la plaque bipolaire sont très proche.
O_{13}^{th}	la variation de la température dans la plaque bipolaire (partie canaux) coté anode est très faible ($< 1K$).
O_{14}^{th}	la variation de la température dans la base de la plaque bipolaire coté anode est très faible ($< 1K$).
H_1^{th}	la répartition de température dans la base de la plaque bipolaire coté cathode est la même que celle de l'oxygène dans la couche catalytique.

TABLE 5.2 – Bilan des observations thermiques pour les bas courants

5.1.1.3 Résultats électriques

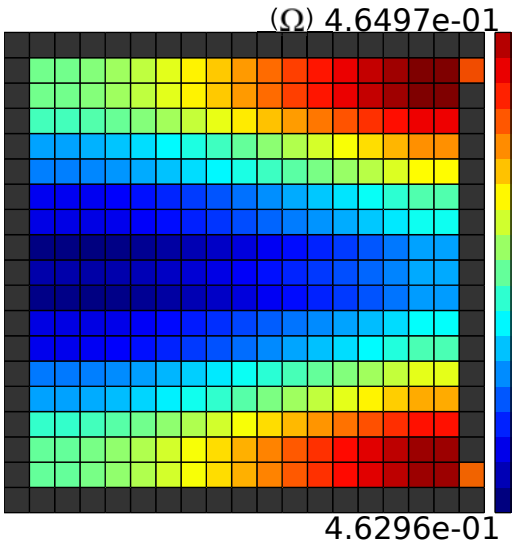


FIGURE 5.19 – Répartition de la résistance de la membrane pour un courant de 5A en régime permanent

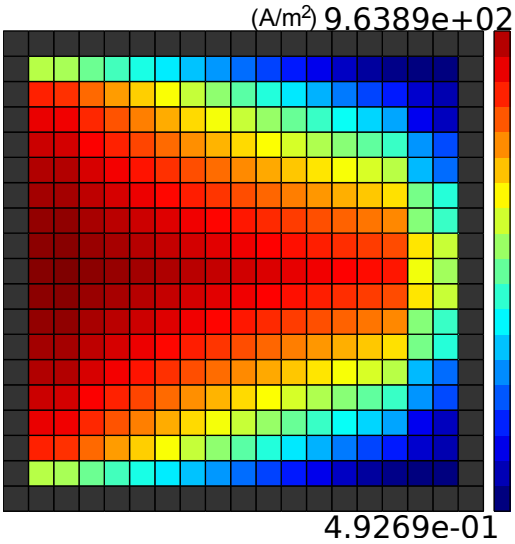


FIGURE 5.20 – Répartition du courant dans la couche catalytique pour un courant de 5A en régime permanent

Les figures 5.19 et 5.20 donnent lieux aux observations suivantes :

— O_1^{elec} : la variation de résistance est très faible ($< 1\%$) sur la surface de la membrane pour les bas courants.

— O_2^{elec} : la variation de densité de courant est très importante sur la surface de la couche catalytique ($> 99.9\%$) pour les bas courants.

— O_3^{elec} : la répartition de résistance de la membrane est l'inverse de celle de la température de la membrane.

— O_4^{elec} : la répartition du courant est la même que celle de la concentration en oxygène pour les bas courants.

5.1.1.4 Analyse intermédiaire

On peut penser que pour les bas courants, tout est conditionné par la répartition de la concentration en oxygène. En effet, les répartitions fluidiques dans les couches catalytiques sont toutes liées à la répartition de concentration de l'oxygène ($O_6^{fluidic} + O_{11}^{fluidic} + O_{12}^{fluidic} + H_2^{fluid}$). Par ailleurs, les répartitions de concentrations des gaz dans les canaux suivent celle des couches catalytiques ($O_3^{fluidic} + O_8^{fluidic} + O_9^{fluidic}$). Ensuite, la répartition du courant est très proche de la répartition de la concentration d'oxygène (O_4^{elec}). La répartition de température quasi constante dans la direction perpendiculaire à la surface de la cellule ($O_3^{th} + O_8^{th} + O_9^{th} + O_{12}^{th}$) ressemble beaucoup à la répartition de concentration de l'oxygène ($O_6^{th} + O_7^{th} + H_1^{th}$). Finalement, la répartition de résistance de la membrane suit celle de sa température (O_3^{elec}).

Les répartitions de températures et de pressions sont négligeables pour de bas courants ($O_2^{fluidic} + O_1^{th} + O_2^{th} + O_4^{th} + O_5^{th} + O_{10}^{th} + O_{11}^{th} + O_{13}^{th} + O_{14}^{th}$) et même la résistance de la membrane a une variation spatiale négligeable (O_1^{elec}). A l'inverse, ce sont les concentrations en réactifs du coté de la cathode qui ont les plus importantes variations ($O_5^{fluidic} + O_7^{fluidic}$). Il semble donc normal que leurs répartitions dominent les autres. La conséquence sur la répartition du courant est très marquée car la variation du courant sur la surface est très importante (O_2^{elec}).

Or, on pense que la répartition des réactifs dans la cathode est liée à un ratio entre le courant et le débit en air à l'entrée de la cathode, ou encore, ce que l'on appelle le débit stœchiométrique ($O_4^{fluidic} + Hp_1^{fluidic} + Hp_2^{fluidic}$). Ainsi, sachant que les pertes par activations (qui dominent l'ensemble des pertes pour les bas courants) sont très liées au courant. On peut penser que l'augmentation du débit de réactifs peut augmenter le potentiel.

On peut émettre les idées que :

— I_1 : une augmentation du ratio débit/courant augmenterait le potentiel de la pile pour les bas courants.

— I_2 : la puissance du refroidissement peut être diminuée.

5.1.2 Courant fort

5.1.2.1 Résultats fluidiques

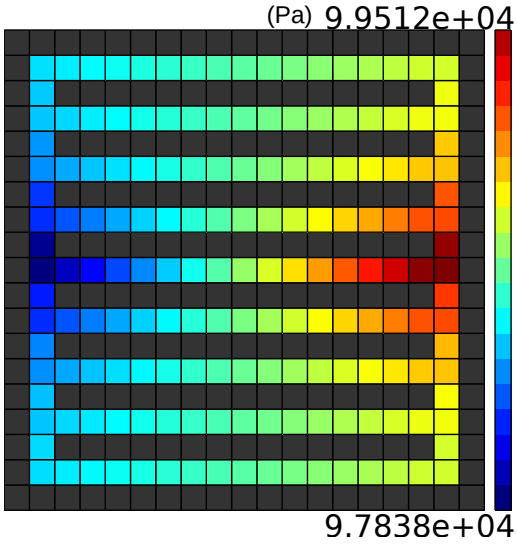


FIGURE 5.21 – Répartition de la pression dans la cathode pour un courant de 40A en régime permanent

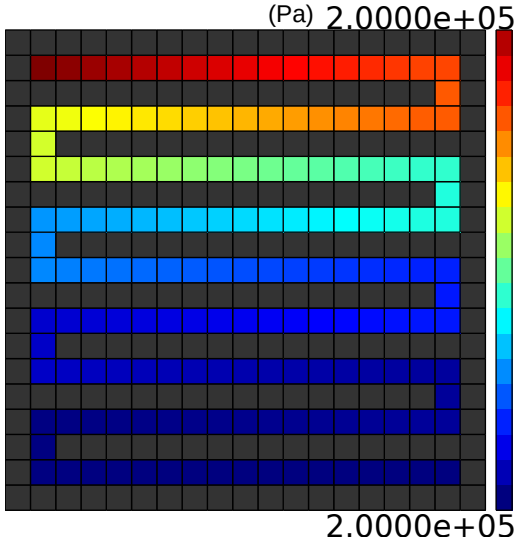


FIGURE 5.22 – Répartition de la pression dans l'anode pour un courant de 40A en régime permanent

Les figures et 5.22 donnent lieu aux observations suivantes :
— $Op_1^{fluidic}$: les pressions dans les canaux croissent ou décroissent monotonement de l'entrée à la sortie.
— $Op_2^{fluidic}$: la variation relative de la pression dans la cathode est faible ($< 2\%$).
— $Op_3^{fluidic}$: la variation de la pression dans l'anode est négligeable.

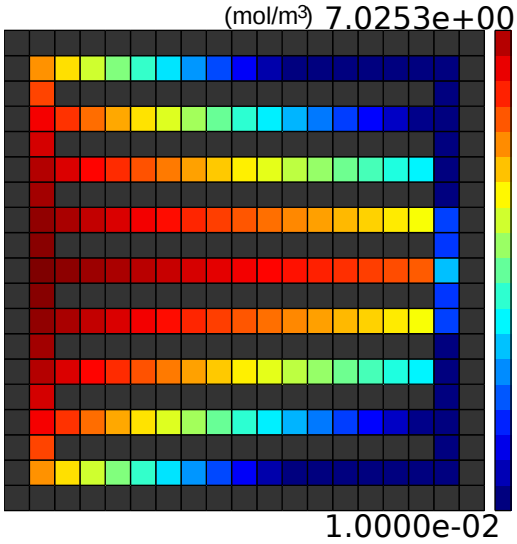


FIGURE 5.23 – Répartition de la densité molaire de O_2 dans les canaux coté cathode pour un courant de 40A en régime permanent

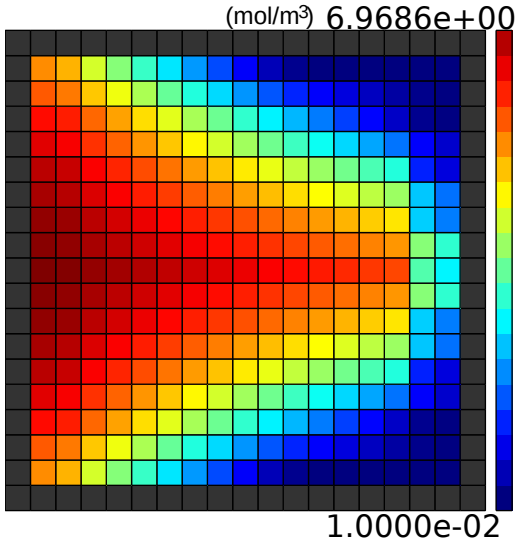


FIGURE 5.24 – Répartition de la densité molaire de O_2 dans la couche catalytique coté cathode pour un courant de 40A en régime permanent

Les figures 5.23 et 5.24 donnent lieu aux observations suivantes :
— $Op_4^{fluidic}$: la répartition de l'oxygène dans la couche catalytique suit la répartition de l'oxygène dans les canaux.
— $Op_5^{fluidic}$: la répartition de l'oxygène dans les canaux suit une logique simple de l'appauvrissement en réactifs le long des canaux de l'entrée à la sortie.
— $Op_6^{fluidic}$: l'appauvrissement relatif en oxygène entre l'entrée et la sortie est très important ($> 80\%$).

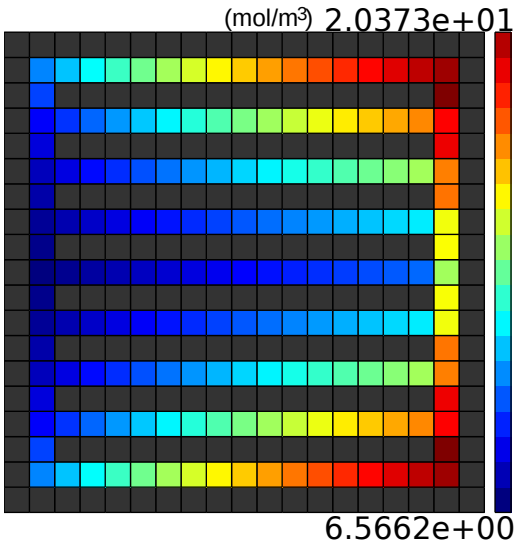


FIGURE 5.25 – Répartition de la densité molaire de H_2O dans les canaux coté cathode pour un courant de 40A en régime permanent

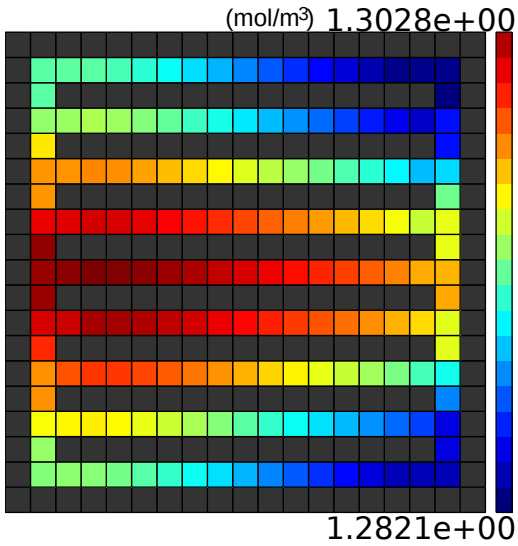


FIGURE 5.26 – Répartition de la densité molaire de H_2O dans la couche catalytique coté cathode pour un courant de 40A en régime permanent

Les figures 5.25 et 5.26 donnent lieu aux observations suivantes :
- $Op_7^{fluidic}$: la répartition en concentration d'eau sur la surface de la couche catalytique dans la cathode suit un shéma proche à celle de l'oxygène.
- $Op_8^{fluidic}$: la variation relative en concentration d'eau est faible dans la couche catalytique ($< 10\%$).
- $Op_9^{fluidic}$: la répartition de l'eau dans la couche catalytique est inversée à la répartition de l'eau dans les canaux.
- $Op_{10}^{fluidic}$: la variation relative en concentration d'eau est importante dans les canaux coté cathode ($> 80\%$).

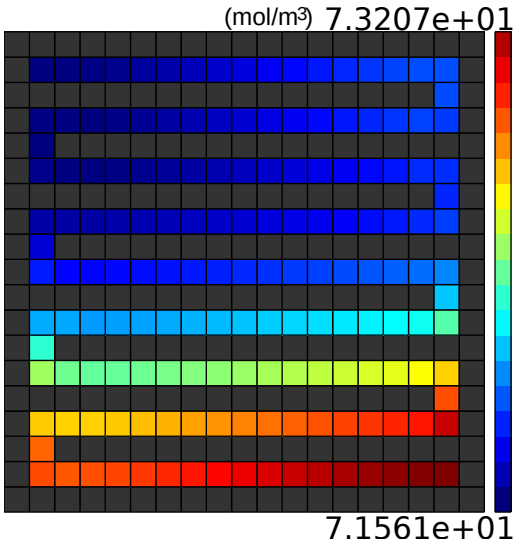


FIGURE 5.27 – Répartition de la densité molaire de H_2 dans les canaux coté anode pour un courant de 40A en régime permanent

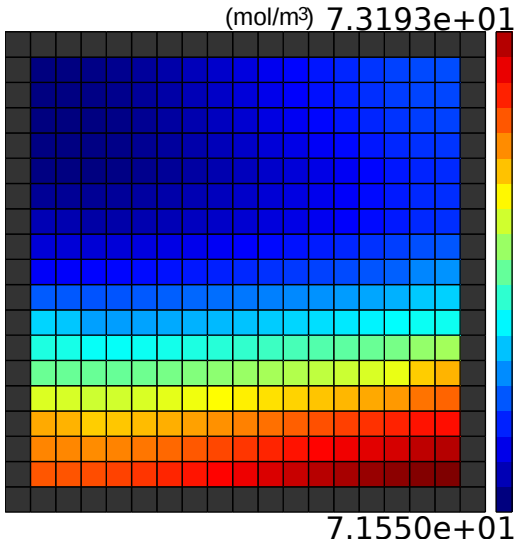


FIGURE 5.28 – Répartition de la densité molaire de H_2 dans la couche catalytique coté anode pour un courant de 40A en régime permanent

Les figures 5.27 et 5.28 donnent lieu aux observations suivantes :
- $Op_{11}^{fluidic}$: la répartition de l'hydrogène dans les canaux suit la répartition de l'hydrogène dans la couche catalytique.
- $Op_{12}^{fluidic}$: la variation relative de l'hydrogène dans la couche catalytique est faible ($< 5\%$).
- $Op_{13}^{fluidic}$: la répartition de l'hydrogène dans les canaux suit les canaux selon un schéma logique de consommation du réactif mais à l'envers (on perçoit cependant une légère influence de la répartition

de la concentration d'oxygène).

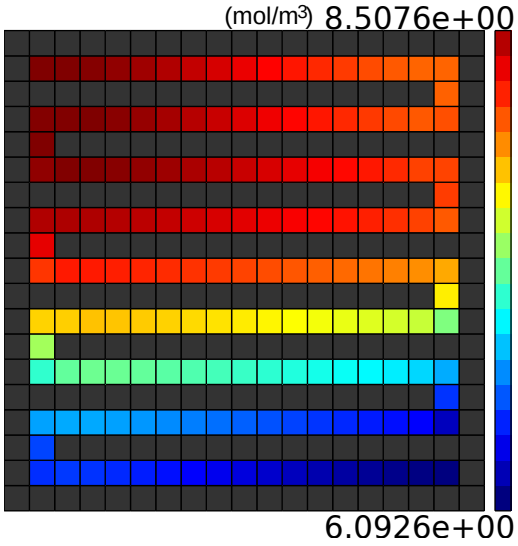


FIGURE 5.29 – Répartition de la densité molaire de H_2O dans les canaux coté anode pour un courant de 40A en régime permanent

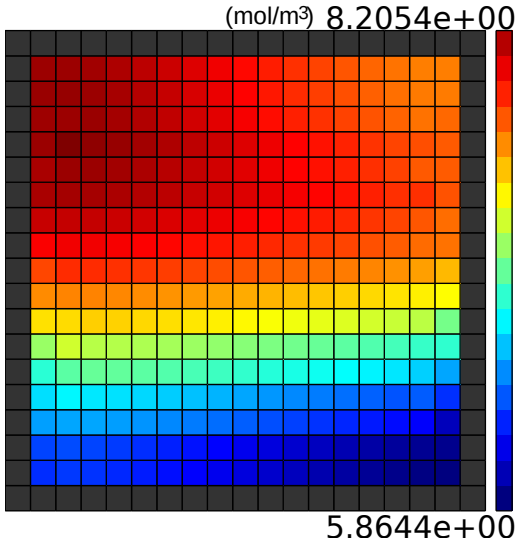


FIGURE 5.30 – Répartition de la densité molaire de H_2O dans la couche catalytique coté anode pour un courant de 40A en régime permanent

Les figures 5.29 et 5.30 donnent lieu aux observations suivantes :
- $Op_{14}^{fluidic}$: la répartition de la concentration d'eau suit l'inverse de la répartition de la concentration d'hydrogène dans la couche catalytique.
- $Op_{15}^{fluidic}$: la variation de la concentration en eau varie moyennement ($\simeq 30\%$).
- $Op_{16}^{fluidic}$: la répartition de la concentration en eau dans l'anode suit celle des canaux.

$Op_1^{fluidic}$	les pressions dans les canaux croissent ou décroissent monotonement de l'entrée à la sortie.
$Op_2^{fluidic}$	la variation relative de la pression dans la cathode est faible ($< 2\%$).
$Op_3^{fluidic}$	la variation de la pression dans l'anode est négligeable.
$Op_4^{fluidic}$	la répartition de l'oxygène dans la couche catalytique suit la répartition de l'oxygène dans les canaux.
$Op_5^{fluidic}$	la répartition de l'oxygène dans les canaux suit une logique simple de l'appauvrissement en réactifs le long des canaux de l'entrée à la sortie.
$Op_6^{fluidic}$	l'appauvrissement relatif en oxygène entre l'entrée et la sortie est très important ($> 80\%$).
$Op_7^{fluidic}$	la répartition en concentration d'eau sur la surface de la couche catalytique dans la cathode suit un schéma proche à celle de l'oxygène.
$Op_8^{fluidic}$	la variation relative en concentration d'eau est faible dans la couche catalytique ($< 10\%$).
$Op_9^{fluidic}$	la répartition de l'eau dans la couche catalytique est inversée à la répartition de l'eau dans les canaux.
$Op_{10}^{fluidic}$	la variation relative en concentration d'eau est importante dans les canaux coté cathode ($> 80\%$).
$Op_{11}^{fluidic}$	la répartition de l'hydrogène dans les canaux suit la répartition de l'hydrogène dans la couche catalytique.
$Op_{12}^{fluidic}$	la variation relative de l'hydrogène dans la couche catalytique est faible ($< 5\%$).
$Op_{13}^{fluidic}$	la répartition de l'hydrogène dans les canaux suit les canaux selon un schéma logique de consommation du réactif mais à l'envers (on perçoit cependant une légère influence de la répartition de la densité d'oxygène).
$Op_{14}^{fluidic}$	la répartition de la concentration d'eau suit l'inverse de la répartition de la concentration d'hydrogène dans la couche catalytique.
$Op_{15}^{fluidic}$	la variation de la concentration en eau varie moyennement ($\simeq 30\%$).
$Op_{16}^{fluidic}$	la répartition de la concentration en eau dans l'anode suit celle des canaux.

TABLE 5.3 – Bilan des observations fluidiques pour les hauts courants

5.1.2.2 Résultats thermiques

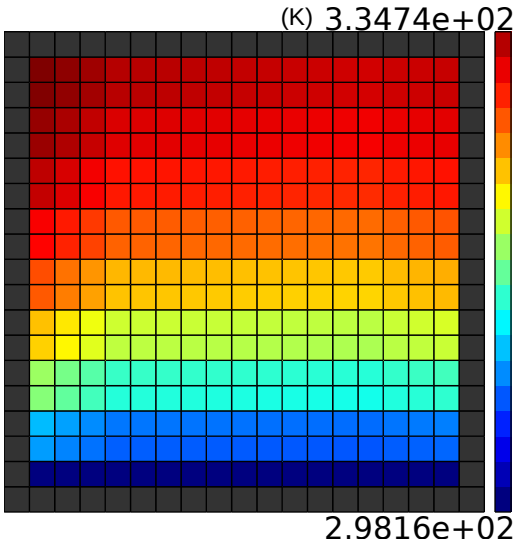


FIGURE 5.31 – Répartition de la température dans les circuits de refroidissement pour un courant de 40A en régime permanent

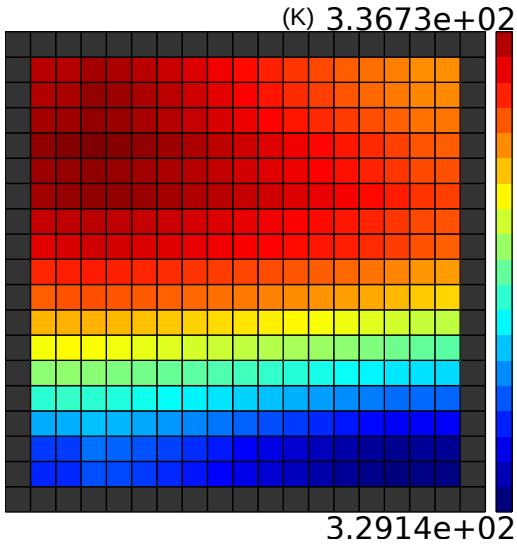


FIGURE 5.32 – Répartition de la température dans la base de la plaque bipolaire coté cathode pour un courant de 40A en régime permanent

Les figures 5.31 et 5.32 donnent lieu aux observations suivantes :
- Op_1^{th} : la variation de température dans le circuit de refroidissement est importante ($> 30\%$).
- Op_2^{th} : la variation de température dans la base de la plaque bipolaire coté cathode n'est pas très importante ($\simeq 3\%$).
- Op_3^{th} : la répartition de la température dans le circuit de refroidissement du plus froid au plus chaud suit la vitesse des fluides de refroidissements, ce qui donne un gradient de température vertical de bas en haut.
- Op_4^{th} : la répartition de température dans la base de la plaque bipolaire coté cathode semble être un mixte de la répartition de concentration en oxygène dans la cathode et de la répartition de température du circuit de refroidissement. Le circuit de refroidissement semble dominer.

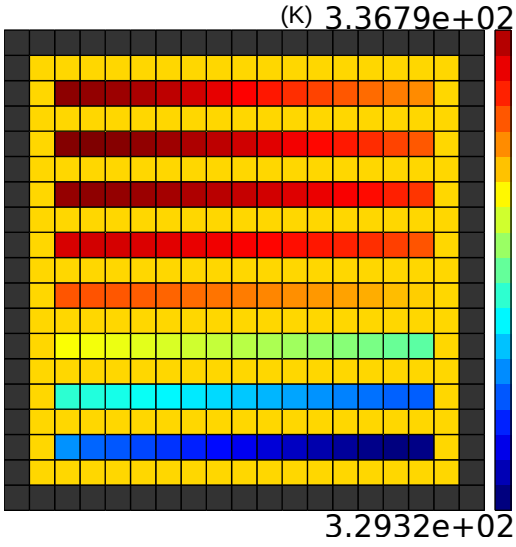


FIGURE 5.33 – Répartition de la température dans les canaux coté cathode pour un courant de 40A en régime permanent

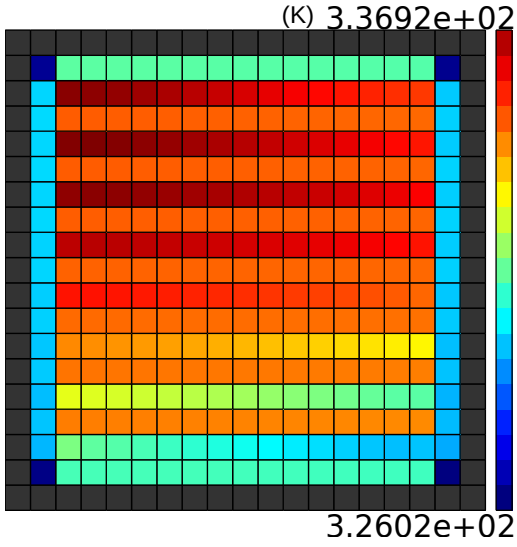


FIGURE 5.34 – Répartition de la température dans la couche catalytique coté cathode pour un courant de 40A en régime permanent

Les figures 5.33 et 5.34 donnent lieu aux observations suivantes :
- Op_5^{th} : la variation de température dans la couche des canaux du coté cathode et la couche catalytique n'est pas très importante ($\simeq 3\%$).

— Op_6^{th} : la répartition de température de la couche des canaux et de la couche catalytique coté cathode semble être un mixte entre la répartition de température du système de refroidissement et de la concentration en oxygène coté cathode. Dans cette répartition ci, la répartition se rapproche plus de la répartition de la concentration en oxygène.
— R_1 : on remarque que la température des bords dans la couche catalytique est plus basse. Ce sont des effets de bords liés aux hypothèses des conditions aux limites et à des erreurs d'intégrations inter-mailles.

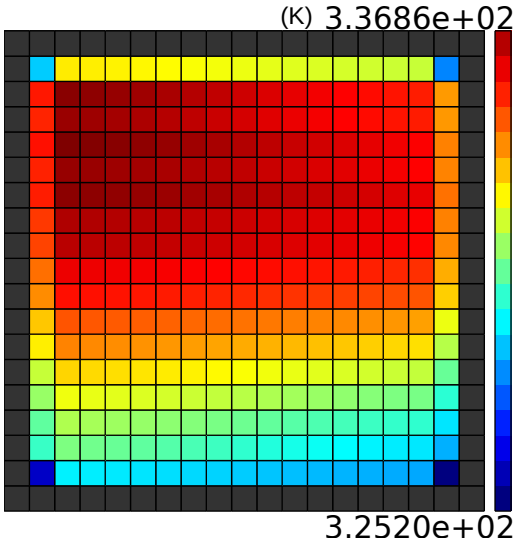


FIGURE 5.35 – Répartition de la température dans la membrane pour un courant de 40A en régime permanent

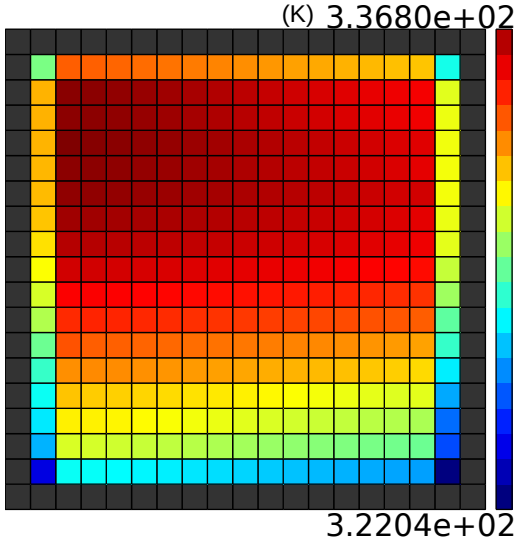


FIGURE 5.36 – Répartition de la température dans la couche catalytique coté anode pour un courant de 40A en régime permanent

Les figures 5.35 et 5.36 donnent lieu aux observations suivantes :
— Op_7^{th} : la répartition de température de la membrane suit celle de la couche catalytique coté cathode en négligeant les canaux.
— Op_8^{th} : la répartition de température de la couche catalytique coté anode suit celle de la membrane.

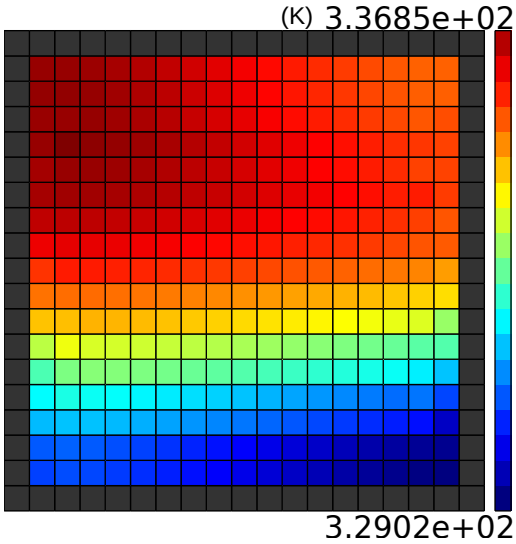


FIGURE 5.37 – Répartition de la température dans les canaux coté anode pour un courant de 40A en régime permanent

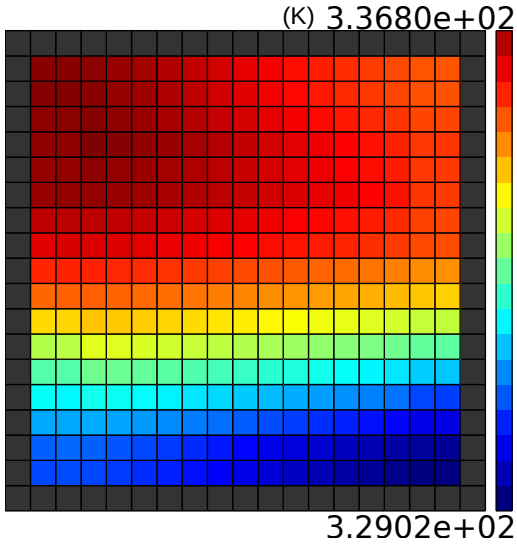


FIGURE 5.38 – Répartition de la température dans la base de la plaque bipolaire coté anode pour un courant de 40A en régime permanent

Les figures 5.37 et 5.38 donnent lieu aux observations suivantes :
— Op_9^{th} : les répartitions de températures de la couche des canaux coté anode et de la base de la plaque bipolaire coté anode sont proches à la différence près que celles de la base de la plaque bipolaire

s'approchent plus de celles du circuit de refroidissement.

Op_1^{th}	la variation de température dans le circuit de refroidissement est importante ($> 30\%$).
Op_2^{th}	la variation de température dans la base de la plaque bipolaire coté cathode n'est pas très importante ($\simeq 3\%$).
Op_3^{th}	la répartition de la température dans le circuit de refroidissement du plus froid au plus chaud suit la vitesse des fluides de refroidissements, ce qui donne un gradient de température vertical de bas en haut.
Op_4^{th}	la répartition de température dans la base de la plaque bipolaire coté cathode semble être un mixte de la répartition de concentration en oxygène dans la cathode et de la répartition de température du circuit de refroidissement. Le circuit de refroidissement semble dominer.
Op_5^{th}	la variation de température dans la couche des canaux du coté cathode et la couche catalytique n'est pas très importante ($\simeq 3\%$).
Op_6^{15}	la répartition de température de la couche des canaux et de la couche catalytique coté cathode semble être un mixte entre la répartition de température du système de refroidissement et de la concentration en oxygène coté cathode. Dans cette répartition ci, la répartition se rapproche plus de la répartition de la concentration en oxygène.
Op_7^{th}	la répartition de température de la membrane suit celle de la couche catalytique coté cathode en négligeant les canaux.
Op_8^{th}	la répartition de température de la couche catalytique coté anode suit celle de la membrane.
Op_9^{th}	les répartitions de températures de la couche des canaux coté anode et de la base de la plaque bipolaire coté anode sont proches à la différence près que celles de la base de la plaque bipolaire s'approchent plus de celle du circuit de refroidissement.

TABLE 5.4 – Bilan des observations thermiques pour les hauts courants

5.1.2.3 Résultats électriques

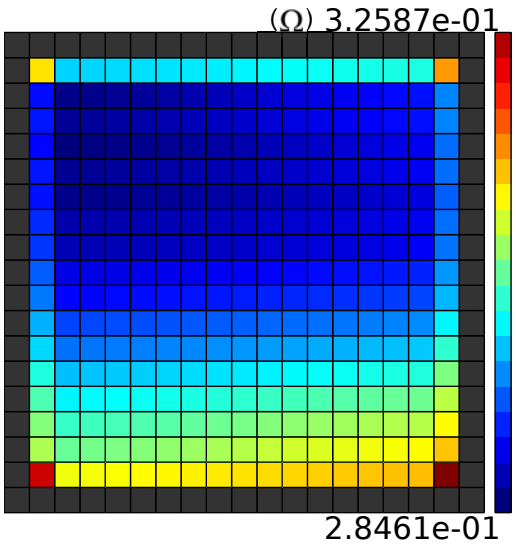


FIGURE 5.39 – Répartition de la résistance de la membrane pour un courant de 40 A dans un régime permanent

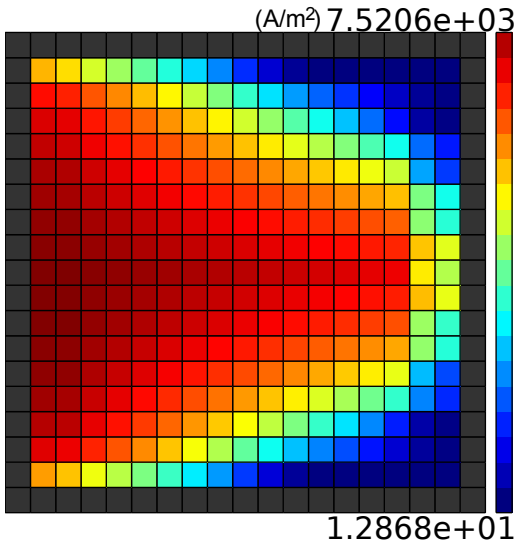


FIGURE 5.40 – Répartition du courant dans la couche catalytique pour un courant de 40A en régime permanent

Les figures 5.39 et 5.40 donnent lieu aux observations suivantes :
— Op_1^{elec} : la répartition des résistances semble être dominée par la répartition de température de la membrane.
— Op_2^{elec} : la répartition de courant est dominée par la répartition de concentration en oxygène dans la cathode.
— Op_3^{elec} : la variation de la résistance de la membrane est moyenne ($\simeq 10\%$).

— Op_4^{elec} : la variation de la densité de courant est énorme ($\simeq 99\%$).

5.1.3 Analyse intermédiaire

Avant tout, faisons le bilan des invariants :
— $O_1^{fluidic} + Op_1^{fluidic} + O_2^{fluidic} + Op_2^{fluidic} + Op_3^{fluidic}$: les pressions sont monotones et leurs répartitions restent les même. Ces variations des pressions sont faibles pour tous courants bien qu'elles augmentent significativement avec le courant du coté cathode.
— $O_3^{fluidic} + Op_4^{fluidic} + O_4^{fluidic} + Op_5^{fluidic} + O_5^{fluidic} + Op_6^{fluidic}$: la répartition de l'oxygène est la même dans les canaux et dans la couche catalytique et suit une logique de consommation de l'oxygène au long des canaux. La variation de cette concentration est importante et augmente avec le courant.
— $O_9^{fluidic} + Op_{11}^{fluidic} + O_{10}^{fluidic} + Op_{12}^{fluidic} + O_{12}^{fluidic} + Op_{14}^{fluidic}$: la répartition de l'hydrogène dans les canaux suit la répartition de l'hydrogène dans la couche catalytique. Cette répartition est l'inverse de celle de l'eau dans l'anode.
— $O_2^{elec} + O_4^{elec} + Op_2^{elec} + Op_4^{elec}$: la répartition de la densité de courant suit toujours la répartition de concentration en oxygène dans la couche catalytique et sa variation spatiale relative est très importante.
— $O_3^{elec} + Op_1^{elec}$: la répartition de la résistance de la membrane est liée à sa température. Mais est-ce la température qui influence la résistance de la membrane ou la résistance de la membrane qui influence sa température (voir formules physiques du chapitre 1) ? Ainsi on peut construire l'idée :
  — I_2 : en diminuant l'humidité à l'entrée de l'anode on pourrait changer la répartition de résistance dans la membrane.
— $O_7^{th} + O_8^{th} + O_9^{th} + O_{12}^{th} + Op_7^{th} + Op_8^{th}$: la variation de température dans le plan de la cellule reste supérieure à la variation de température dans la direction perpendiculaire à ce plan.

Ce qui change :
— $O_6^{fluidic} + O_7^{fluidic} + O_8^{fluidic} \neq Op_7^{fluidic} + Op_8^{fluidic} + Op_9^{fluidic}$: il se produit un changement de répartition de l'eau dans la cathode lorsque le courant devient haut. La répartition de la concentration d'eau dans la couche catalytique ne sera plus la même que dans les canaux. Inversement, la répartition de l'eau dans la couche catalytique ressemblera d'avantage à celle de l'oxygène. Par ailleurs, la variation relative de concentration en eau dans la couche catalytique sera bien plus faible. On peut penser qu'il y a une accumulation d'eau au niveau de la couche catalytique.
— $O_1^{elec} + Op_3^{elec}$: la variation de la résistance de la membrane arrête d'être négligeable pour de hauts courants.
— $O_1^{th} + O_2^{th} + O_3^{th} + O_4^{th} + O_5^{th} + O_6^{th} + O_{10}^{th} + O_{11}^{th} + O_{13}^{th} \neq Op_1^{th} + Op_2^{th} + Op_3^{th} + Op_4^{th} + Op_5^{th} + Op_9^{th}$: On passe de répartitions de température proches de la répartition de l'oxygène dans la couche catalytique et presque constantes dans la direction transversale à une autre répartition de température pour les hauts courants. La répartition de température dans le circuit de refroidissement suit le flux des fluides de refroidissement et tend en se rapprochant de la membrane à être influencée par la répartition de la concentration en oxygène. Les variations de températures sur la surface de la cellule deviennent bien plus importantes qu'avant.

I_1	Une augmentation du ratio débit/courant augmenterait grandement le potentiel de la pile pour les bas courants.
I_2	Le refroidissement peut être diminué pour les bas courants.
$I_1 + I_2 = I_3$	La conception d'une pile à combustible doit pourrait être adaptée suivant qu'elle fonctionne à haut ou bas courant.
I_4	Un refroidissement qui suit les canaux d'alimentation en oxygène pour uniformiser la température
I_5	Un système d'alimentation en oxygène avec plusieurs entrées opposées.

TABLE 5.5 – Bilan des observations

5.2 Évolution des grandeurs

Les évolutions statiques sont présentées de 5A à 40A en passant par 25A. Les évolutions dynamiques commencent par une répartition statique à 5A, donnent une vue intermédiaire interprétable de l'évolution pendant la stabilisation suite à l'échelon vers 40A et la troisième figure donne la stabilisation à 40 A. Pour une vraie vision de l'évolution des grandeurs, les échelles de couleurs des trois sous figures sont uniformisées.

5.2.1 Évolution de la fluidique en fonction du courant

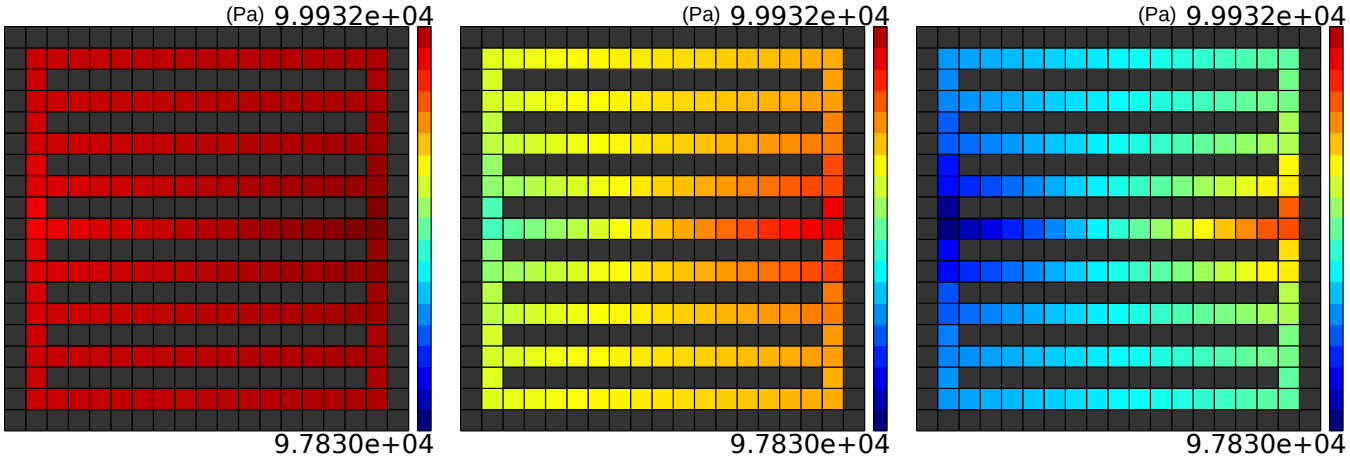


FIGURE 5.41 – Évolution de la répartition de pression dans les canaux coté cathode en fonction du courant (du plus bas (5A) au plus haut (40A))

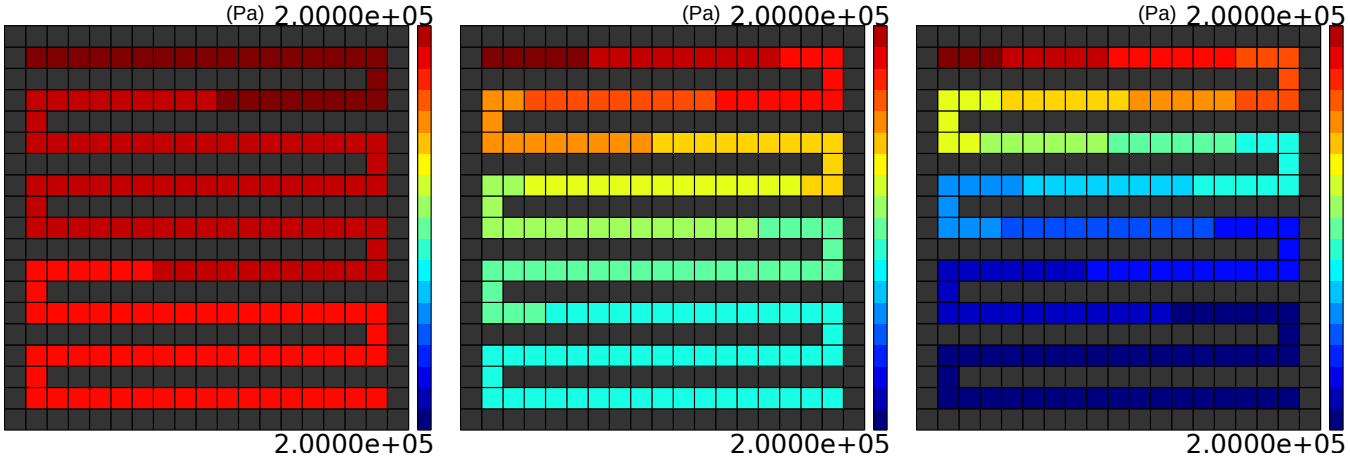


FIGURE 5.42 – Évolution de la répartition de pression dans les canaux coté anode en fonction du courant (du plus bas (5A) au plus haut (40A))

Les figures 5.41 et 5.42 donnent lieu aux observations suivantes :

— $Ot_1^{fluidique}$: On voit que les écarts de pressions entre l'entrée et la sortie augmentent quand le courant augmente (c'est sûrement par ce que le débit fourni par le compresseur augmente aussi).

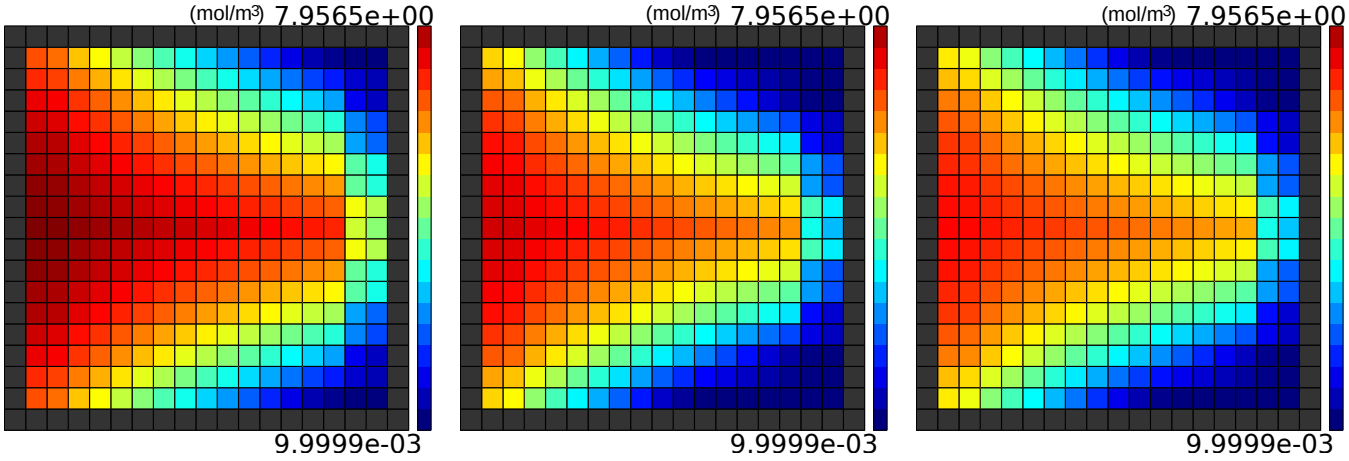


FIGURE 5.43 – Évolution de la répartition de densité molaire de O_2 dans la couche catalytique en fonction du courant (du plus bas (5A) au plus haut (40A))

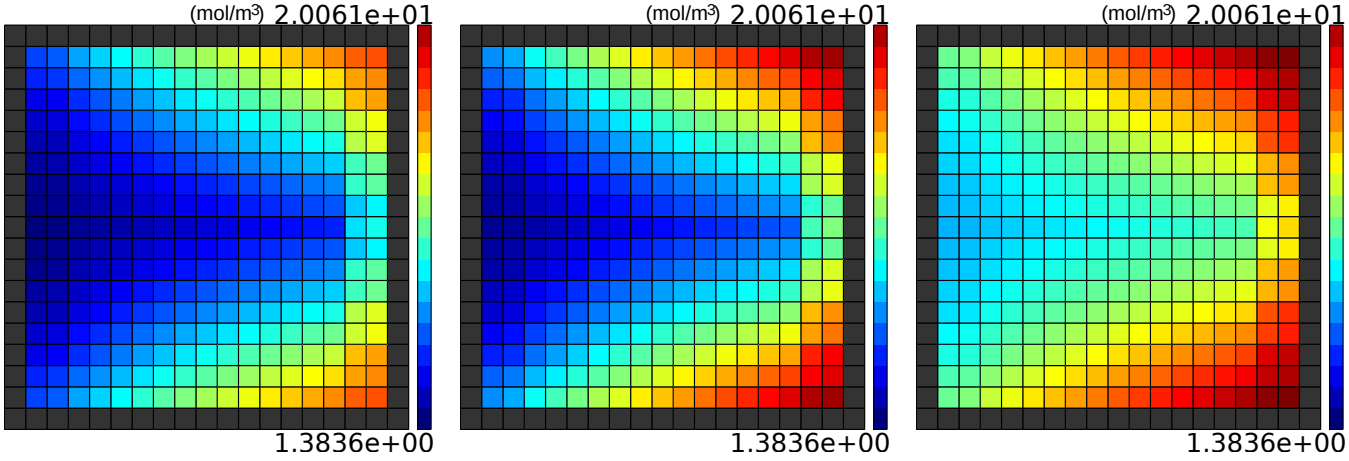


FIGURE 5.44 – Évolution de la répartition de densité molaire de H_2O dans la couche catalytique coté cathode en fonction du courant (du plus bas (5A) au plus haut (40A))

Les figures 5.43 et 5.44 donnent lieu aux observations suivantes :

— $Ot_2^{fluidique}$: La répartition de l'oxygène ne change pas beaucoup en fonction du courant (pour un compresseur qui envoie un flux d'air adapté en fonction du courant).

— $Ot_3^{fluidique}$: La répartition de l'eau semble être bien gérée jusqu'à atteindre les hauts courants où le phénomène d'accumulation d'eau se produit.

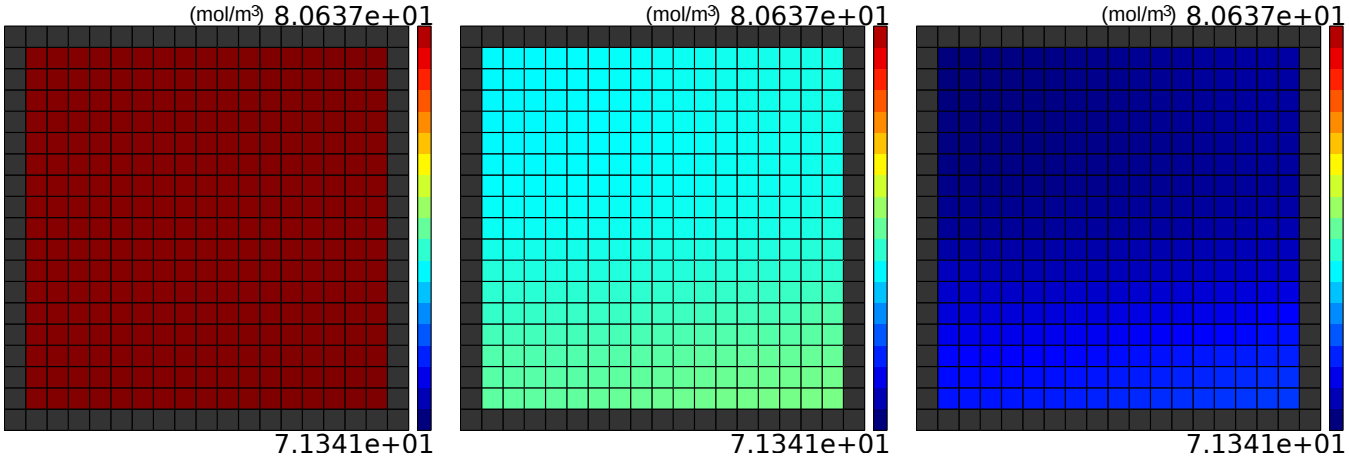


FIGURE 5.45 – Évolution de la répartition de densité molaire de H_2 dans la couche catalytique en fonction du courant (du plus bas (5A) au plus haut (40A))

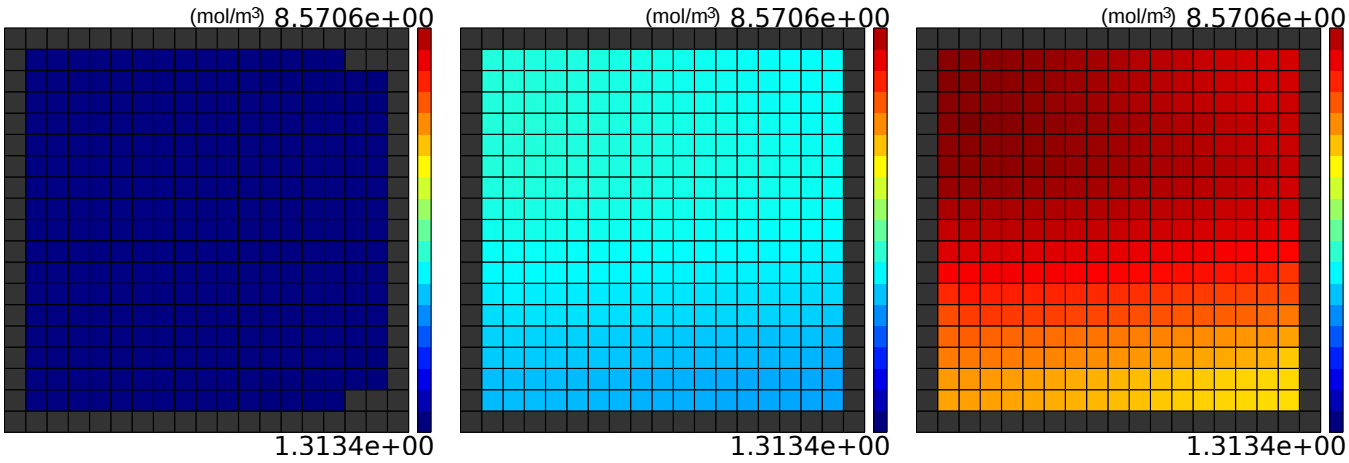


FIGURE 5.46 – Évolution de la répartition de densité molaire de H_2O dans la couche catalytique coté anode en fonction du courant (du plus bas (5A) au plus haut (40A))

Les figures 5.45 et 5.46 donnent lieu aux observations suivantes :
— $Ot_4^{fluidique}$: On voit que la concentration en hydrogène diminue quand le courant augmente.
— $Ot_5^{fluidique}$: La variation de la concentration d'hydrogène sur la surface est négligeable comparée à la variation en fonction du courant et augmente avec le courant.
— $Ot_6^{fluidique}$: La concentration en eau augmente en fonction du courant.
— $Ot_7^{fluidique}$: La variation de la concentration d'eau sur la surface est négligeable comparée à la variation en fonction du courant et augmente avec le courant.

5.2.2 Évolution de la thermique

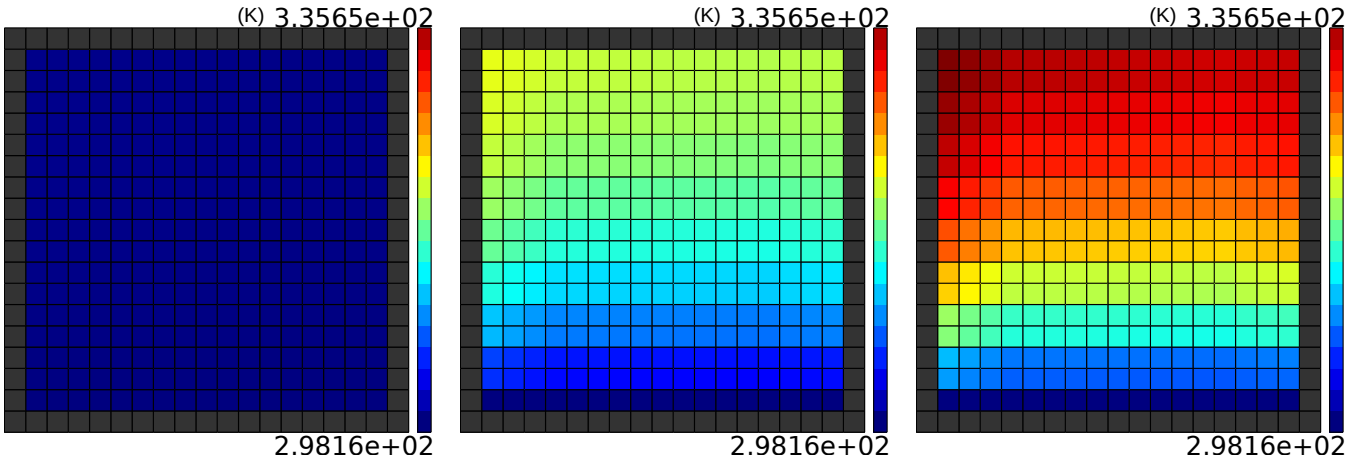


FIGURE 5.47 – Évolution de la répartition de température dans le circuit de refroidissement en fonction du courant (du plus bas (5A) au plus haut (40A))

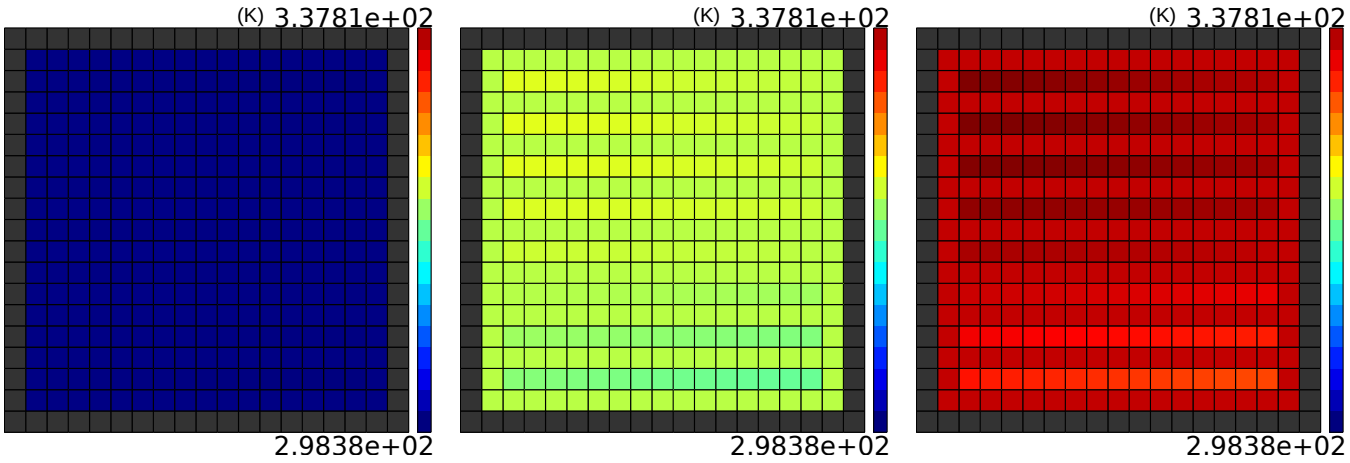


FIGURE 5.48 – Évolution de la répartition de température dans les canaux coté cathode en fonction du courant (du plus bas (5A) au plus haut (40A))

Les figures 5.47 et 5.48 donnent lieu aux observations suivantes :

— $Ot_1^{thermique}$: la répartition de la température dans le circuit de refroidissement est uniforme pour un courant faible et un gradient apparaît et s'étend avec des températures extrêmes de plus en plus élevées avec le courant.

— $Ot_2^{thermique}$: la température de la couche des canaux coté cathode augmente avec le courant.

— $Ot_3^{thermique}$: la variation de la température sur la surface de la couche des canaux coté cathode est négligeable devant sa variation par rapport au courant et elle augmente avec le courant.

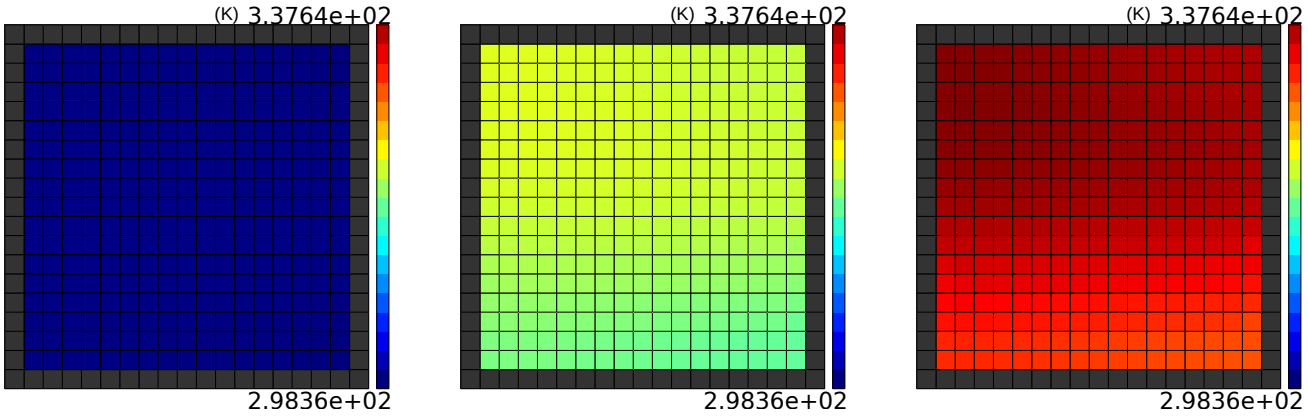


FIGURE 5.49 – Évolution de la répartition de température dans les canaux coté anode en fonction du courant (du plus bas (5A) au plus haut (40A))

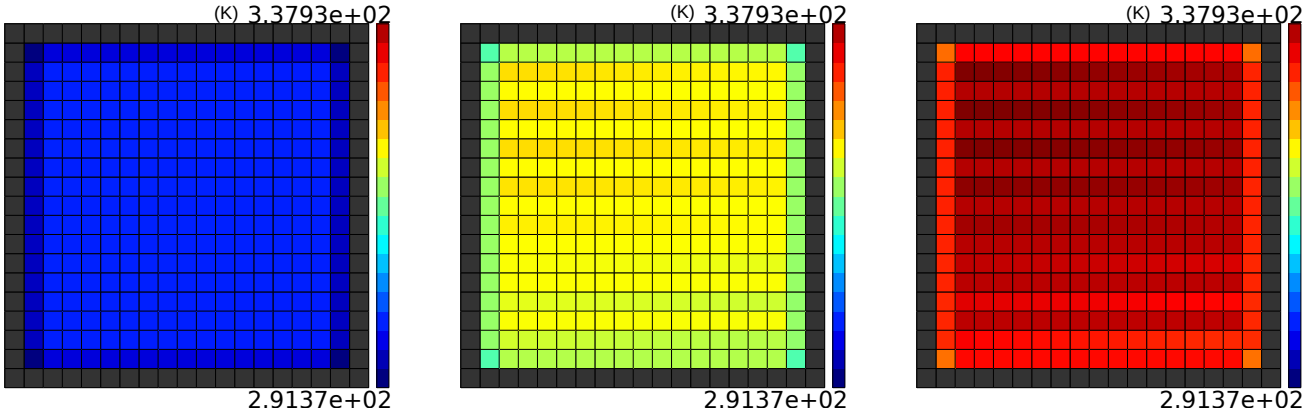


FIGURE 5.50 – Évolution de la répartition de température dans la couche catalytique coté cathode en fonction du courant (du plus bas (5A) au plus haut (40A))

Les figures 5.49 et 5.50 donnent lieu aux observations suivantes :

— $Ot_4^{thermique}$: la température de la couche des canaux du coté anode a les mêmes propriétés en fonction du courant que la température de la couche des canaux du coté cathode.

— $Ot_5^{thermique}$: la température de la couche catalytique coté cathode a les mêmes propriétés en fonction du courant que la température de la couche des canaux du coté cathode.

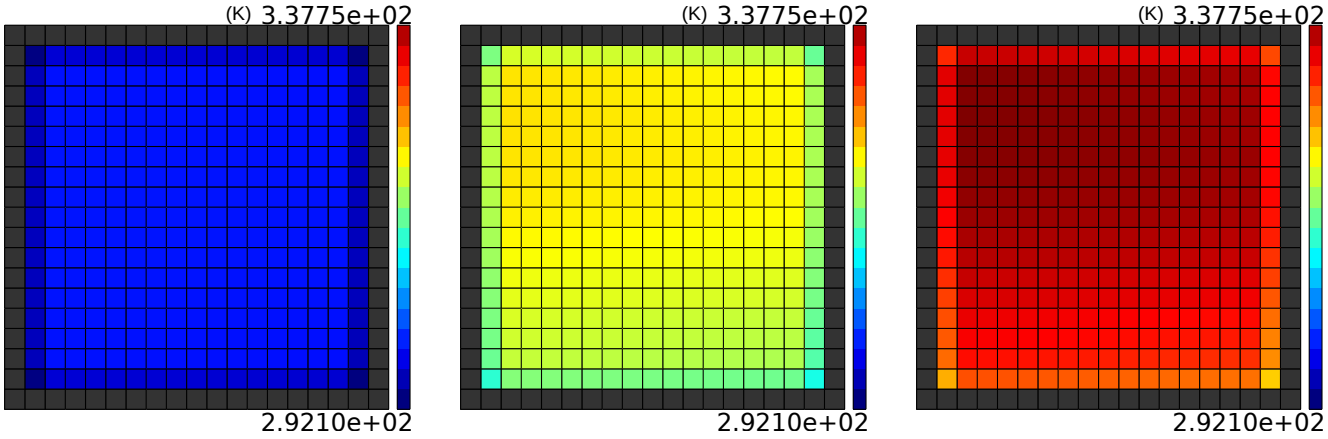


FIGURE 5.51 – Évolution de la répartition de température dans la couche catalytique coté anode en fonction du courant (du plus bas (5A) au plus haut (40A))

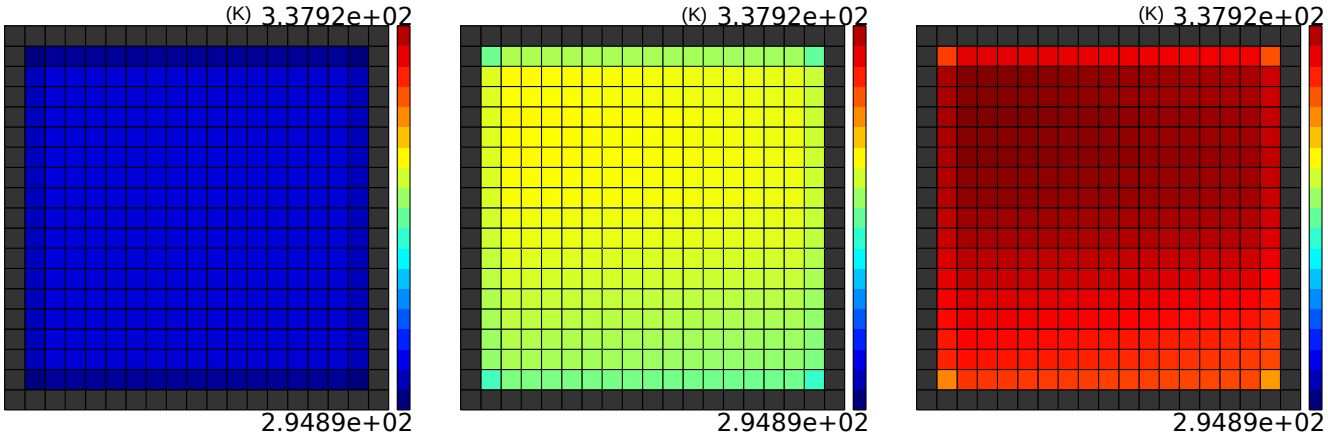


FIGURE 5.52 – Évolution de la répartition de température dans la membrane en fonction du courant (du plus bas (5A) au plus haut (40A))

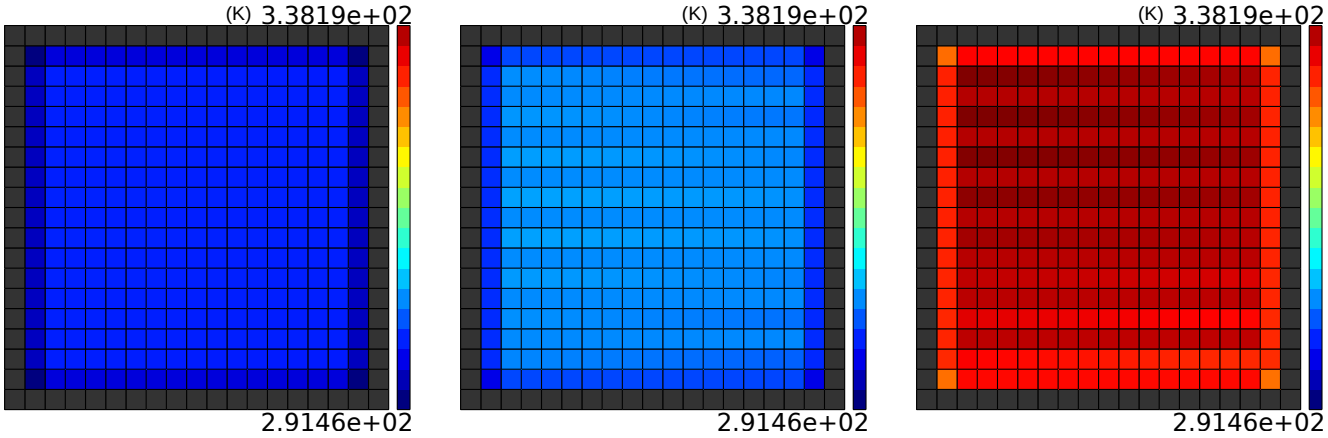


FIGURE 5.53 – Évolution de la répartition de température dans la couche catalytique coté cathode pendant le régime transitoire qui suit un échelon de courant (du moment de l'échelon au régime permanent)

Les figures 5.52, 5.53 et 5.51 donnent lieu à l'observation suivante :
— $Ot_6^{thermique}$: On retrouve encore les mêmes propriétés que pour les autres températures.

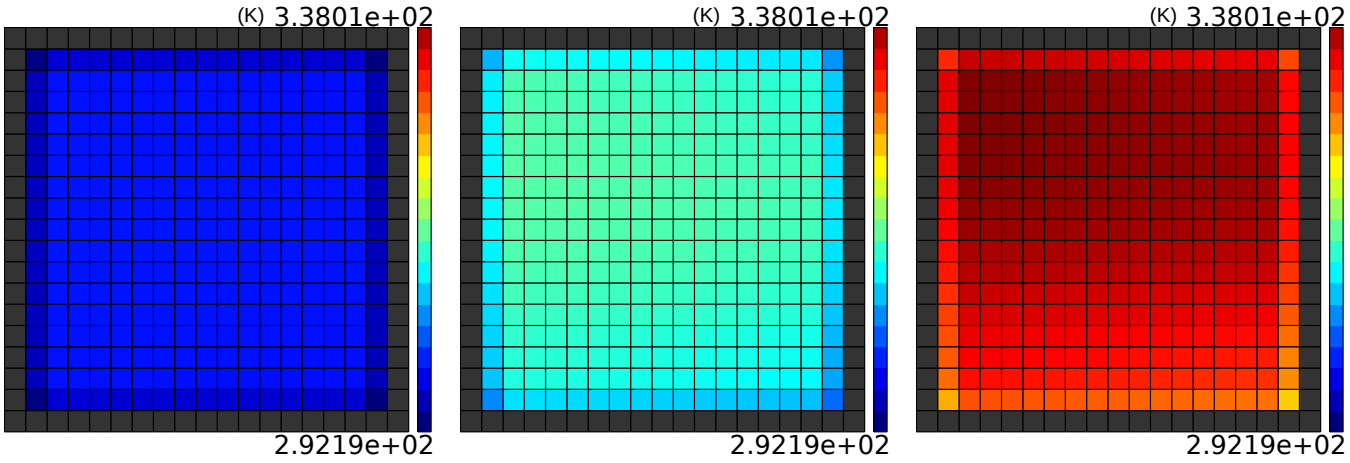


FIGURE 5.54 – Évolution de la répartition de température dans la couche catalytique coté anode pendant le régime transitoire qui suit un échelon de courant (du moment de l'échelon au régime permanent)

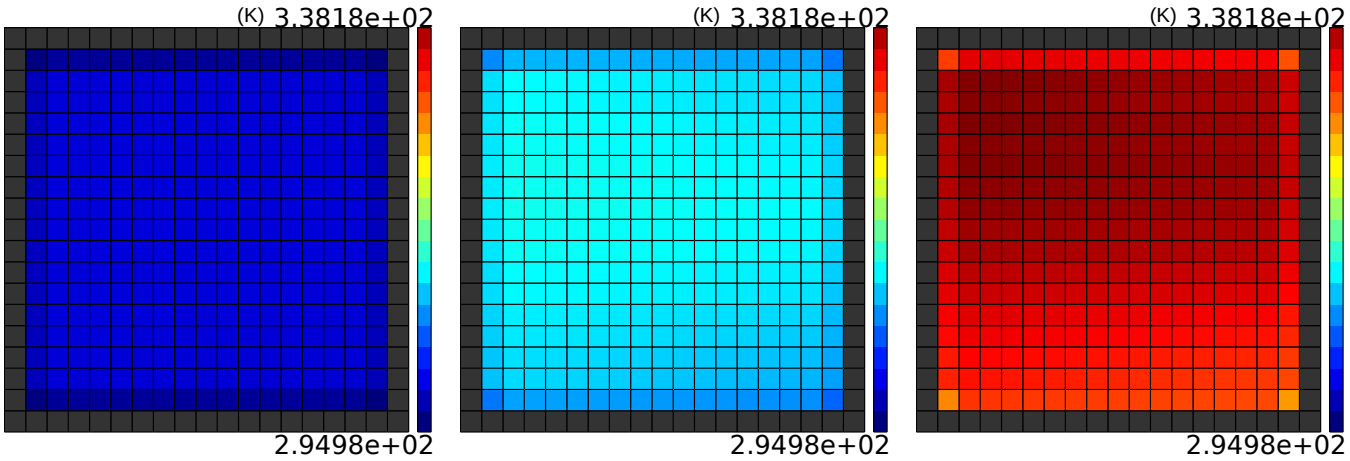


FIGURE 5.55 – Évolution de la répartition de température dans la membrane pendant le régime transitoire qui suit un échelon de courant (du moment de l'échelon au régime permanent)

Les figures 5.54 et 5.55 donne lieu à observation suivante :
— $Ot_7^{thermique}$: On retrouve encore les mêmes propriétés que pour les autres températures.

5.2.3 Évolution de la répartition de courant

Les figures 5.56 et 5.57 donnent lieu aux observations suivantes :
— Ot_1^{elec} : On voit que la variation de la résistance de la membrane en fonction du courant diminue en passant par un état qui porte une "marque" de la répartition de l'oxygène.
— Ot_2^{elec} : La variation de la résistance sur la surface est négligeable devant la variation de la résistance en fonction du courant.
— Ot_3^{elec} : L'amplitude de la répartition du courant en fonction du courant semble être proportionnelle en gardant toujours la même répartition.

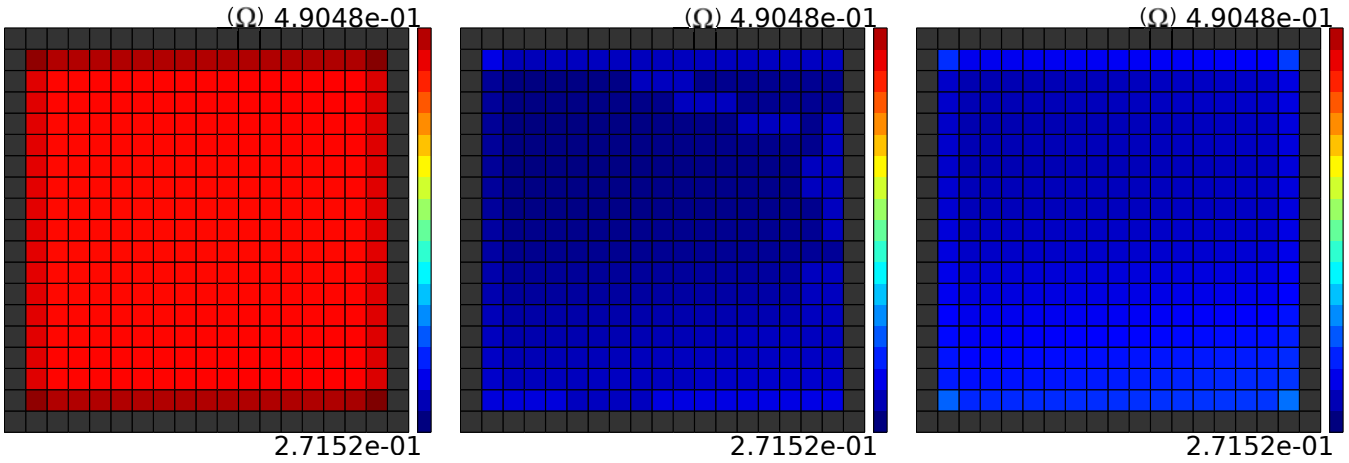


FIGURE 5.56 – Évolution de la répartition de la résistance de la membrane en fonction du courant (du plus bas(5A) au plus haut(40A))

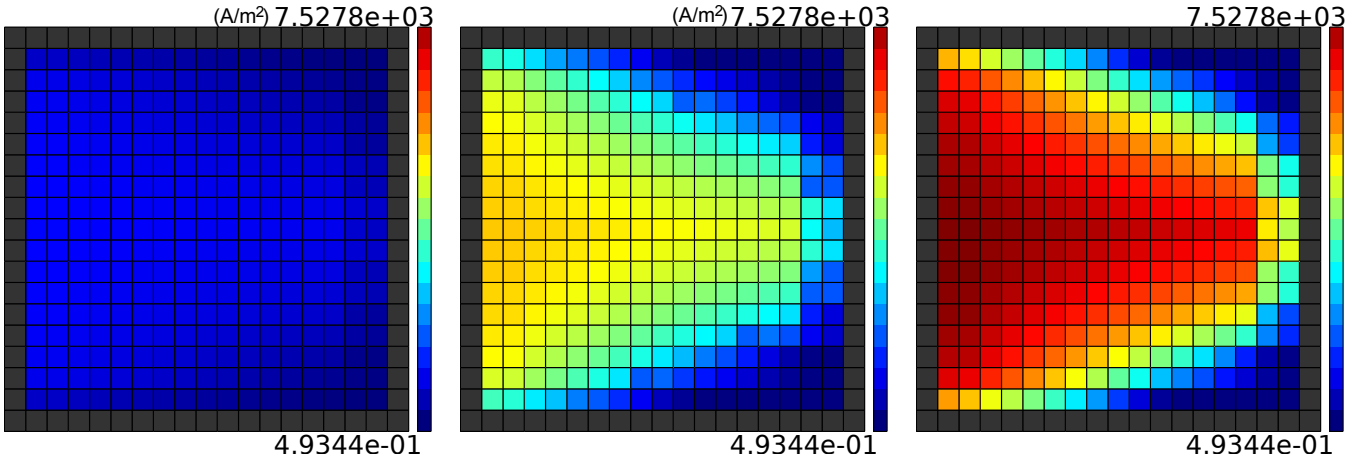


FIGURE 5.57 – Évolution de la répartition de courant dans la couche catalytique en fonction du courant (du plus bas(5A) au plus haut(40A))

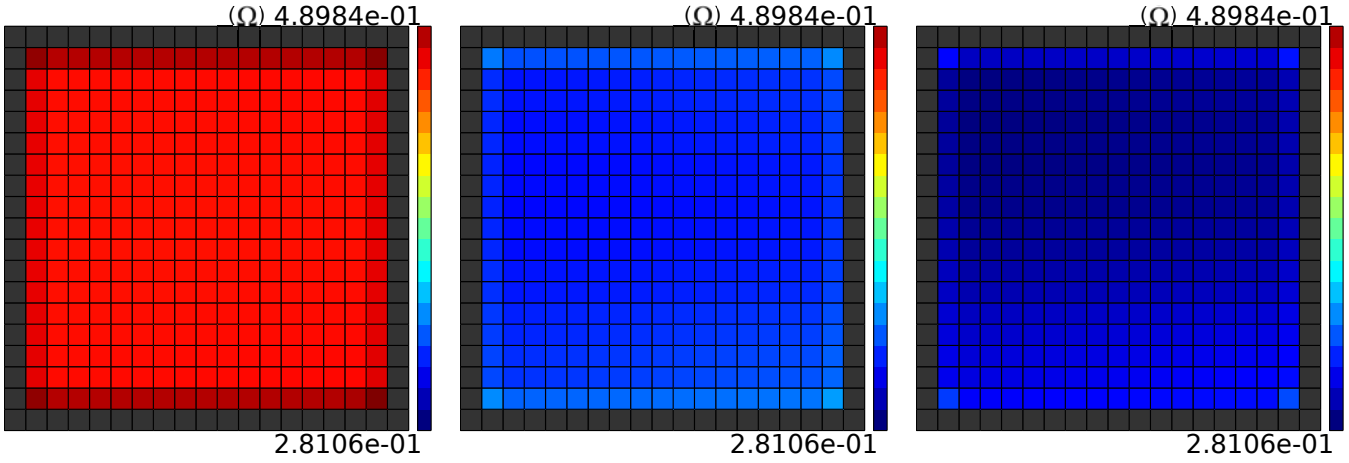


FIGURE 5.58 – Évolution de la répartition de la résistance de la membrane pendant le régime transitoire qui suit un échelon de courant (du moment de l'échelon au régime permanent)

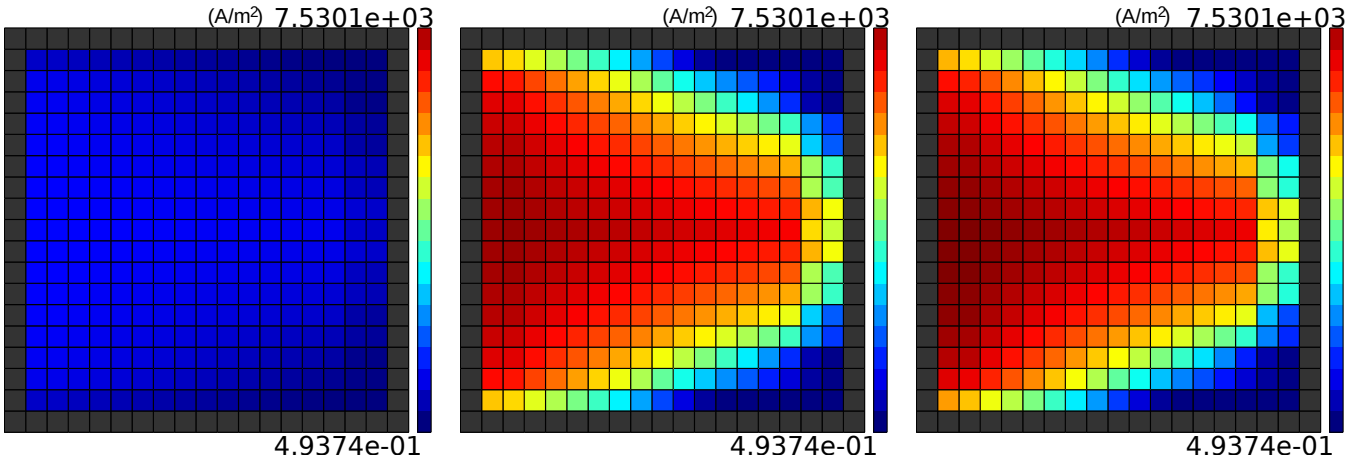


FIGURE 5.59 – Évolution de la répartition de courant dans la couche catalytique pendant le régime transitoire qui suit un échelon de courant (du moment de l'échelon au régime permanent)

Les figures 5.58 et 5.59 donnent lieu aux observations suivantes :
- Ot_4^{elec} : la résistance de la membrane semble avoir les mêmes propriétés de répartitions en dynamique qu'en statique.
- Qt_5^{elec} : la répartition de courant se fait instantanément lors du palier, il n'y a pas de régime dynamique visible.

5.2.4 Bilan

Les principales conclusions que l'on peut faire de toutes ces observations :
- $Ot_2^{thermique} + Ot_3^{thermique} + Ot_4^{thermique} + Ot_5^{thermique} + Ot_6^{thermique} + Ot_7^{thermique}$: la température augmente avec le courant.
- $Ot_1^{thermique} + Ot_1^{fluidique} + Ot_5^{fluidique} + Ot_7^{fluidique} + Ot_2^{elec}$: La variation des grandeurs sur la surface est négligeable devant la variation de ces grandeurs en fonction du courant, cela peut expliquer la précision des modèles en 0D et 1D. La variation de température sur la surface augmente avec le courant. Les modèles 2D devraient donc être plus précis pour des courants importants que les modèle 0D/1D.
- $Ot_2^{fluidique} + Qt_3^{elec} + Qt_5^{elec}$: la répartition de l'oxygène ne change pas avec le courant (car le flux est bien ajusté). Le courant monte instantanément et linéairement sur cette répartition. Il y a sûrement beaucoup de calculs qui peuvent être interpolés grâce à cette observation.
- $Ot_3^{fluidique}$: la répartition de l'eau dans la couche catalytique coté cathode ne change pas non plus en fonction du courant avant d'atteindre un niveau critique où elle s'uniformise et où la concentration d'eau augmente dans la couche catalytique. C'est peut être le phénomène de flooding.

$Ot_1^{fluidique}$	On voit que les écarts de pressions entre l'entrée et la sortie augmentent quand le courant augmente (c'est sûrement par ce que le débit fourni par le compresseur augmente aussi).
$Ot_2^{fluidique}$	La répartition de l'oxygène ne change pas beaucoup en fonction du courant (pour un compresseur qui envoie un flux d'air adapté en fonction du courant).
$Ot_3^{fluidique}$	La répartition de l'eau semble être bien gérée jusqu'à atteindre les hauts courants où le phénomène d'accumulation d'eau se produit.
$Ot_4^{fluidique}$	On voit que la concentration en hydrogène diminue quand le courant augmente.
$Ot_5^{fluidique}$	La variation de la concentration d'hydrogène sur la surface est négligeable comparée à la variation en fonction du courant et augmente avec le courant.
$Ot_6^{fluidique}$	La concentration en eau augmente en fonction du courant.
$Ot_7^{fluidique}$	La variation de la concentration d'eau sur la surface est négligeable comparée à la variation en fonction du courant et augmente avec le courant.
$Ot_1^{thermique}$	La répartition de la température dans le circuit de refroidissement est uniforme pour un courant faible et un gradient apparaît et s'étend avec des températures extrêmes de plus en plus élevé avec le courant.
$Ot_2^{thermique}$	La température de la couche des canaux coté cathode augmente avec le courant.
$Ot_3^{thermique}$	La variation de la température sur la surface de la couche des canaux coté cathode est négligeable devant sa variation par rapport au courant et elle augmente avec le courant.
$Ot_4^{thermique}$	La température de la couche des canaux du coté anode a les mêmes propriétés en fonction du courant que la température de la couche des canaux du coté cathode.
$Ot_5^{thermique}$	La température de la couche catalytique coté cathode a les mêmes propriétés en fonction du courant que la température de la couche des canaux du coté cathode.
$Ot_6^{thermique}$	On retrouve encore les mêmes propriétés que pour les autres températures.
$Ot_7^{thermique}$	On retrouve encore les mêmes propriétés que pour les autres températures.
Ot_1^{elec}	On voit que la variation de la résistance de la membrane en fonction du courant diminue en passant par un état qui porte une "marque" de la répartition de l'oxygène.
Ot_2^{elec}	La variation de la résistance sur la surface est négligeable devant la variation de la résistance en fonction du courant.
Ot_3^{elec}	L'amplitude de la répartition du courant en fonction du courant semble être proportionnelle en gardant toujours la même répartition.
Ot_4^{elec}	La résistance de la membrane semble avoir les mêmes propriétés de répartitions en dynamique qu'en statique.
Qt_5^{elec}	La répartition de courant se fait instantanément lors du palier, il n'y a pas de régime dynamique visible.

TABLE 5.6 – Bilan des observations sur les évolutions des paramètres

5.3 Conclusion partielle

Pour les bas courants, la répartition de l'oxygène dans la cathode semble dominer toutes les autres répartitions qui sont sont assez uniformes. Seule la répartition de résistivité électrique de la membrane suit une autre répartition (celle de la température). Dans ce cas d'étude, on peut penser qu'une augmentation du débit d'air dans la cathode (et donc de la stœchiométrie) augmenterait significativement le potentiel délivré par la pile.

Avec l'augmentation du courant, les températures s'élevant et la répartition de température gagne en influence sur les autres répartitions. Les gradients de températures deviennent aussi plus importants (notamment sur la surface de la pile). La variation de la température sur la surface reste de l'ordre de 3% ce qui est peu d'un point de vue numérique mais représente un $\Delta T = 7^C$ ce qui est important d'un point de vue technique. La répartition de l'oxygène dans la cathode reste le facteur dominant de la répartition du courant dans la cellule. Cependant, il ne faut pas oublier que l'ampleur de cette répartition d'oxygène est très dépendante du ratio entre le débit d'oxygène à l'entrée et le courant.

L'observation des évolutions de répartitions en fonction du courant montrent que les ampleurs des ré-

partitions sont négligeables devant la variation moyenne des grandeurs en fonction du courant. De plus, les répartirons de l'oxygène dans la cathode ne changent pas de forme en fonction du courant alors que celles de l'eau atteignent un seuil critique puis s'uniformisent lorsque le courant augmente.

Conclusion

La pile à combustible est un générateur électrique qui s'appuie sur une réaction électrochimique. C'est aussi un système multi-physique que l'on peut décomposer en trois niveaux : le stack, la cellule et les layers. Chaque niveau de décomposition est un empilement du niveau suivant. On a choisi de travailler au niveau de la cellule.

Beaucoup de modèles existaient déjà sur la pile à combustible. Le défi de cette thèse était de créer un modèle à la fois multidimensionnel et en temps réel. On a donc choisi de réaliser sa programmation en langage C (qui est un langage bas niveau donc rapide) qui peut être aussi implémenté dans des CPU embarquée.

Les sources d'inspirations qui ont permis la réalisation de cette expérience sont variées mais restent classiques (éléments finis, modèles explicites, analogie électrique, itération, calcul parallèle, système multi-agents, etc). Bien que les phénomènes soient variés dans la pile (fluidique, thermique ...), les techniques pour les calculer sont redondantes. En effet, tous les calculs peuvent être exprimés sous forme de termes de flux ou de sources dans une des équations conservatives de Navier-Stockes pour la fluidique, de Fourier pour la thermique et d'Ohm (en version vectorielle) pour l'électrochimique.

Ainsi, la programmation d'un compilateur qui associe les mêmes modules de calculs à des formules différentes permet un grand gain en temps sur le développement. Ce gain en temps sur le développement est essentiel à cause du caractère complexe du modèle et de ses erreurs d'origine chaotique qui imposent une longue phase de débogage à chaque ajout. Le débogage est d'autant plus difficile que l'on ne sait pas exactement ce que l'on doit obtenir comme résultat.

Le modèle est composé de 4 grand modules :

— le modèle fluidique qui est statique ;
— le modèle de la membrane qui est dynamique et tridimensionnel ;
— le modèle électrique qui est statique et très spécifique comparé aux autres modules ;
— le modèle thermique qui est hybride statique/dynamique.

La séparation en module permet le calcul parallèle et une meilleur organisation des maillages en fonction de ce qui est modélisé, mais ça entraîne des problématiques de synchronisations des calculs et de passages des valeurs d'un maillage vers un autre maillage.

La validation du modèle est complexe car il y a beaucoup de paramètres à ajuster et les calculs sont lourds. Les résultats que le modèle donne sont plus bruités que les résultats mesurés pendant l'expérimentation sur une pile à combustible. En effet, beaucoup de systèmes de sécurités rendent le processus de calcul du modèle imprévisible. Cependant, ces résultats restent exploitables et les valeurs qu'ils fournissent proches de la réalité (une erreur moyenne de 5%).

L'erreur numérique est elle aussi bien contrôlée comme le montre l'étude de convergence réalisée avec différentes finesses de maillage.

Par ailleurs, les performances temps réel sont satisfaisantes, un CPU de PC de 2GHz à 4 cœurs peut suffire. Rappelons que les performances temps réel sont très largement conditionnées par la taille du maillage (ici on a fini avec un maillage de 19x19).

Une analyse rapide a été faite sur les résultats de ce modèle appliquée à une pile à combustible. On observe qu'une démarche rigoureuse sur ces résultats permet de sortir des hypothèses, des idées et même d'en valider. Le modèle est donc exploitable et son potentiel d'étude existe bien. Rappelons les principales observations :

— la température augmente avec le courant ;
— la variation des grandeurs sur la surface est négligeable devant la variation de ces grandeurs en fonction du courant, cela peut expliquer la précision des modèles en 0D et 1D. La variation de température sur la surface augmente avec le courant. Les modèles 2D devraient donc être plus précis pour des courants important que les modèle 0D/1D.

— la répartition de l'oxygène ne change pas avec le courant (car le flux est bien ajusté). Le courant monte instantanément et linéairement sur cette répartition. Il y a sûrement beaucoup de calculs qui peuvent être interpolés grâce à cette observation.
— la répartition de l'eau dans la couche catalytique coté cathode ne change pas non plus en fonction du courant avant d'atteindre un niveau critique ou elle s'uniformise et ou la concentration d'eau augmente dans la couche catalytique. C'est peut être le phénomène de flooding.

Perspectives

Ce sont surtout des perspectives qui résultent de ce travail. Des perspectives d'études notamment sur l'influence de l'alimentation en oxygène par le compresseur, du système de refroidissement, des effets de différents profils de courant et si des piles peuvent être conçues plus spécifiquement pour ces profils de courant... Il est aussi possible d'inclure facilement, grâce au compilateur, un modèle associé au vieillissement de la pile pour l'étudier lui aussi. Mais il y a aussi des perspectives dans le calcul temps réel. On pourrait améliorer le compilateur pour qu'il génère les programmes directement en VHDL ce qui permettrait de l'introduire directement dans une carte électronique sans processeur. Et bien sur, il y a toutes les études massives qui peuvent être réalisées en faisant tourner le modèle des milliers de fois sur plusieurs ordinateurs avec des paramètres et des configurations différentes pour chercher des idées de configurations optimales auxquelles personne n'a pensé. Cette expérience est aussi un exemple parmi d'autres de stratégies élaborées pour développer un modèle à moindre coût. Enfin, sur un plan plus cognitif, une telle expérience pourrait aussi servir de base à une étude sur la manière dont les concepts des différentes disciplines peuvent être assemblées pour créer de nouvelles choses ; ou encore comme preuve que le clivage conceptuel entre disciplines techniques peut masquer des possibilités.

Productions scientifiques

Journaux internationaux

— **2015** :
  — Parameter Sensitivity Analysis and Local Temperature Distribution Effect for a PEM Fuel Cell System
  Dong Dong ZHAO, Fei GAO, Pierre MASSONNAT, Manfeng DOU, Abdellatif MIRAOUI
  IEEE Transactions on Energy Conversion
  — Fault Analysis of the PEMFC by Using 3D Temperature Fault Sensitive Model for Automotive Applications
  Ali MOHAMMADI, Pierre MASSONNAT, Abdesslem DJERDIR, David BOUQUAIN, Davood KHABURI, Fei GAO
  International Journal on Energy Conversion, vol. 2(5)
— **2014** :
  — Multiphysical, Multidimensional Real-Time PEM Fuel Cell Modeling for Embedded Applications
  Pierre MASSONNAT, Fei GAO, Robin ROCHE, Damien PAIRE, David BOUQUAIN, Abdellatif MIRAOUI
  Energy Conversion and Management vol. 88, pp. 554-564

Journaux nationaux

— **2014** : Synthèse sur le vieillissement des piles à combustibles à membrane échangeuse de protons
Pierre MASSONNAT, Fei GAO, David BOUQUAIN, Abdellatif MIRAOUI
Revue 3EI

Conférences internationales

— **2014** : A multi physical model for PEM fuel cells including a two dimensional fluidic finite element analysis in real time
Pierre MASSONNAT, Fei GAO, Damien PAIRE, David BOUQUAIN, Abdellatif MIRAOUI
IEEE Transportation Electrification Conference and Expo (ITEC)

— **2013** : A real-time 2D PEMFC model for fuel cell vehicle hardware-in-the-loop applications
Pierre MASSONNAT, Fei GAO, David BOUQUAIN, Abdellatif MIRAOUI
IEEE-IECON

Conférences nationales

— **2014** : Modélisation et émulation 3D orienté temps réel de la diffusion de reactifs dans une pile à combustible à membrane échangeuse de protons
Pierre MASSONNAT, Fei GAO, Damien PAIRE, David BOUQUAIN, Abdellatif MIRAOUI
Symposium De Génie Electrique (SGE'14)

Bibliographie

[1] M. Abdollahzadeh, J.C. Pascoa, A.A. Ranjbar, and Q. Esmaili. Analysis of pem (polymer electrolyte membrane) fuel cell cathode two-dimensional modeling. *Energy*, 68(0) :478 – 494, 2014.

[2] Aboubakr M. Abdullah, Ahmad M. Mohammad, Takeyoshi Okajima, Fusao Kitamura, and Takeo Ohsaka. Effect of load, temperature and humidity on the ph of the water drained out from h2 /air polymer electrolyte membrane fuel cells. *Journal of Power Sources*, 190 :264–270, 2009.

[3] Aboubakr M. Abdullah, Takeyoshi Okajima, Fusao Kitamura, and Takeo Ohsaka. A simple in situ characterization technique for the onset of the chemical degradation of pem fuel cells' fluorinated membranes. *Electrochemistry Communications*, 10 :1732–1735, 2008.

[4] A.R. Maher Sadiq Al-Baghdadi. Performance comparison between airflow-channel and ambient air-breathing pem fuel cells using three-dimensional computational fluid dynamicsmodels. *Renewable Energy*, 34 :1812–1824, 2009.

[5] Maher A.R. Sadiq Al-Baghdadi. A cfd study of hygro–thermal stresses distribution in pem fuel cell during regular cell operation. *Renewable Energy*, 34 :674–682, 2009.

[6] Maher A.R. Sadiq Al-Baghdadi and Haroun A.K. Shahad Al-Janabi. Modeling optimizes pem fuel cell performance using three-dimensional multi-phase computational fluid dynamics model. *Energy Conversion and Management*, 48(12) :3102 – 3119, 2007.

[7] A. Arvay, E. Yli-Rantala, C.-H. Liu, X.-H. Peng, P. Koski, L. Cindrella, P. Kauranen, and A.M. Kannan P.M. Wilde. Characterization techniques for gas diffusion layers for proton exchange membrane fuel cells e a review. *Journal of Power Sources*, 213 :317–337, 2012.

[8] M.A. Audette, V. Hayward, O. Astley, M. Doyon, G.A. McCallister, and K. Chinzei. A pc-based system architecture for real-time finite element-based tool-specific surgical simulation. *International Congress Series*, 1268(0) :378 – 383, 2004.

[9] C. Bao, M. Ouyang, and B. Yi. Modeling and control of air stream and hydrogen flow with recirculation in a pem fuel cell system-i. control-oriented modeling. *International Journal of Hydrogen Energy*, 141 :96–101, 2005.

[10] F. Barbir, H. Gorgun, and X. Wang. Relationship between pressure drop and cell resistance as a diagnostic tool for pem fuel cells. *Journal of Power Sources*, 141 :96–101, 2005.

[11] J.J. Baschuk and Xianguo Li. A general formulation for a mathematical pem fuel cell model. *Journal of Power Sources*, 142 :134–153, 2004.

[12] J.J Baschuk and Xianguo Li. A comprehensive, consistent and systematic mathematical model of pem fuel cells. *Applied Energy*, 86 :181–193, 2009.

[13] Janine M. Benyus. *Biomimetisme, Quand la nature inspire des inovations durables.* 2011.

[14] Caroline Bonnet, Ludivine Franck-Lacaze, Sara Ronasi, Serge Besse, and Franc ois Lapicque. Pem fuel cell pt anode inhibition by carbon monoxide : Non-uniform behaviour of the cell caused by the finite hydrogen excess. *Chemical Engineering Science*, 65 :3050–3058, 2010.

[15] Rod L. Borup, John R. Davey, Fernando H. Garzon, David L Wood, and Michael A. Inbody. Pem fuel cell electrocatalyst durability measurements. *Journal of Power Sources*, 163 :76–81, 2006.

[16] Youness Bouaanani. *Modélisation multiphysique de piles à combustible à membrane échangeuse de protons.* 2014.

[17] L. Boulon, K. Agbossou, D. Hissel, P. Sicard, A. Bouscayrol, and M.-C. Péra. A macroscopic pem fuel cell model including water phenomena for vehicle simulation. *Renewable Energy*, 46(0) :81 – 91, 2012.

[18] O.S. Burheim, G. Ellila, J.D. Fairweather, A. Labouriau, S. Kjelstrup, and J.G. Pharoah. Ageing and thermal conductivity of porous transport layers used for pem fuel cells. *Journal of Power Sources*, 221 :356–365, 2012.

[19] S. Caux, W. Hankache, M. Fadel, and D. Hissel. Pem fuel cell model suitable for energy optimization purposes. *Energy Conversion and Management*, 51(2) :320 – 328, 2010.

[20] F. Chinesta, A. Leygue, F. Bordeu, J.V. Aguado, E. Cueto, D. Gonzalez, I. Alfaro, A. Ammar, and A. Huerta. Pgd-based computational vademecum for efficient design, optimization and control. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 166(11) :578 – 592, 2012.

[21] Bachir Dadda, Saïd Abboudi, and Abderrahmane Ghezal. Transient two-dimensional model of heat and mass transfer in a pem fuel cell membrane. *International Journal of Hydrogen Energy*, 38(17) :7092 – 7101, 2013.

[22] Jean-Francois Dortier. *Le cerveau et la pensée, le nouvel age des sciences cognitives*. Volumen, 2012.

[23] Bryan Horling et Victor Lesser. A survey of multi-agent organizational paradigms. *The Knowledge Engineering Review*, 2004.

[24] D.S. Falcao, V.B. Oliveira, C.M. Rangel, C. Pinho, and A.M.F.R. Pinto. Water transport through a pem fuel cell : A one-dimensional model with heat transfer effects. *Chemical Engineering Science*, 64 :2216–2225, 2009.

[25] D.S. Falcao, V.B. Oliveira, C.M. Rangel, C. Pinho, and A.M.F.R. Pinto. Water transport through a pem fuel cell : A one-dimensional model with heat transfer effects. *Chemical Engineering Science*, 64 :2216–2225, 2009.

[26] R. Ferrero, M. Marracci, M. Prioli, and B. Tellini. Simplified model for evaluating ripple effects on commercial pem fuel cell. *International Journal of Hydrogen Energy*, 37 :13462–13469, 2012.

[27] Fei Gao. *Modélisation multiphysique de piles à combustible à membrane échangeuse de protons*. 2010.

[28] Fei Gao, Benjamin Blunier, and Abdellatif Miraoui. *Modelisation de piles à combustible à membrane échangeuse de protons*. Kermes Science, 2011.

[29] G. Gavello, J. Zeng, C. Francia, U.A. Icardi, A. Graizzaro, and S. Specchia. Experimental studies on nafion 112 single pem-fcs exposed to freezing conditions. *international journal of hydrogen energy*, 36 :8070–8081, 2011.

[30] Ridha Hambli, Abdessalam Chamekh, and Hédi Bel Hadj Salah. Real-time deformation of structure using finite element and neural networks in virtual reality applications. *Finite Elements in Analysis and Design*, 42(11) :985 – 991, 2006.

[31] Junbo Hou, Baolian Yi, Hongmei Yu, Lixing Hao, Wei Song, Yu Fu, and Zhigang Shao. Investigation of resided water effects on pem fuel cell after cold start. *International Journal of Hydrogen Energy*, 32 :4503–4509, 2007.

[32] Yongping Hou, Zhihua Yang, and Gang Wan. An improved dynamic voltage model of pem fuel cell stack. *International Journal of Hydrogen Energy*, 35 :11154–11160, 2010.

[33] Mingruo Hu, Anzhong Gu, Minghua Wang, Xinjian Zhu, and Lijun Yu. Three dimensional, two phase flow mathematical model for pem fuel cell : Part i. model development. *Energy Conversion and Management*, 45(11–12) :1861 – 1882, 2004.

[34] Mingruo Hu, Xinjian Zhu, Minghua Wang, Anzhong Gu, and Lijun Yu. Three dimensional, two phase flow mathematical model for pem fuel cell : Part ii. analysis and discussion of the internal transport mechanisms. *Energy Conversion and Management*, 45 :1883–1916, 2004.

[35] B.T. Huang, Y. Chatillon, C. Bonnet, F. Lapicque, S. Leclerc, M. Hinaje, and S. Rae. Experimental investigation of pinhole effect on mea/cell aging in pemfc. *international journal of hydrogen energy*, XXX :I–8, 2012.

[36] Peter Huthwaite. Accelerated finite element elastodynamic simulations using the gpu. *Journal of Computational Physics*, 257, Part A(0) :687 – 707, 2014.

[37] Alfredo Iranzo, Pierre Boillat, and Felipe Rosa. Validation of a three dimensional pem fuel cell cfd model using local liquid water distributions measured with neutron imaging. *International Journal of Hydrogen Energy*, 39(13) :7089 – 7099, 2014.

[38] M.S. Ismail, D.B. Ingham, K.J. Hughes, L. Ma, and M. Pourkashanian. Thermal modelling of the cathode in air-breathing pem fuel cells. *Applied Energy*, 111(0) :529 – 537, 2013.

[39] Ruiliang Jia, Siming Dong, Takuya Hasegawa, Jiping Ye, and Reinhold H. Dauskardt. Contamination and moisture absorption effects on the mechanical properties of catalyst coated membranes in pem fuel cells. *international journal of hydrogen energy*, 37 :6790–6797, 2012.

[40] Vesselin Krassimirov Krastev, Giacomo Falcucci, Elio Jannelli, Mariagiovanna Minutillo, and Raffaello Cozzolino. 3d cfd modeling and experimental characterization of ht pem fuel cells at different anode gas compositions. *International Journal of Hydrogen Energy*, 39(36) :21663 – 21672, 2014.

[41] Jenn-Kun Kuo and Chi-Fa Wang. An integrated simulation model for pem fuel cell power systems with a buck dc–dc converter. *International Journal of Hydrogen Energy*, 36(18) :11846 – 11855, 2011.

[42] Ahmet Kusoglu, Anette M. Karlsson, Michael H. Santare, Simon Cleghorn, and William B. Johnson. Mechanical behavior of fuel cell membranes under humidity cycles and effect of swelling anisotropy on the fatigue stresses. *Journal of Power Sources*, 170 :345–358, 2007.

[43] K. Latha, S. Vidhya, B. Umamaheswari, N. Rajalakshmi, and K.S. Dhathathreyan. Tuning of pem fuel cell model parameters forprediction of steady state and dynamic performance under various operating conditions. *International Journal of Hydrogen Energy*, 38(5) :2370 – 2386, 2013.

[44] Yongqiang Li, David A. Dillard, Scott W. Case, Michael W. Ellis, Yeh-Hung Lai, Craig S. Gittleman, and Daniel P. Miller. Fatigue and creep to leak tests of proton exchange membranes using pressure-loaded blisters. *Journal of Power Sources*, 194 :873–879, 2009.

[45] Chih-Wei Lin, Chi-Hui Chien, Jinzhu Tan, Yuh J. Chao, and J.W. Van Zee. Chemical degradation of five elastomeric seal materials in a simulated and an accelerated pem fuel cell environment. *Journal of Power Sources*, 196 :1955–1966, 2011.

[46] Chih-Wei Lin, Chi-Hui Chien, Jinzhu Tan, Yuh-Jin Chao, and J.W. Van Zee. Dynamic mechanical characteristics of five elastomeric gasket materials aged in a simulated and an accelerated pem fuel cell environment. *international journal of hydrogen energy*, 36 :6756–6767, 2011.

[47] R. Lina, B. Lia, Y.P. Houa, and J.M. Ma. Investigation of dynamic driving cycle effect on performance degradation and micro-structure change of pem fuel cell. *international journal of hydrogen energy*, 34 :2369–2376, 2009.

[48] Vincenzo Liso, Mads Pagh Nielsen, Søren Knudsen Kær, and Henrik H. Mortensen. Thermal modeling and temperature control of a pem fuel cell system for forklift applications. *International Journal of Hydrogen Energy*, 39(16) :8410 – 8420, 2014.

[49] Xun-Liang Liu, Ya-Wei Tan, Wen-Quan Tao, and Ya-Ling He. A hybrid model of cathode of pem fuel cell using the interdigitated gas distributor. *International Journal of Hydrogen Energy*, 31 :379–389, 2005.

[50] Erasmo Mancusi, Éliton Fontana, Antônio Augusto Ulson de Souza, and Selene M.A. Guelli Ulson de Souza. Numerical study of two-phase flow patterns in the gas channel of pem fuel cells with tapered flow field design. *International Journal of Hydrogen Energy*, 39(5) :2261 – 2273, 2014.

[51] Ronald F Mann, John C Amphlett, Michael A I Hooper, Heidi M Jensen, Brant A Peppley, and Pierre R Roberge. Development and application of a generalised steady-state electrochemical model for a pem fuel cell. *Journal of Power Sources*, 86 :173–180, 2000.

[52] Pierre Massonnat, Fei Gao, Robin Roche, Damien Paire, David Bouquain, and Abdelatif Miraoui. Multi-physical, multidimensional real-time pem fuel cell modeling for embedded applications. *Energy Conversion and Management*, 88(0) :554 – 564, 2014.

[53] P. Millet, A. Ranjbari, F. de Guglielmo, S.A. Grigoriev, and F. Aupretre. Cell failure mechanisms in pem water electrolyzers. *international journal of hydrogen energy*, 37 :17478–17487, 2012.

[54] M. Muthukumar, P. Karthikeyan, M. Vairavel, C. Loganathan, S. Praveenkumar, and A.P. Senthil Kumar. Numerical studies on pem fuel cell with different landing to channel width of flow channel. *Procedia Engineering*, 97(0) :1534 – 1542, 2014. 12th GCMM - 2014.

[55] S.O. Obayopo, T. Bello-Ochende, and J.P. Meyer. Modelling and optimization of reactant gas transport in a pem fuel cell with a transverse pin fin insert in channel flow. *International Journal of Hydrogen*

Energy, 37(13) :10286 – 10298, 2012. Proceedings of the Symposium on Hydrogen Production and Applications at the 240th American Chemical Society National Meeting, August 22-26, 2010, Boston, Massachusetts, USA.

[56] Karachakorn Panha, Michael Fowler, Xiao-Zi Yuan, and Haijiang Wang. Accelerated durability testing via reactants relative humidity cycling on pem fuel cells. *Applied Energy*, 93 :90–97, 2012.

[57] Sehkyu Park and Branko N. Popov. Effect of hydrophobicity and pore geometry in cathode gdl on pem fuel cell performance. *Electrochimica Acta*, 54 :3473–3479, 2009.

[58] Sehkyu Park, Yuyan Shao, Vilayanur V. Viswanathan, Jun Liu, and Yong Wang. Non-kinetic losses caused by electrochemical carbon corrosion in pem fuel cells. *international journal of hydrogen energy*, 37 :8451–8458, 2012.

[59] Latevi Placca, Raed Kouta, Jean-Francois Blachot, and Willy Charon. Effects of temperature uncertainty on the performance of a degrading pem fuel cell model. *Journal of Power Sources*, 194 :313–327, 2009.

[60] Georgeta Postole and Aline Auroux. The poisoning level of pt/c catalysts used in pem fuel cells by the hydrogen feed gas impurities : The bonding strength. *international journal of hydrogen energy*, 36 :6817–6825, 2011.

[61] Georgeta Postole, Simona Bennici, and Aline Auroux. Calorimetric study of the reversibility of co pollutant adsorption on high loaded pt/carbon catalysts used in pem fuel cells. *Applied Catalysis B : Environmental*, 92 :307–317, 2009.

[62] M. Pérez-Page and V. Pérez-Herranz. Study of the electrochemical behaviour of a 300w pem fuel cell stack by electrochemical impedance spectroscopy. *International Journal of Hydrogen Energy*, 39(8) :4009 – 4015, 2014.

[63] Vijay Radhakrishnan and Prathap Haridoss. Effect of cyclic compression on structure and properties of a gas diffusion layer used in pem fuel cells. *international journal of hydrogen energy*, 35 :11107–11118, 2010.

[64] Abhishek Raj and Tariq Shamim. Investigation of the effect of multidimensionality in pem fuel cells. *Energy Conversion and Management*, 86(0) :443 – 452, 2014.

[65] Bladimir Ramos-Alvarado, Abel Hernandez-Guerrero, and Michael W. Ellis. Non-equilibrium two-phase model of the air-cathode of a pem fuel cell based on gdl experimental water transport characteristics. *Journal of Power Sources*, 232(0) :376 – 388, 2013.

[66] R. Madhusudana Rao and R. Rengaswamy. A distributed dynamic model for chronoamperometry, chronopotentiometry and gas starvation studies in pem fuel cell cathode. *Chemical Engineering Science*, 61 :7393–7409, 2006.

[67] Feng Rong, Cheng Huang, Zhong-Sheng Liu, Datong Song, and Qianpu Wang. Microstructure changes in the catalyst layers of pem fuel cells induced by load cycling part ii. simulation and understanding. *Journal of Power Sources*, 175 :712–723, 2008.

[68] Vicky Rouss, Willy Charon, and Agathe Desflots. Characterisation of mechanical non-linearities in a proton exchange membrane fuel cell using raw data. *international journal of hydrogen energy*, 34 :2377–2386, 2009.

[69] M.A. Rubio, A. Urquia, and S. Dormido. Diagnosis of performance degradation phenomena in pem fuel cells. *international journal of hydrogen energy*, 35 :2586–2590, 2010.

[70] Yuyan Shao, Jun Wang, Rong Kou, Mark Engelhard, Jun Liu, Yong Wang, and Yuehe Lin. The corrosion of pem fuel cell catalyst supports and its implications for developing durable catalysts. *Electrochimica Acta*, 54 :3109–3114, 2009.

[71] R.A. Silva, T. Hashimoto, G.E. Thompson, and C.M. Rangel. Characterization of mea degradation for an open air cathode pem fuel cell. *international journal of hydrogen energy*, 37 :7299–7308, 2012.

[72] Jinzhu Tan, Y.J. Chao, Haifeng Wang, Jianming Gong, and J.W. Van Zee. Chemical and mechanical stability of epdm in a pem fuel cell environment. *Polymer Degradation and Stability*, 94 :2072–2078, 2009.

[73] Jinzhu Tan, Y.J. Chao, J.W. Van Zee, and W.K. Lee. Degradation of elastomeric gasket materials in pem fuel cells. *Materials Science and Engineering*, A 445–446 :669–675, 2007.

[74] Faysal Tiss, Ridha Chouikh, and Amenallah Guizani. Dynamic modeling of a pem fuel cell with temperature effects. *International Journal of Hydrogen Energy*, 38(20) :8532 – 8541, 2013.

[75] J.P. Torreglosa, F. Jurado, P. García, and L.M. Fernández. Pem fuel cell modeling using system identification methods for urban transportation applications. *International Journal of Hydrogen Energy*, 36(13) :7628 – 7640, 2011. Hysydays.

[76] Cabir Turan, Omer Necati Cora, and Muammer Koc. Effect of manufacturing processes on contact resistance characteristics of metallic bipolar plates in pem fuel cells. *international journal of hydrogen energy*, 36 :12370–12380, 2011.

[77] L. Valiño, R. Mustata, and L. Dueñas. Consistent modeling of a single pem fuel cell using onsager's principle. *International Journal of Hydrogen Energy*, 39(8) :4030 – 4036, 2014.

[78] Bouchra Wahdame, Denis Candusso, Xavier François, Fabien Harel, Marie-Cécile Péra, Daniel Hissel, and Jean-Marie Kauffmann. Comparison between two pem fuel cell durability tests performed at constant current and under solicitations linked to transport mission profile. *International Journal of Hydrogen Energy*, 32 :4523 – 4536, 2007.

[79] Xiao-Dong Wang, Wei-Mon Yan, Yuan-Yuan Duan, Fang-Bor Weng, Guo-Bin Jung, and Chi-Yuan Lee. Numerical study on channel size effect for proton exchange membrane fuel cell with serpentine flow field. *Energy Conversion and Management*, 51(5) :959 – 968, 2010.

[80] Yan Wang and Derek O. Northwood. Effects of o2 and h2 on the corrosion of ss316l metallic bipolar plate materials in simulated anode and cathode environments of pem fuel cells. *Electrochimica Acta*, 52 :6793–6798, 2007.

[81] Fang-Bor Weng, Chun-Ying Hsu, and Chun-Wei Li. Experimental investigation of pem fuel cell aging under current cycling using segmented fuel cell. *international journal of hydrogen energy*, 35 :3664–3675, 2010.

[82] Lei Xing, Xiaoteng Liu, Taiwo Alaje, Ravi Kumar, Mohamed Mamlouk, and Keith Scott. A two-phase flow and non-isothermal agglomerate model for a proton exchange membrane (pem) fuel cell. *Energy*, 73(0) :618 – 634, 2014.

[83] Xiao-Guang Yang, Qiang Ye, and Ping Cheng. Hydrogen pumping effect induced by fuel starvation in a single cell of a pem fuel cell stack at galvanostatic operation. *international journal of hydrogen energy*, 37 :14439–14453, 2012.

[84] Lixin You and Hongtan Liu. A parametric study of the cathode catalyst layer of pem fuel cells using a pseudo-homogeneous model. *International Journal of Hydrogen Energy*, 26 :991–999, 2001.

[85] Lixin You and Hongtan Liu. A two-phase flow and transport model for the cathode of pem fuel cells. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 45 :2277–2287, 2002.

[86] Dongdong Zhao, Qing Zheng, Fei Gao, David Bouquain, Manfeng Dou, and Abdellatif Miraoui. Disturbance decoupling control of an ultra-high speed centrifugal compressor for the air management of fuel cell systems. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2014.

[87] Markus Özbek, Shen Wang, Matthias Marx, and Dirk Söffker. Modeling and control of a pem fuel cell system : A practical study based on experimental defined component behavior. *Journal of Process Control*, 23(3) :282 – 293, 2013.

SPIM

■ École doctorale SPIM - Université de Technologie Belfort-Montbéliard
F - 90010 Belfort Cedex ■ **tél. +33 (0)3 84 58 31 39**
■ **ed-spim@univ-fcomte.fr** ■ www.ed-spim.univ-fcomte.fr

utbm
université de technologie
Belfort-Montbéliard