Etude numérique tridimensionnelle de l'effet de la température d'entrée des gaz sur la production de chaleur dans une pile à combustible SOFC planaire

Youcef Sahli^{1*}, Bariza Zitouni²[†]et Hocine Benmoussa³

 ¹ Unité de Recherche en Energies Renouvelables en Milieu Saharien, URERMS Centre de Développement des Energies Renouvelables, CDER 01000, Adrar, Algérie
 ² Département de Technologie Alimentaire, Institut des Sciences Vétérinaires et Agriculture Université de Batna 1, Algérie
 ³ Département de Mécanique, Faculté de Technologie Université de Batna 2, Algérie

(reçu le 10 Mai 2018 - accepté le 20 Juin 2018)

Résumé - L'objet de ce travail est l'étude numérique tridimensionnelle et stationnaire du phénomène de transfert de chaleur dans les piles à combustible à oxyde solide (SOFC) planaires à anode supportée, tout en s'intéressant particulièrement à la production de chaleur produite par la cellule. La chaleur est supposée produite essentiellement par la perte ohmique qui est due à l'effet de Joule et la surtension d'activation qui est provoqué par les différentes réactions chimiques produites dans les deux électrodes de la cellule. Les résultats sont obtenus à partir d'un programme en langage fortran réalisé localement, qui se base sur la méthode des différences finies dans un environnement tridimensionnel. De l'analyse des résultats obtenus, il est apparu que le modèle développé localement pour l'étude thermique des piles SOFC nous a permis de comprendre l'effet de la température d'entrée des deux gaz réactifs (Hydrogène et Air) sur la distribution de la température, et la localisation des températures maximales dans la cellule SOFC planaire.

Abstract - The purpose of this work is the steady-state three-dimensional numerical study of heat transfer phenomenon in the planar solid oxide fuel cell (SOFC) at a supported anode, while paying particular attention to the heat generation produced by the cell. The heat production is essentially supposed generated by the ohmic loss which is due to the Joule effect and the activation overpotential that is caused by the different chemical reactions occurring within the two cell electrodes. The results are obtained from a program in Fortran language developed locally, which based on the finite difference method in a three dimensional environment. From the results analysis, it appeared that the model developed locally for the thermal behavior study of SOFC allowed us to understand the input temperature effect of the two reactive gases (hydrogen and air) on the temperature distribution, and the maximum temperatures location in the planar SOFC.

Keywords: SOFC - Anode supported - Three-dimensional - Temperature.

1. INTRODUCTION

La distribution, la variation des valeurs de la température dans les piles à combustible SOFC (Solid Oxide Fuel Cell) et les performances de la cellule sont influencées par plusieurs paramètres.

Ces paramètres sont les configurations géométriques (le design et le dimensionnement des différents composants), les paramètres physiques de fonctionnement (les températures d'entrée des gaz, la pression des gaz et le débit de chaque gaz, etc.) et les caractéristiques physiologiques de chaque partie (nature de

^{*} y.sahli@urerms.dz

⁺ h2sofc@gmail.com

carburant, matériaux de construction de chaque composant, porosité des électrodes, etc.).

Plusieurs travaux antécédents ont été abordés, nous présentons quelques-uns.

Chyou *et al.* [1] se sont concentrés sur la conception et l'analyse thermique de la pile (SOFC). Ils ont mis une isolation en tant que pièce jointe d'une pile SOFC pour réduire la perte de chaleur. Inui *et al.* [2] ont présenté un modèle bidimensionnel et instationnaire dans un plan parallèle au sens de l'écoulement dans une SOFC planaire à électrolyte supporté, le modèle prévoit les variations de polarisation (potentiel/densité de courant) et de la température.

Inui *et al.* [3] ont examiné en détail l'influence du rapport de mélange d'hydrogène et de monoxyde de carbone dans le carburant sur le rendement des piles SOFC planaires à électrolyte supporté, à l'aide d'un code de simulation numérique tridimensionnelle et instationnaire, dans un seul étage de cellules.

Ils ont précisé que les performances de la cellule sont presque les mêmes et excellentes, indépendamment du rapport de mélange d'hydrogène et de monoxyde de carbone dans l'état de fonctionnement nominal.

Ho *et al.* [4] ont examiné l'influence de la température d'entrée d'air, les espèces chimiques et la distribution de la densité de courant pour les configurations co-courant et contre-courant dans les canaux, l'électrolyte et les électrodes de la pile à combustible SOFC planaire à anode supportée.

Ils ont montré que la configuration d'écoulement contre-courant est favorable par rapport à la configuration d'écoulement Co-courant.

Yan *et al.* [5] ont examiné et évalué un nouveau design extérieur en trois dimensions d'un mineur empilement de pile à combustible SOFC planaire à anode supportée qui se compose de trois étages de cellules avec une configuration monolithique des canaux et un écoulement croisé.

La résolution de modèle instationnaire proposé est réalisée à l'aide de code ANSYS. Le design de l'empilement proposé offre une meilleure performance et une bonne stabilité.

Peksen *et al.* [6] ont exposé une analyse thermomécanique en trois dimensions d'un empilement de mineur étage d'une SOFC planaire sur un cycle thermique composé de plusieurs cellules, grillage, cadre de métal, des plaques d'interconnexion et de matériaux d'étanchéité à l'aide du code CSM pour déterminer les mécanismes qui déclenchent la contrainte thermomécanique pendant le chauffage, le fonctionnement et l'arrêt de la pile.

Dans le cadre de cette étude, les champs de température sont visualisés dans un environnement tridimensionnel et dans les plans parallèle et perpendiculaire au sens des écoulements des deux gaz réactifs dans les deux canaux anodique et cathodique de la cellule élémentaire SOFC planaire pour étudier l'effet de la température d'entrée des gaz sur la production de la chaleur.

2. MODELE MATHEMATIQUE

Le domaine de calcul est limité à une seule cellule SOFC qui se compose de la cathode, de l'anode, de l'électrolyte de l'interconnecteur et les deux canaux anodique et cathodique (figure 1).



Fig. 1: Domaine de calcul

Dans ce travail, la représentation du phénomène thermique dans la pile à combustible SOFC planaire est régie par l'équation de l'énergie (équation 1). Le modèle de calcul est tridimensionnel et stationnaire; le milieu est considéré semblablement continu, les composants de la pile sont comptabilisés comme des milieux homogènes et isotropes.

La température des gaz à l'entrée des canaux est prise constante de telle sorte que les fluides sont brassés, le transfert de chaleur par rayonnement est négligé, la densité du courant produite par la cellule est considérée constante dans toutes les parties solides de la pile, en prenant compte seulement les sources de chaleur due à l'effet Joule et d'activation. Les vitesses des deux gaz sont supposées faibles, ce qui conduit à la négligence du terme convectif.

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \left(\lambda \frac{\partial \mathbf{T}}{\partial \mathbf{x}} \right) + \frac{\partial}{\partial \mathbf{y}} \left(\lambda \frac{\partial \mathbf{T}}{\partial \mathbf{y}} \right) + \frac{\partial}{\partial \mathbf{z}} \left(\lambda \frac{\partial \mathbf{T}}{\partial \mathbf{z}} \right) + \mathbf{S} = \mathbf{0}$$
(1)

Où T , est la température, λ , est la conductivité thermique de chaque composant et S , représente la source de chaleur.

Les conductivités thermiques des éléments composant de la cellule sont données par le **Tableau 1**:

Composants	Conductivité thermique λ (W/m.K)	Matériau	Références
Anode	5.84	Ni-YSZ	[7, 8]
Cathode	4	La _{1-x} Sr _x MnO ₃	[4, 9]
Electrolyte	2.16	YSZ	[7, 8]
Interconnecteur	6	LaCrO ₃	[10]

Tableau 1: Valeurs des conductivités thermiques

La chaleur est produite selon les deux sources de chaleur ohmique est activation. La source de chaleur provoquée par l'effet de joule est produite dans toutes les parties solides et poreuses. La source de chaleur provoquée par la perte de tension d'activation est localisée dans les deux milieux poraux (anode et cathode).

La source de chaleur due pertes ohmiques est définie par le rapport de densité de courant au carré et la conductivité électrique de chaque composant de la cellule.

$$S_{ohm} = \frac{i^2}{\sigma}$$
(2)

Les conducti	vités électriques	des éléments	constructifs d	le la pile sont	définies p	par le
Tableau 2.						

Composant de SOFC	$\sigma \left(\Omega^{-1} \mathrm{cm}^{-1} \right)$	Références
Electrolyte	$\sigma_{ele} = 3.34 \times 10^4 \exp(-10300/T)$	[11, 13]
Cathode	$\sigma_{cat} = \frac{4.2 \times 10^7}{T} \exp(-1200/T)$	[12]
Anode	$\sigma_{an} = \frac{9.5 \times 10^7}{T} \exp(-1150/T)$	[11, 12]
Interconnections	$\sigma_{intc} = \frac{9.3 \times 10^5}{T} \exp\left(-1100/T\right)$	[12, 13]

Tableau 2: Expressions de la conductivité électrique

La source de chaleur due aux pertes d'activation présente dans les deux électrodes est définie par le produit de la densité de courant et perte d'activation (équation 3).

$$S_{Act} = \eta_{Act,i} \tag{3}$$

La perte d'activation est donnée par l'équation suivante:

$$\eta_{Act,j} = \frac{R \cdot T}{\alpha.n.F} \times \sin h^{-1} \left(\frac{i}{i_{0,j}}\right), j = \text{ anode, cathode}$$
(4)

Où R est la constante des gaz parfaits, T est la température, n est le nombre des électrons de transfert, F est le nombre de Faraday, α est le coefficient de transfert électronique ou le coefficient de transfert des charges et i_0 est la densité de courant d'échange pour chaque électrode (anodique et cathodique), il est donné généralement par l'équation suivante.

$$i_{0,j} = k_j . \exp\left(-\frac{E_j}{R.T}\right), j = anode, cathode$$
 (5)

Où k_j et E_j représentent le facteur pré-exponentiel et l'énergie d'activation de chaque électrode qui sont définis respectivement par un polynôme de premier ordre en fonction de température et une constante. **Tableau 3**.

 Tableau 3: Valeurs et expressions du facteur pré exponentiel et de l'énergie d'activation

3. RESULTATS ET DISCUSSION

Les résultats montrant l'influence des différentes valeurs de température d'entrée des gaz sur les champs et les valeurs de la température dans une pile à combustible du type SOFC planaire sont obtenus en prenant les sources de chaleur ohmique et d'activation.

Les conductivités thermique et électrique de chaque composant de la cellule sont définies par les matériaux standards (NiYSZ), (YSZ), (LSM). La densité de courant imposée est égale à 20000 A/m² [16-18]. Les dimensions des éléments du cœur de la pile sont (0.5 mm pour l'anode, 0.05 mm pour la cathode et 0.04 mm pour l'interconnecteur).

La figure 2 montre le champ de température pour une pile à combustible SOFC planaire selon une température d'entrée des gaz de 673 K. La température maximale est localisée dans la partie inférieure de l'électrolyte à la sortie de la cellule. Une augmentation des valeurs de température est clairement remarquable de l'entrée vers la sortie de la cellule.

L'augmentation des valeurs de température est d'environ de 155.64 K, ce qui démontre un cas de production de chaleur. Aussi, les valeurs de température dans la partie anodique sont supérieures aux valeurs de température de la partie cathodique.



Fig. 2: Champ de température de la cellule à une température d'entrée des gaz de 673 K

La figure 3 montre le champ de température pour une pile à combustible SOFC planaire selon une température d'entrée des gaz de 873 K. La température maximale est localisée dans la partie inférieure de l'électrolyte qui avoisine la cathode à une distance presque d'un centimètre de l'entrée des gaz de la cellule.

Une augmentation des valeurs de température est remarqué dans le premier centimètre selon la direction des écoulements des deux gaz, ensuite une diminution des valeurs de température est produite sur le long de la cellule SOFC. L'augmentation des valeurs de température est d'environ de 6.37 K, ce qui représente un cas de légère production de chaleur.

Aussi, les valeurs de température dans la partie anodique sont supérieures aux valeurs de température de la partie cathodique.



Fig. 3: Champ de température de la cellule à une température d'entrée des gaz de 873 K

La figure 4 montre le champ de température pour une pile à combustible SOFC planaire selon une température d'entrée des gaz de 943 K. La température maximale est localisée à l'entrée de la cellule. Une diminution des valeurs de température est clairement remarquable de l'entrée vers la sortie de la cellule.

L'écart maximal des valeurs de température dans la pile est d'environ de 35.91 K. Aussi, les valeurs de température dans la partie anodique sont supérieures aux valeurs de température de la partie cathodique.



Fig. 4: Champ de température de la cellule à une température d'entrée des gaz de 943 K

La figure 5 montre l'évolution de la température maximale et l'écart maximal de la température dans la pile SOFC selon les différentes valeurs de température d'entrée des gaz aux canaux anodique et cathodique de la cellule. La température maximale est quasi-paraboliquement proportionnelle à la température d'entrée des gaz.

Au début de la courbe, l'écart maximal des valeurs de la température est décroissant quasi-paraboliquement, de la maximale entité d'environ 160 K à un écart de température de 5 K pour une température d'entrée des gaz de 873 K, ensuite, il devient croissant quasi-hyperboliquement.



Fig. 5: Effet de la température d'entrée des gaz sur la température maximale et l'écart des températures maximal dans la cellule SOFC

${f E}$, Energie d'activation, J.mol ⁻¹	i , Densité de courant, A.m ⁻²
${\bf K}$, Facteur pré-exponentiel, ${\rm A.m^2}$	\dot{i}_0 , Densité de courant d'échange, A.m ²
${f n}$, Nombre d'électron de transfert	${f R}$, Constante de gaz parfaits, kg.m ⁻¹ .s ⁻¹
σ , Conductivité électrique, $\Omega^{-1}.m^{-1}$ α , Coefficient de transfert électronique	λ , Conductivité thermique $~W.m^{-1}K^{-1}$ η , Perte de tension, V
${f S}$, Source de chaleur, W.m ³	T , Température, K
Act, Activation; an, Anode; car, Cathode	elec, Electrolyte; in, Intercon.; ohm, Ohmic

NOMENCLATURE

4. CONCLUSION

L'objectif du présent travail est d'étudier le phénomène de transfert de chaleur dans une cellule élémentaire d'une pile à combustible à oxyde solide du type SOFC planaire.

Les résultats sont obtenus à l'aide d'un programme en langage fortran développé localement, qui se base sur les démarches de modélisations des équations régissant le phénomène de transfert de chaleur à l'état d'équilibre dans un environnement tridimensionnel en utilisant la méthode des différences finies selon un schéma centré.

Les résultats obtenus montrent que les hautes températures sont localisées dans les emplacements de l'électrolyte les plus loin des canaux qui avoisinent la cathode pour la totalité des cas productifs et non productifs de chaleur.

La température maximale est proportionnelle à la température d'entrée des gaz. Le plus bas écart de valeurs de température enregistré est de cinq kelvins, qui est celui de la cellule alimenté par des gaz chauffés jusqu'aux 873 K.

REFERENCES

- [1] Y.P. Chyou, T.D. Chung, J.S. Chen and R.F. Shie, 'Integrated Thermal Engineering Analyses with Heat Transfer at Periphery of Planar Solid Oxide Fuel Cell', Journal of Power Sources, Vol. 139, pp 26 – 140, 2005.
- [2] Y. Inui, N. Ito, T. Nakajima and A. Urata, 'Analytical Investigation on Cell Temperature Control Method of Planar Solid Oxide Fuel Cell', Energy Conversion and Management, Vol. 47, pp. 2319 – 2328, 2006.

- [3] Y. Inui, A. Urata, N. Ito, T. Nakajima and T. Tanaka, 'Performance Simulation of Planar SOFC using Mixed Hydrogen and Carbon Mon/oxide Gases as Fuel', Energy Conversion and Management, Vol. 47 pp. 1738 – 1747, 2006.
- [4] T.X. Ho, P. Kosinski, A.C. Hoffmann and A. Vik, 'Numerical Analysis of a Planar Anode-Supported SOFC with Composite Electrodes', International Journal of Hydrogen Energy, Vol. 34, pp. 3488 – 3499, 2009.
- [5] Y. Dong, B. Zhu, F. Dawei, L. Jun, W. Xiaopeng, P. Jian, C. Bo, J. Li and Z. Yisheng, 'Feasibility study of an external manifold for planar intermediate-temperature solid oxide fuel cells stack', International Journal of Hydrogen Energy Vol. 38 pp. 660 - 666, 2013.
- [6] M. Peksen, A. Al-Masri, L. Blum and D. Stolten, '3D transient thermomechanical behaviour of a full scale SOFC short stack', International Journal of Hydrogen Energy Vol. 38, pp. 4099 - 4107, 2013.
- [7] P.A. Ramakrishna, S. Yang and C.H. Sohn, '*Innovative design to improve the power density of a solid oxide fuel cell*', Journal of Power Sources Vol. 158, pp. 378 384, 2006.
- [8] D.L. Damm and A.G. Fedorov, '*Reduced-order transient thermal modeling for SOFC heating and cooling*', Journal of Power Sources Vol. 159, pp. 956 -967, 2006.
- [9] R. Suwanwarangkul, E. Croiset, M.D. Pritzker, M.W. Fowler, P.L. Douglas and E. Entchev, 'Mechanistic Modeling of a Cathode-Supported Tubular Solid Oxide Fuel Cell', Journal of Power Sources, Vol. 154, pp. 74 – 85, 2006.
- [10] S. Kakaç, A. Pramuanjaroenkij and X.Y. Zhou, 'A Review of Numerical Modeling of Solid Oxide Fuel Cells', International Journal of Hydrogen Energy, Vol. 32, pp. 761 – 786, 2007.
- [11] A. Chaisantikulwat, C. Diaz-Goanon and E.S. Meadows, 'Dynamic Modeling and Control of Planar Anode-Supported Solid Oxide Fuel Cell', Computers and Chemical Engineering, Vol. 32, pp. 2365 – 2381, 2008.
- [12] X. Zhang, G. Li, J. Li and Z. Feng, 'Numerical Study on Electric Characteristics of Solid Oxide Fuel Cells', Energy Conversion and Management, Vol. 48, pp. 977 – 989, 2007.
- [13] Y. Sahli, B. Zitouni, H. Ben-Moussa and H. Abdenebi, 'Three-Dimensional Numerical Study of the Heat Transfer on the Planar Solid Oxide Fuel Cell: Joules Effect', In. I. Dincer, C. Ozgur Colpan, O. Kizilkan and M. Akif Ezan (eds), Progress in Clean Energy Vol. 1 I: Analysis and Modeling, Switzerland: Springer, pp. 449 – 461, 2015.
- [14] P. Tippawan and A. Arpornwichanop, 'Energy and Exergy Analysis of an Ethanol Reforming Process for Solid Oxide Fuel Cell Applications', Bioresource Technology, Vol. 157, pp. 231 – 239, 2014.
- [15] M. Andersson, H. Nakajima, T. Kitahara, A. Shimizu, T. Koshiyama, H. Paradis, J. Yuan and B. Sundén; 'Comparison of Humidified Hydrogen and Partly Pre-reformed Natural Gas as Fuel for Solid Oxide Fuel Cells Applying Computational Fluid Dynamics', International Journal of Heat and Mass Transfer, Vol. 77, pp. 1008 – 1022, 2014.
- [16] P. Aguiar, C.S. Adjiman and N.P. Brandon, 'Anode-Supported Intermediate Temperature Direct Internal Reforming Solid Oxide Fuel Cell', I: Model-Based Steady-State Performance', Journal of Power Sources, Vol. 138, pp. 120 – 136, 2004.
- [17] S. Wongchanapai, H. Iwai, M. Saito and H. Yoshida, 'Selection of Suitable Operating Conditions for Planar Anode-supported Direct-Internal-Reforming Solid-Oxide Fuel Cell', Journal of Power Sources, Vol. 204, pp. 14 – 24, 2012.
- [18] M. Ni, M.K.H. Leung and D.Y.C. Leung, 'Parametric Study of Solid Oxide Fuel Cell Performance', Energy Conversion and Management Vol. 48, pp. 1525 – 1535, 2007.