



Université de Batna 2 – Mostefa Ben Boulaïd
Faculté de Technologie
Département de Mécanique



Thèse

Préparée au sein du Laboratoire d'Etudes des Systèmes Energétiques Industriels

Présentée pour l'obtention du titre de :

Docteur en Sciences en Génie Mécanique

Option : Energétique

Sous le Thème :

**Contribution à l'étude numérique tridimensionnelle
des phénomènes de transfert de chaleur dans la pile
à combustible SOFC planaire**

Présentée par :

SAHLI YUCEF

Devant le jury composé de :

BOUGRIOU Chérif	Prof.	Université de Batna 2	Président
ZITOUNI Bariza	Prof.	Université de Batna 1	Rapporteur
BEN MOUSSA Hocine	Prof.	Université de Batna 2	Co-Rapporteur
MADANI Hakim	MCA	Université de Batna 2	Examineur
BRIMA Abdelhafidh	Prof.	Université de Batna 2	Examineur
ADOUANE Belkacem	Prof.	Université de Batna 1	Examineur

Janvier 2019

Je dédie ce travail :
A ma petite et grande famille
A tous mes amis et collègues
A tous ceux qui m'ont aidé à finir
ce travail.

SAHLI Youcef

Remerciements

Au nom de Dieu le miséricordieux par essence et par excellence.

Tout d'abord, je remercie Dieu tout puissant pour tout ce qu'il m'a donné.

Je tiens à remercier vivement le Professeur **ZITOUNI Bariza** du département de technologie alimentaire de l' institut des sciences vétérinaires et des sciences agronomiques de l'université de Batna 1 pour l'encadrement de ce travail, pour la qualité de sujet, pour m'avoir transmis ses connaissances scientifiques, pour ses conseils et son énorme aide.

Je voudrais également remercier le Professeur **BEN MOUSSA Hocine**, co-encadrant de la thèse, directeur du laboratoire **LESEI** (Laboratoire d'Etudes des Systèmes Energétiques Industriels) du département de mécanique de la faculté de technologie de l'université de Batna 2, pour la confiance et l'encadrement de ce travail, pour ses conseils, pour m'avoir transmis ses connaissances scientifiques, son aide essentielle et ses nombreuses qualités humaines.

Je remercie également les Professeurs et les Maîtres de conférences membres du jury qui m'ont fait l'honneur d'apporter leur jugement critique sur cette étude : Monsieur **BOUGRIOU Chérif** Professeur du département de mécanique de la faculté de technologie de l'université de Batna 2, président du jury. Messieurs **MADANI Hakim** Maître de Conférence classe A du département de mécanique de la faculté de technologie de l'université de Batna 2, **BRIMA Abdelhafidh** Professeur du département de mécanique de la faculté de technologie de l'université de Batna 2 et **ADOUANE Belkacem** Professeur du département de physique de l'université de Batna 1 examinateurs de ce travail.

Egalement, je remercie tous les membres de l'équipe des piles à combustible du laboratoire **LESEI**.

De même, je remercie tous les chercheurs de l'Unité de **Recherche en Energies Renouvelables en Milieu Saharien (URERMS)** pour leur soutien inestimable dans tous les aspects de ma vie et en particulier la conviction de mon potentiel en tant que chercheur, même dans les moments les plus difficiles de ma carrière.

Enfin, je remercie toute personne ayant contribué de près ou de loin à l'élaboration de ce travail.

SAHLI Youcef

Nomenclatures

paramètres	Signification	Unité
ρ	Masse volumique	kg / m^3
Δx	Pas suivant l'axe (X)	μm
Δy	Pas suivant l'axe (Y)	μm
Δz	Pas suivant l'axe (Z)	μm
σ	Conductivité électrique	$\Omega^{-1} m^{-1}$
λ	Conductivité thermique	$W / m.K$
C_p	Chaleur massique	$J / Kg.K$
E	Potentiel idéal d'une cellule	V
E^0	Potentiel standard	V
E_{nemst}	Potentiel de Nernst	V
F	Constante de Faraday	C / mol
i	Densité de courant	A / m^2
L_x	Largeur de la cellule suivant l'axe (X)	μm
L_y	Epaisseur de la cellule suivant l'axe (Y)	μm
L_z	Longueur de la cellule suivant l'axe (Z)	μm
n	Nombre des électrons	/
P	Pression	bar
R	Constante universel du gaz	$J / mol.K$
S	Source thermique	W / m^3
S_{act}	Source d'activation	W / m^3
S_{conc}	Source de concentration	W / m^3
S_{elec}	Source électrochimique	W / m^3
$S_{ohm, an}$	Source ohmique dans l'anode	W / m^3
$S_{ohm, cat}$	Source ohmique dans la cathode	W / m^3
$S_{ohm, elec}$	Source ohmique dans l'électrolyte	W / m^3
$S_{ohm, inter}$	Source ohmique dans l'interconnecteur	W / m^3
T	Température	K
t	Temps	s
W_{el}	Travail électrique maximal	J / mol

indices	Signification
an	anode
cat	cathode
élec	électrolyte
inter	interconnecteur
ohm	ohmique
act	activation
conc	concentration
H_2O	Vapeur d'eau
O_2	oxygène
H_2	Hydrogène
max	maximale
min	minimale

Liste des figures

- Fig. I.1** Principe de fonctionnement de la pile à combustible SOFC.
- Fig. I.2** Différence entre les modèles utilisés pour le calcul du potentiel idéal.
- Fig. I.3** Comparaison entre le modèle Butler-Volmer et le modèle de Tafel en fonction de i_0 .
- Fig. I.4** Comparaison entre le modèle Butler-Volmer et le modèle de Tafel en fonction de i .
- Fig. I.5** Comparaison entre le modèle Butler-Volmer et le modèle de Tafel en fonction de température de fonctionnement.
- Fig. II.1** Algorithme de programme 0D.
- Fig. II.2** Schéma d'une pile SOFC planaire.
- Fig. II.3** Schéma d'un étage de cellules.
- Fig. II.4** Schéma d'une cellule.
- Fig. II.5** Conditions aux limites de la cellule élémentaire.
- Fig. II.6** Volume de contrôle.
- Fig. II.7** Volume de contrôle des interfaces interconnecteur/électrode/électrolyte.
- Fig. II.8** Volume de contrôle des conditions aux limites type Neumann.
- Fig. II.9** Configurations et dimensions du domaine de calcul. a) Répétitions des étages, b) symétrie des étage, c) Dimensions du domaine de calcul.
- Fig. II.10** Schéma des démarches de résolution.
- Fig. II.11** Organigramme de la méthode.
- Fig. III.1** Courbe de polarisation, de potentiel et de la densité de puissance de la pile SOFC.
- Fig. III.2** Evolution de potentiel et de la densité de puissance selon la température de fonctionnement.
- Fig. III.3** Evolution de potentiel et de la densité de puissance selon la pression de fonctionnement.
- Fig. III.4** Evolution de potentiel et de la densité de puissance selon la concentration de l'eau et de l'oxygène. a) concentration de la vapeur d'eau dans le carburant, b) taux d'oxygène dans le comburant.
- Fig. III.5** Evolution de potentiel et de la densité de puissance selon l'épaisseur de l'électrolyte.
- Fig. III.6** Evolution de potentiel et de la densité de puissance selon l'épaisseur de l'anode.
- Fig. III.7** Evolution de potentiel et de la densité de puissance selon l'épaisseur de la cathode.
- Fig. III.8** Champs de température de la cellule pour la même température d'entrée des gaz selon une configuration symétrique : a) 673 K, b) 873 K et c) 923 K.
- Fig. III.9** Champs de température de la cellule selon une symétrie des étages pour différentes températures d'entrée des gaz (hydrogène/air) : a) 673/873 K, b) 773/873 K et c) 823/873 K.
- Fig. III.10** Champs de température de la cellule selon une configuration symétrique pour une densité de courant : a) 15000 A.m⁻², b) 20000 A.m⁻² et c) 25000 A.m⁻².
- Fig. III.11** Champs de température de la cellule selon une configuration symétrique pour une épaisseur d'électrolyte : a) 20 μm, b) 40 μm et c) 60 μm.
- Fig. III.12** Champs de température de la cellule selon une répétition des étages à une température d'entrée des gaz : a) 673 K, b) 873 K et c) 923 K.
- Fig. III.13** Champs de température de la cellule selon une répétition des étages pour différentes températures d'entrée des gaz (hydrogène/air) : a) 673/873 K, b) 773/873 K et c) 823/873 K.
- Fig. III.14** Champs de température de la cellule selon une répétition des étages pour une densité de courant : 15000 A.m⁻², 20000 A.m⁻² et 25000 A.m⁻².
- Fig. III.15** Champs de température de la cellule selon une répétition des étages pour les épaisseurs d'électrolyte de a) 20, b) 40 et c) 60 μm.
- Fig. III.16** Evolution de la température du milieu de l'électrolyte suivant l'axe (OY); pour une même température d'entrée des gaz. a) 673 K, b) 873 K et c) 923 K.
- Fig. III.17** Effet de la température d'entrée des gaz sur l'écart maximal des températures dans la cellule SOFC.

- Fig. III.18** Evolution de la température du milieu de l'électrolyte suivant l'axe (OY) ; pour différentes température d'entrée des gaz : a) 673/873 K, b) 773/873 K et c) 823/873 K.
- Fig. III.19** Evolution de la température du milieu de l'électrolyte suivant l'axe (OY) selon la densité de courant. a) 15000 A.m⁻², b) 20000 A.m⁻² et c) 25000 A.m⁻².
- Fig. III.20** Evolution de l'écart maximal des températures dans la cellule SOFC selon la densité de courant.
- Fig. III.21** Evolution de la température du milieu de l'électrolyte suivant l'axe (OY) selon l'épaisseur de l'électrolyte. a) 20 μm, b) 40 μm et c) 60 μm.
- Fig. III.22** Evolution de l'écart maximal des températures dans la cellule SOFC selon l'épaisseur de l'électrolyte.
- Fig. III.23** Champs de température de la section transversale à la sortie de la SOFC en présence des différents types de sources de chaleur. a) , g) et m) sans source de chaleur, b), h) et n) source de concentration, c), i) et o) source d'activation, d), j) et p) source ohmique, e), k) et q) source électrochimique, f), l) et r) source totale. A-f) T=773 K, g-l) T=873 K, m-r) T=943 K.
- Fig. III.24** Champs de température de la section longitudinale au milieu de la SOFC en présence des différents types de sources de chaleur. a) , g) et m) sans source de chaleur, b), h) et n) source de concentration, c), i) et o) source d'activation, d), j) et p) source ohmique, e), k) et q) source électrochimique, f), l) et r) source totale. A-f) T=773 K, g-l) T=873 K, m-r) T=943 K.
- Fig. III.25** Champs de température volumique de la cellule SOFC en présence des différents types de sources de chaleur. a) , g) et m) sans source de chaleur, b), h) et n) source de concentration, c), i) et o) source d'activation, d), j) et p) source ohmique, e), k) et q) source électrochimique, f), l) et r) source totale. A-f) T=773 K, g-l) T=873 K, m-r) T=943 K.
- Fig. III.26** Champs de température de la section transversale à la sortie de la SOFC en présence des différents types de sources de chaleur. a) , g) et m) sans source de chaleur, b), h) et n) source de concentration, c), i) et o) source d'activation, d), j) et p) source ohmique, e), k) et q) source électrochimique, f), l) et r) source totale. A-f) i=15000 A/m², g-l) i=18000 A/m², m-r) i=21000 A/m².
- Fig. III.27** Champs de température de la section longitudinale au milieu de la SOFC en présence des différents types de sources de chaleur. a) , g) et m) sans source de chaleur, b), h) et n) source de concentration, c), i) et o) source d'activation, d), j) et p) source ohmique, e), k) et q) source électrochimique, f), l) et r) source totale. A-f) i=15000 A/m², g-l) i=18000 A/m², m-r) i=21000 A/m².
- Fig. III.28** Champs de température volumique de la cellule SOFC en présence des différents types de sources de chaleur. a) , g) et m) sans source de chaleur, b), h) et n) source de concentration, c), i) et o) source d'activation, d), j) et p) source ohmique, e), k) et q) source électrochimique, f), l) et r) source totale. A-f) i=15000 A/m², g-l) i=18000 A/m², m-r) i=21000 A/m².
- Fig. III.29** Champs de température de la section transversale à la sortie de la SOFC en présence des différents types de sources de chaleur. a) , g) et m) sans source de chaleur, b), h) et n) source de concentration, c), i) et o) source d'activation, d), j) et p) source ohmique, e), k) et q) source électrochimique, f), l) et r) source totale. A-f) e_{élec}=20 μm, g-l) e_{élec}=40 μm, m-r) e_{élec}=60 μm.
- Fig. III.30** Champs de température de la section longitudinale au milieu de la SOFC en présence des différents types de sources de chaleur. a) , g) et m) sans source de chaleur, b), h) et n) source de concentration, c), i) et o) source d'activation, d), j) et p) source ohmique, e), k) et q) source électrochimique, f), l) et r) source totale. A-f) e_{élec}=20 μm, g-l) e_{élec}=40 μm, m-r) e_{élec}=60 μm.

Fig. III.31 Champs de température volumique de la cellule SOFC en présence des différents types de sources de chaleur. a) , g) et m) sans source de chaleur, b), h) et n) source de concentration, c), i) et o) source d'activation, d), j) et p) source ohmique, e), k) et q) source électrochimique, f), l) et r) source totale. A-f) $e_{elec}=20 \mu\text{m}$, g-l) $e_{elec}=40 \mu\text{m}$, m-r) $e_{elec}=60 \mu\text{m}$.

Liste des tableaux

Tableau I.1	Coefficients a et b utilisés pour le calcul du potentiel idéal.
Tableau I.2	Constantes utilisées pour le calcul des chaleurs spécifiques.
Tableau I.3	Constantes empirique a_i et b_i de chaque espèce.
Tableau I.4	Enthalpie et entropie de chaque espèce.
Tableau I.5	Conductivité électrique de chaque composant de la pile SOFC.
Tableau I.6	Valeur de la densité de courant d'échange i_0 .
Tableau I.7	Valeurs et expressions du facteur pré-exponentiel et de l'énergie d'activation.
Tableau I.8	Expressions et valeurs de facteur pré-exponentiel, l'énergie d'activation et de la constante m.
Tableau I.9	Valeurs de courant limite dans chaque électrode.
Tableau I.10	Expressions de la conductivité électrique.
Tableau II.1	Coefficients a et b utilisés pour le calcul du potentiel idéal.
Tableau II.2	Conductivité électrique de chaque composant de la pile SOFC.
Tableau II.3	Valeurs et expressions du facteur pré-exponentiel et de l'énergie d'activation.
Tableau II.4	Valeurs du courant limite dans chaque électrode.
Tableau II.5	Entropie et enthalpie de la vapeur d'eau, d'hydrogène et d'oxygène.
Tableau II.6	Constantes empirique a_i et b_i de chaque espèce.
Tableau II.7	Expressions de la conductivité électrique.
Tableau II.8	Conditions aux limites.
Tableau II.9	Expressions des conductivités électriques modélisées.
Tableau II.10	Valeurs des conductivités thermiques.

Tables de matières

Dédicace	
Remerciement	
Nomenclature	
Liste des figures	
Liste des tableaux	
Tables de matières	
Liste des travaux scientifiques effectués durant la période d'inscription	
Introduction générale	-1-

Chapitre I Etude bibliographique

Introduction	-4-
I.1.Principe de fonctionnement	-4-
I.2.Performances des piles à combustible SOFC	-5-
I.2.1.Tension réelle	-5-
I.2.2.Potentiel de Nernst	-6-
I.2.3.Surtension Ohmique	-10-
I.2.4.Surtension d'activation	-11-
I.2.5.Surtension de concentration	-16-
I.3.Modélisations des phénomènes de transfert de chaleur dans les SOFC	-20-
I.3.1.Modélisations unidimensionnelles des phénomènes de transfert de chaleur	-20-
I.3.2.Modélisations bidimensionnelles des phénomènes de transfert de chaleur	-24-
I.3.3.Modélisations tridimensionnelles des phénomènes de transfert de chaleur	-27-

Chapitre II Modélisations mathématiques

Introduction	-39-
II.1.Modélisation thermodynamique des piles à combustibles SOFC	-39-
II.1.1.Performance des piles à combustible	-39-
II.1.2.Surtension Ohmique	-40-
II.1.3.Surtension d'activation	-40-
II.1.4.Surtension de concentration	-41-
II.1.5.Densité de puissance	-42-
II.1.6.Structure du programme	-42-
II.2.Modélisation thermique des piles à combustible SOFC	-44-
II.2.1.Domaine de calcul	-44-
II.2.2.Hypothèses simplificatrices	-44-
II.2.3.Equations régissant le phénomène du transfert thermique	-45-
II.2.4.Conductivité électrique	-51-
II.2.5.Conditions aux limites	-52-
II.2.6.Discrétisation des équations	-53-
II.2.7.Résolution du système d'équations	-60-
II.2.8.Données utilisées dans le calcul	-63-
II.2.9.Structure de programme	-64-

Chapitre III

Résultats et interprétations

Introduction	-66-
III.1. Thermodynamique des piles à combustibles SOFC	-66-
III.1.1. Effet de différents types de polarisation sur la performance de la SOFC	-66-
III.1.2. Effet de la température de fonctionnement sur la performance de la SOFC	-67-
III.1.3. Effet de la pression de fonctionnement sur la performance de la SOFC	-69-
III.1.4. Effet des concentrations d'eau et d'oxygène sur la performance de la SOFC	-70-
III.1.5. Effet de l'épaisseur de l'électrolyte sur la performance de la SOFC	-71-
III.1.6. Effet de l'épaisseur de l'anode sur la performance de la SOFC	-72-
III.1.7. Effet de l'épaisseur de la cathode sur la performance de la SOFC	-73-
III.2. Champs thermique 3D de la SOFC pour les configurations symétrique et répétition des étages de cellules	-74-
III.2.1. Champs de température pour une symétrie des étages de cellules	-75-
III.2.1.1. Effet de la température d'entrée des gaz	-75-
III.2.1.2. Effet de la densité de courant	-78-
III.2.1.3. Effet de l'épaisseur de l'électrolyte	-82-
III.2.2. Champs de température pour une répétition des étages de cellules	-84-
III.2.2.1. Effet de la température d'entrée des gaz	-84-
III.2.2.2. Effet de la densité de courant	-88-
III.2.2.3. Effet de l'épaisseur de l'électrolyte	-90-
III.2.3. Comparaison entre la répétition et la symétrie des étages de cellules	-92-
III.2.3.1. Température d'entrée des gaz	-92-
III.2.3.2. Densité de courant	-97-
III.2.3.3. Épaisseur de l'électrolyte	-99-
III.2.4. Influence de différents types de source de chaleur sur les champs 3D de la température	-101-
III.2.4.1. Température d'entrée des gaz	-102-
III.2.4.2. Densité de courant	-103-
III.2.4.3. Épaisseur de l'électrolyte	-108-
Conclusion générale	-117-
Références bibliographiques	-120-
Annexe	
Résumé	

**TRAVAUX
SCIENTIFIQUES
EFFECTUES DURANT LA
PERIODE D'INSCRIPTION**

Liste des travaux scientifiques effectués durant la période d'inscription

Communications nationales:

SAHLI Youcef, ZITOUNI Bariza, BEN MOUSSA Hocine. Etude Numérique Bidimensionnelle de l'Effet de la Température d'Entrée des Gaz sur la Production de Chaleur Due à l'Effet du Joule dans une Pile à Combustible SOFC Planaire. *3^{èmes} Journées d'Etudes Nationales de Mécanique, JENM'2015, 21-22 Avril 2015, Ouargla, Algérie.*

MHIRA Ali, ZITOUNI Bariza, BEN MOUSSA Houcine, **SAHLI Youcef**. Utilisation du Matlab dans le calcul des champs thermiques dans une pile à combustible SOFC. *2^{èmes} Journée d'Etudes des Jeunes Scientifiques 2JEJS' 2015, 24 et 25 Mai, Batna, Algerie.*

Communications internationales:

SAHLI Youcef, ZITOUNI Bariza, BEN MOUSSA Hocine. Optimization Study of the Produced Electric Power by SOFCs. International symposium on sustainable hydrogen 2017 / 26-27, 2017 November, Algies, Algeria.

SAHLI Youcef, ZITOUNI Bariza, BEN MOUSSA Hocine. 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. *International Symposium on Sustainable Hydrogen ISSH2'2016, 05-06, 2016 October, Algiers– Algeria.*

SAHLI Youcef, ZITOUNI Bariza, ZITOUNI Hadda, BEN MOUSSA Hocine, ABDENEBI Hafsia. Three-dimensional analysis of the heat production in a planar SOFC fuel cell (Joules effect). *8th International Conference on Thermal Engineering: Theory and Applications, May 18-21, 2015, Amman-Jordan.*

HALITIM Siham Houria, ZITOUNI Bariza, HADDAD Djamel, **SAHLI Youcef**, MEHIRA Ali, BEN MOUSSA Hocine. Numerical study of thermal fields in a DMFC fuel cell: Effect of Heat Sources. *3^{ème} Conférence Internationale des Energies Renouvelables (CIER-2015), 21-23, 2015 Décembre, Sousse – Tunisie.*

SAHLI Youcef, BEN MOUSSA Hocine, HADDAD Djamel, ZITOUNI Bariza, ABDESSEMED Soumia, SAIGHI Slimane, ABDENEBI Hafsia. Three-dimensional numerical study of the heat transfer on the planar SOFC fuel cell: joules effect. *13th International Conference on Clean Energy*, June 08-12, 2014, Istanbul, Turkey.

SAHLI Youcef, ZITOUNI Bariza, BEN MOUSSA Hocine. Etude Numérique Bidimensionnelle du Phénomène Thermique dans une Pile à Combustible de Type SOFC Planaire: Effet des Dimensions des Canaux. *2^{eme} Conférence Internationale Sur L'énergétique Appliquée Et La Pollution (CIEAP'2014)*, 14-15, 2014 Décembre, Constantine, Algérie.

SAIGHI Slimane, **SAHLI Youcef**, ZITOUNI Bariza, BENMOUSSA Houcine, A. Mhira. Modélisation numérique des phénomènes de transfert de chaleur et de masse dans une cellule SOFC. *2^{eme} Conférence Internationale Sur L'énergétique Appliquée Et La Pollution (CIEAP'2014)*, 14-15, 2014 Décembre, Constantine, Algérie.

ABDENEBI Hafsia, ZITOUNI Bariza, BEN MOUSSA Hocine, HADDAD Djamel, ZITOUNI Hadda, **SAHLI Youcef**. Inlet Methane Temperature Effect at a Planar SOFC Thermal Field Under Direct Internal Reforming Condition. *13th International Conference on Clean Energy*, June 08-12, 2014, Istanbul, Turkey.

HADDAD Djamel, OULMI Kafia, BEN MOUSSA Hocine, AOUACHRIA Zeroual, **SAHLI Youcef**. Modeling of Heat Transfer in the PEMFC: Velocity Inlet and Current Density Effect. *13th International Conference on Clean Energy*, June 08-12, 2014, Istanbul, Turkey.

Book-Chapters:

SAHLI Youcef, ZITOUNI Bariza, BEN MOUSSA Hocine, and ABDENEBI Hafsia. Three-Dimensional Numerical Study of the Heat Transfer on The Planar Solid Oxide Fuel Cell: Joules Effect. **Springer International Publishing Switzerland 2015. Progress in Clean Energy, volume 1**, I. Dincer et al. (eds.) / DOI 10.1007/978-3-319-16709-1_32.

HADDAD Djamel, OULMI Kafia, BEN MOUSSA Hocine, AOUACHRIA Zeroual, and **SAHLI Youcef**. Modeling of Heat Transfer in the PEMFC: Velocity Inlet and Current Density Effect. **Springer International Publishing Switzerland 2015. Progress in Clean Energy, volume 1**, I. Dincer et al. (eds.) / DOI 10.1007/978-3-319-16709-1_33.

ABDENEBI Hafsia, ZITOUNI Bariza, BEN MOUSSA Hocine, HADDAD Djamel, ZITOUNI Hadda, and SAHLI Youcef. Inlet Methane Temperature Effect at a Planar SOFC Thermal Field Under Direct Internal Reforming Condition. **Springer International Publishing Switzerland 2015. Progress in Clean Energy, volume 2**, I. Dincer et al. (eds.) / DOI 10.1007/978-3-319-17031-2_41.

Publications:

SAHLI Youcef, BEN MOUSSA Hocine, ZITOUNI Bariza. Optimization Study of the Produced Electric Power by SOFCs. **International Journal of Hydrogen Energy xxx (2018) 1-10. In press.** <http://dx.doi.org/10.1016/j.ijhydene.2018.08.162>.

SAHLI Youcef, ZITOUNI Bariza, BEN MOUSSA Hocine. Thermodynamic optimization of the solid oxide fuel cell electric power. **University Politehnica of Bucharest Scientific Bulletin Series B- Chemistry and Materials Science 80 (2018) 159-170.**

SAHLI Youcef, ZITOUNI Bariza, BEN MOUSSA Hocine. 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. **Revue des Energies Renouvelables 21 (2018) 173-180.**

SAHLI Youcef, ZITOUNI Bariza, BEN MOUSSA Hocine. Solid Oxide Fuel Cell Thermodynamic Study. **Çankaya University Journal of Science and Engineering 14 (2017) 134-151.**

TAMERABET Monsaf, BEN MOUSSA Hocine, SAHLI Youcef, MOHAMMEDI Abdallah. Unsteady three-dimensional numerical study of mass transfer in PEM fuel cell with spiral flow field. **International Journal of Hydrogen Energy 42 (2017) 1237-1251.** <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2016.12.084>.

Introduction générale

Depuis la connaissance de l'énergie, l'humanité s'appuie proportionnellement sur leur utilisation. Actuellement, la production d'énergie à partir des hydrocarbures est le moyen de production le plus utilisé dans le monde, ce qui est dû essentiellement à leur disponibilité et leur coût de production. Mais les hydrocarbures ne sont pas inépuisables, ce qui provoque une instabilité de leur coût et pose plusieurs questions (post-hydrocarbure, post-pétrole...etc.), ces hydrocarbures sont aussi les majeurs responsables de la pollution écologique actuelle, ce qui conduit à la recherche d'une ou plusieurs sources alternatives.

Les centrales nucléaires de production d'électricité sont connues par leurs impacts environnementaux (déchets, rejets d'effluents radioactifs et chimiques, rejets thermiques, prélèvements d'eau) et leurs catastrophes qui en découlent (incendie de Windscale, Royaume-Uni en 1957 ; fusion du cœur à la centrale de Lucens, Suisse en 1969 ; fusion partielle de réacteur A1 de la centrale du Saint-Laurent, France en 1969 ; accident de Three Mile Island, États-Unis en 1979 ; fusion partielle du réacteur A2 de la centrale du Saint-Laurent, France en 1980 ; catastrophe de Tchernobyl, Ukraine en 1986 et l'accident de Fukushima, Japon en 2011).

Le vent, le soleil, l'eau et les biocarburants sont des alternatifs énergétiques envisageables, ces ressources sont naturelles et capables de générer de l'énergie. Le vent brassant les pales d'une éolienne, la lumière solaire excitant les photovoltaïques et les photo-thermiques, l'eau chaude des profondeurs est utilisée par la géothermie, quant aux biocarburants sont considérés comme combustibles. Ces techniques sont souvent utilisées à petite échelle et nécessitent un environnement spécifique pour fonctionner. L'inconvénient majeur de la production de l'énergie électrique utilisant des éoliennes est la discontinuité de la production en électricité, à savoir, une vitesse de vent inférieure à la vitesse de démarrage, une vitesse de vent supérieure à la vitesse d'arrêt d'éolienne, une température qui n'appartient pas à la plage des températures de fonctionnement. La production de l'énergie électrique utilisant les cellules photovoltaïques est l'une des méthodes la plus utilisée dans la pratique des énergies renouvelables. Les principaux inconvénients de cette technologie sont : la non productivité durant la période nocturne, la faible productivité de l'énergie électrique due aux conditions climatiques, le grand coût de stockage et la grande surface nécessaire pour l'exploitation.

Contrairement aux sources citées au-dessus, les piles à combustible sont adaptables à tout environnement, du milieu citadin jusqu'au milieu désertique, elles sont indépendantes aux conditions climatiques, possèdent un grand rendement, une continuité de production, elles ne demandent que peu d'entretiens, elles n'occupent pas de grands espaces, n'émettent aucun bruit,

possèdent une acceptabilité de fonctionner par plusieurs combustibles (hydrogène, gaz naturel et biogaz) et permettent une facilité de combinaison avec des batteries.

Le défi actuel des scientifiques dans le domaine des piles à combustible est de diminuer le coût de production en réduisant le coût de fabrication, d'améliorer le rendement énergétique et d'augmenter la durée de vie des piles à combustible. Les piles à électrolyte solide (SOFC: Solid Oxide Fuel Cell) représentent l'une des technologies de conversion sérieusement envisagée. Les SOFC se caractérisent par leurs hautes températures de fonctionnement, ces températures sont responsables du vieillissement prématuré des matériaux utilisés dans la construction des composants.

Les recherches se sont donc orientées vers l'amélioration du rendement et la réduction de la température de fonctionnement pour augmenter la durée de vie, ralentir la dégradation des matériaux et de permettre l'utilisation d'autres matériaux qui sont moins chers par-rapport aux matériaux déjà fonctionnels afin de réduire le coût de fabrication.

En continuité des travaux réalisés dans le cadre du mémoire de fin d'études d'ingénieur en mécanique option énergétique que j'ai présenté durant l'année universitaire 2007/2008 à l'université de Hadj Lakhdar, Batna, du mémoire de fin d'études de magistère en mécanique option énergétique que j'ai présenté durant l'année 2013 à l'université de Hadj Lakhdar, Batna, ainsi que les travaux de recherches scientifiques effectués par notre groupe concernant les piles à combustible à oxyde solide. Le but de ce travail alors est d'étudier le comportement thermodynamique des SOFC et d'analyser les champs tridimensionnels dans une cellule SOFC pour établir le comportement de la température avec les différents paramètres. La distribution de la température est déterminée en tenant compte des deux plus grandes sources de chaleur (source ohmique et d'activation).

A cet effet, la présente thèse de doctorat est composée de trois chapitres, le premier chapitre présente le modèle thermodynamique d'une pile à combustible du type SOFC et une étude bibliographique sur les différents paramètres géométriques, physiques et électrochimiques, etc... Quant au deuxième chapitre, il est consacré à la représentation de deux modèles, le premier est un modèle thermodynamique de la pile SOFC et le deuxième concerne un modèle numérique tridimensionnel de transfert de chaleur dans les SOFC planaire et leur résolution par la méthode des différences finies dans le cas stationnaire.

Le troisième chapitre regroupe les résultats obtenus par les deux modèles (0D et 3D) et leurs interprétations. Dans le modèle 0D, l'effet de chaque polarisation sur le potentiel réel et la densité de courant est présenté, ensuite, les effets de la température, de la pression, de la

concentration de l'eau et de l'oxygène, des épaisseurs de l'électrolyte de l'anode et de la cathode sur le potentiel réel et la densité de courant sont exposés. Pour le modèle 3D, les champs de température sont discutés suivant quatre classes, à savoir : les paramètres physiques qui admettent la température d'entrée des gaz en premier lieu et la densité du courant en deuxième lieu et les paramètres géométriques qui comportent l'épaisseur de l'électrolyte en troisième lieu pour deux types de configurations géométriques (répétition ou symétrie des étages de cellules). En dernier lieu, l'impact de chaque type de source de chaleur (ohmique, activation, concentration et électrochimique) sur la distribution et les valeurs extrêmes de température est démontré suivant les plans parallèles, perpendiculaires et volumiques de la SOFC, et enfin, on termine la présente thèse par une conclusion.

Chapitre I

Etude bibliographique

Introduction

Les piles à combustible sont les dispositifs de conversion d'énergie chimique en énergie électrique électro-chimiquement, elles permettent de produire de l'énergie électrique par un moyen radicalement différent des systèmes de production classiques et conventionnels. Théoriquement, les piles à combustible sont non polluantes, elles produisent de l'électricité, de l'eau et de la chaleur en même temps. Ces piles sont une technologie jugée prometteuse, car leur grand rendement global fourni et l'aptitude de fonctionnement par plusieurs combustibles [1]. L'objectif du présent chapitre est la présentation générale des piles à combustible à oxyde solide (SOFC) et de donner une plateforme sur les différents modèles thermodynamiques et thermiques.

Le chapitre consacré à cette étude est constitué de trois parties, la première partie concerne la présentation des généralités sur la pile à combustible à oxyde solide SOFC (principe de fonctionnement de la pile à combustible à oxyde solide SOFC). La deuxième partie, représente une étude bibliographique sur la modélisation thermodynamique des phénomènes intervenants dans le fonctionnement des piles à combustible de type SOFC. Enfin, la troisième partie concerne une autre étude bibliographique sur les modélisations des phénomènes de génération et de transfert de chaleur dans les piles à combustible à oxyde solide SOFC.

I.1.Principe de fonctionnement

Le principe de fonctionnement de la pile à combustible est l'inverse de l'électrolyseur de l'eau, c'est-à-dire, la pile à combustible utilise le processus de conversion d'énergie chimique en énergie électrique. Autrement dit, la pile à combustible permet de transformer l'enthalpie libre de la réaction d'oxydation en énergie électrique. En général, l'hydrogène est le combustible des piles à combustibles, les molécules de l'hydrogène se combinent avec les molécules de dioxygène pour donner naissance à des molécules d'eau selon la réaction chimique universelle. (I.1).



La pile à combustible est composée de séries de cellules élémentaires formant un étage de cellule, ces étages sont empilées pour réaliser un module de puissance « stacks », l'assemblage de cellules élémentaires résulté doit être en nombre suffisant pour assurer une production de puissance électrique souhaitable dans des conditions de tension et courant désirés. La cellule élémentaire est constituée de trois principaux éléments : l'anode, l'électrolyte

et la cathode qui sont sandwichés où assemblés respectivement assurant une séparation des deux électrodes (anode et cathode) par l'électrolyte.

De façon générale, l'anode est le lieu d'atterrissage de l'espèce réductrice (carburant) et la cathode est le site d'atterrissage du comburant (air ou oxygène). Dans le cas des piles à combustible à électrolyte solide SOFC, le comburant traverse l'électrolyte pour assurer la réaction avec le carburant, c'est à dire, l'oxygène doit être réduit pour donner naissance aux ions O^{2-} qui traversent par la suite le conducteur ionique (électrolyte) (I.2). Les ions O^{2-} produits émigrent de la cathode vers l'anode traversant l'électrolyte pour accomplir l'oxydation du combustible dans l'anode et assurer la production de l'électricité, de l'eau et de la chaleur (I.3). Le courant produit est collecté par l'interconnecteur. Le principe de fonctionnement de la pile à combustible à oxyde solide est schématisé dans la **Figure I.1**.

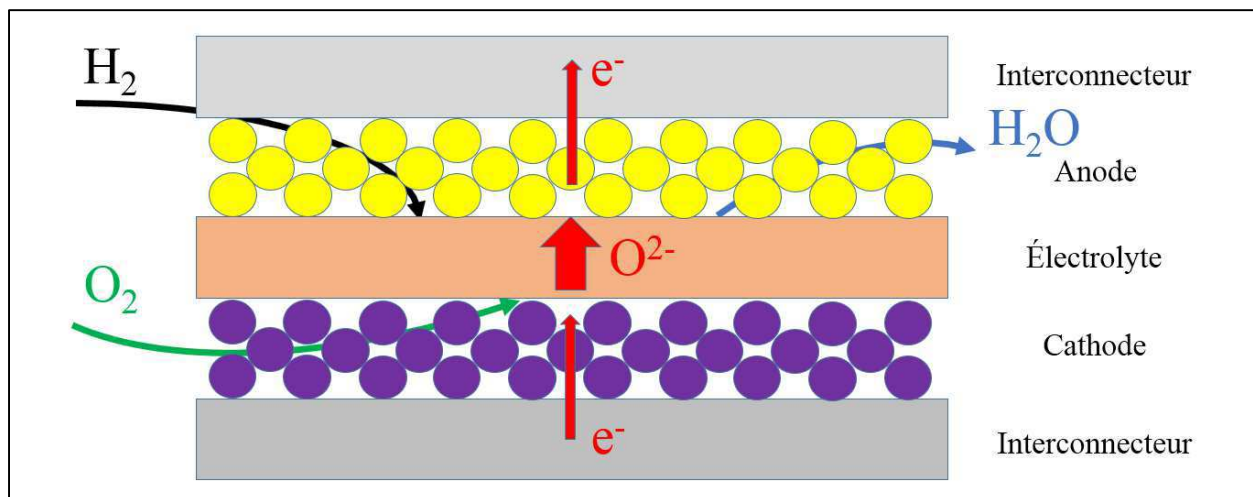


Fig.I.1. Principe de fonctionnement de la pile à combustible SOFC.

I.2. Performances des piles à combustible SOFC

I.2.1. Tension réelle

La tension réelle de la pile SOFC est la résultante de l'irréversibilité de la procédure de conversion, elle est traduite par la différence entre la tension réversible ou idéale et la tension équivalente à la quantité de chaleur dégagée par le système, autrement dit, elle est définie par la différence entre la tension théorique de Nernst et la totalité des pertes de tension qui sont dues principalement aux trois surtensions (ohmique, d'activation et de concentration). Pratiquement la tension réelle d'une cellule est de 0.7 V. Elle est influencée par plusieurs

paramètres tels que : les configurations géométriques (la conception géométrique 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.), les caractéristiques physiologiques de chaque partie (nature de carburant et comburant, matériaux de construction de chaque composant, porosité et perméabilité des électrodes, résistivité, etc.) et la fiabilité de système (utilisation des réactifs, densité du courant produit, impureté des gaz, vieillissement, etc.).

La tension réelle de la pile (V) est définie par l'Eq (I.4), où E_{Nernst} est le potentiel de Nernst et Pertes représente la totalité des pertes de tension qui sont essentiellement représentées par la sommes des trois pertes, ohmique, activation et concentration.

$$V = E_{Nernst} - Pertes \quad (I.4)$$

I.2.2.Potentiel de Nernst

Le potentiel d'équilibre ou le potentiel de Nernst E_{Nernst} c'est le voltage du circuit ouvert (open circuit voltage) (OVC), sa valeur dépend du type de carburant et de comburant. Les concentrations de chaque espèce, la température, la pression et le potentiel idéal de la procédure. Selon les travaux consultés, le potentiel de Nernst est exprimé par plusieurs expressions différentes. **Milewski et al [1]**, représentent le potentiel réversible par la corrélation proposé par **Hammoudi et al [2]**, Eq (I.5), où le potentiel de Nernst est décrit par un polynôme de température du deuxième degré.

$$E = 1,50342 - 9,956.10^{-4}.T + 2,5.10^{-7}.T^2 \quad (I.5)$$

McLarty et al [3], décrivent le potentiel d'équilibre par l'équation suivante :

$$E_{Nernst} = \frac{RT}{n.F} \left[\ln \left(\frac{X_{H_2} \cdot X_{O_2}^{0.5}}{X_{H_2O}} \cdot P^{0.5} \right) \right] \quad (I.6)$$

Où R est la constante des gaz parfaits, T est la température de fonctionnement, n est le nombre des électrons de transfert, F est le nombre de Faraday, les X_i sont les concentrations de chaque espèce i (hydrogène, oxygène et vapeur d'eau) et P est la pression de référence (la pression des gaz aux canaux), **Li et al [4]**, indiquent que P est le rapport entre la pression totale de mélange dans la cathode et la pression atmosphérique.

Tan et al [5], représentent le potentiel de Nernst par l'Eq (I.7).

$$E = 1,253 - 2,4516.10^{-4}.T + \frac{RT}{2.n.F} \left[\ln \left(\frac{P_{H_2}^2 \cdot P_{O_2}}{P_{H_2O}^2 \cdot P} \right) \right] \quad (I.7)$$

Choi et al [6], représentent le potentiel de Nernst par l'Eq (I.8).

$$E_{Nernst} = E_0 + \frac{RT}{n.F} \left[\ln \left(\frac{\left(\frac{P_{H_2}}{P^0} \right) \left(\frac{P_{O_2}}{P^0} \right)^{0.5}}{\left(\frac{P_{H_2O}}{P^0} \right)} \right) \right] \quad (I.8)$$

Park et al [7], représentent la potentiel de Nernst par l'équation suivante :

$$E_{Nernst} = E_0 + \frac{RT}{n.F} \left[\ln \left(\frac{P_{H_2} \cdot P_{O_2}}{P_{H_2O}} \right)^{0.5} \right] \quad (I.9)$$

Dans la majorité des travaux consultés le potentiel de Nernst E_{Nernst} de la réaction de la formation de l'eau est généralement défini par l'équation de Nernst suivante :

$$E_{Nernst} = E_0 + \frac{RT}{n.F} \left[\ln \left(\frac{P_{H_2} \cdot P_{O_2}^{0.5}}{P_{H_2O}} \right) \right] \quad (I.10)$$

R est la constante des gaz parfaits, T est la température de fonctionnement, n est le nombre des électrons de transfert, F est le nombre de Faraday, P_i est la pression partielle de chaque espèce i (hydrogène, oxygène et vapeur d'eau) et E_0 est le potentiel idéal ou réversible, il est représenté par un polynôme de premier ordre en fonction de la température:

$$E_0 = a + b.T \quad (I.11)$$

Où a et b sont des constantes, elles sont définies par le **Tableau.I.1**.

La **Figure.I.2** montre l'approche des différentes approximations du potentiel idéal en fonction de la température de fonctionnement pour les modèles 1,2 et 5 du **Tableau.I.1**, un écart maximal inférieur à trois centième de volt dans une plage de température de mille cinquante degrés (323 -1373 K).

Tableau.I.1. Coefficients a et b utilisés pour le calcul du potentiel idéal.

Modèles	a	b	Références
1	1,2723	-2,7645.10-4	[7], [8], [9], [10], [11], [12], [13].
2	1,2553	-2,4516.10-4	[14], [15], [16], [17], [18].
3	1,2586	- 2,52.10-4	[19], [20], [21].
4	1,253	-2,4516.10-4	[6], [22], [23], [24], [25], [26], [27], [28], [29].
5	1,28628053	-2,8873.10-4	[4].
6	1,4736	0,005	[21].

Minutillo et al [30], ont utilisé une approche polynomiale du deuxième ordre en fonction de la température de fonctionnement pour quantifier le potentiel idéal. Eq (I.12).

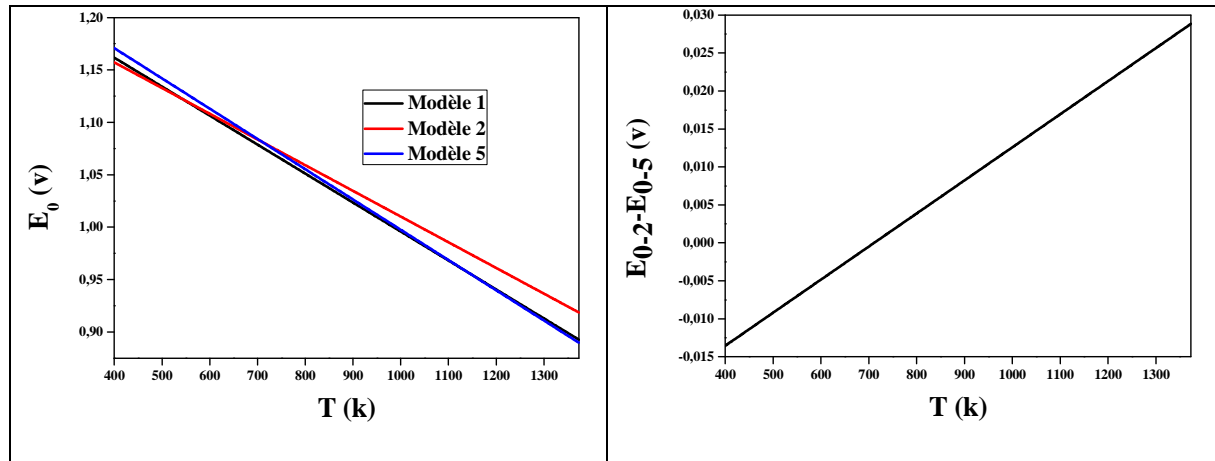


Fig.I.2. Différence entre les modèles utilisés pour le calcul du potentiel idéal. [4], [7] et [14].

$$E_0 = \frac{4184 \cdot [58,3 - (0,0113 + 9,6 \cdot 10^{-7} \cdot T) \cdot T]}{2 \cdot F} \quad (\text{I.12})$$

Milewski et al [1], ont utilisé l'approximation polynomiale du deuxième ordre pour estimer le potentiel idéal. Eq (I.13)

$$E_0 = 1,50342 - 9,956 \cdot 10^{-4} \cdot T - 2,5 \cdot 10^{-7} \cdot T^2 \quad (\text{I.13})$$

Naraharisetti et al [21], **Hernández-Pacheco et al [31]**, **Kakaça et al [32]**, **Aloui et al [33]**, **Haile [34]**, **Burt et al [35]**, **Meratizaman et al [36]**, **Tanim et al [37]** et **Manage et al [38]**, ont présenté le potentiel idéal par le rapport de l'énergie libre de Gibbs (ΔG) sur le produit du nombre des électrons de transfert (n) et le nombre de Faraday (F). Eq (I.14).

$$E_0 = \frac{\Delta G^0}{nF} \quad (\text{I.14})$$

Zhang et al [39], supposent que l'énergie libre de Gibbs est une valeur constante de ($\Delta G^0 = -180,3 \text{ k.mol}^{-1}$), ce qui conduit à un potentiel idéal constant, car le nombre de Faraday (F) et le nombre des électrons de transfert (n) sont des valeurs constantes.

Anderson et al [40], ont présenté l'énergie libre de Gibbs par l'Eq (I.15).

$$\Delta G^0 = -474,4 - 18,8 \cdot (T - 298,15) + 88,84 \cdot (T - 298,15) + 18,8 \cdot T \cdot \ln\left(\frac{T}{298,15}\right) \quad (\text{I.15})$$

Selon **Manage et al [38]** et **Smith et al [41]**, l'énergie libre de Gibbs (ΔG) est présentée en fonction des conditions standards (une température de 25 °C et une pression de 1 atm) par l'Eq (I.16).

$$\Delta G = \Delta H^0 - \frac{T}{T^0} \cdot (\Delta H^0 - \Delta G^0) + R \cdot \int_{T^0}^T \frac{\Delta C_p^0}{R} dT - R \cdot T \cdot \int_{T^0}^T \frac{\Delta C_p^0}{R} \frac{dT}{T} \quad (\text{I.16})$$

Où ΔG^0 et ΔH^0 sont les variations de l'énergie libre de Gibbs et de l'enthalpie pour une température référentielle T^0 de 25 °C, ΔC_p^0 est les variations de la chaleur spécifique. Eqs (I.17) et (I.18).

$$\int_{T^0}^T \frac{\Delta C_p^0}{R} dT = \Delta A(T - T^0) + \frac{\Delta B}{2}(T^2 - T^{02}) + \frac{\Delta C}{3}(T^3 - T^{03}) + \frac{\Delta D}{T^0} \left(\frac{T - T^0}{T} \right) \quad (\text{I.17})$$

$$\int_{T^0}^T \frac{\Delta C_p^0}{R} \frac{dT}{T} = \Delta A \ln \left(\frac{T}{T^0} \right) + \left[\Delta B T^0 + \left(\Delta C T^{02} + \frac{\Delta D}{T^2} \right) \left(\frac{T + T^0}{2T^0} \right) \right] \left(\frac{T - T^0}{T^0} \right) \quad (\text{I.18})$$

Les valeurs des constantes A, B et C pour une réaction de formation d'eau et les variations de l'énergie libre de Gibbs et de l'enthalpie pour une température référentielle de 25 °C sont présentées dans le **Tableau.I.2.** [38,41].

Tableau.I.2. Constantes utilisées pour le calcul des chaleurs spécifiques à 25°C [46].

Paramètres	H ₂ O	H ₂	O ₂
A	3.470	3.249	3.639
B	0.001450	0.000422	0.000506
C	0	0	0
D	12,100	8300	-22,700
ΔH ₀		-241,818 (kJmol ⁻¹)	
ΔG ₀		-228,572 (kJmol ⁻¹)	

Selon **Naraharisetti et al [21]** et **Yang et al [42]**, l'énergie libre de Gibbs (ΔG) est la différence entre la variation de l'enthalpie et le produit de température et la variation l'entropie. (I.19).

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S \quad (\text{I.19})$$

Les variations de l'enthalpie et de l'entropie sont calculées suivant les Eqs (I.20), (I.21), (I.22) et (I.23). [21 et 42].

$$H = H_{298.15} + \int_{298.15}^T C_p dT \quad (\text{I.20})$$

$$S = S_{298.15} + \int_{298.15}^T \frac{C_p}{T} dT \quad (\text{I.21})$$

$$\Delta H_{H_2O} = H_{H_2O} - H_{H_2} - \frac{1}{2} H_{O_2} \quad (\text{I.22})$$

$$\Delta S_{H_2O} = S_{H_2O} - S_{H_2} - \frac{1}{2} S_{O_2} \quad (\text{I.23})$$

Les chaleurs spécifiques de chaque espèce sont déterminées par l'Eq (I.24).

$$C_p = a_1 T^{b_1} + a_2 T^{b_2} + a_3 T^{b_3} + a_4 T^{b_4} \quad (\text{I.24})$$

Les constantes empiriques a_i et b_i présentées dans l'Eq (I.24) sont données pour chaque espèce dans le **Tableau.I.3.** Les enthalpies et les entropies de la vapeur d'eau, de l'hydrogène et de l'oxygène pour une température de référence de 25 °C sont données par le **Tableau.I.4.**

Tableau.I.3. Constantes empirique a_i et b_i de chaque espèce. [21 et 42].

Espèces	a_1	b_1	a_2	b_2	a_3	b_3	a_4	b_4
vapeur	143,05	0	-58,040	0,25	8,2751	0,5	-0,036989	1
H ₂	56,505	0	-22222,6	-0,75	116500	-1	-560700	-1.5
O ₂	37,432	0	2,0102*10 ⁻⁵	1,5	-178570	-1,5	2368800	-2

Tableau.I.4. Enthalpie et entropie de formation de chaque espèce. [21 et 42].

Espèces	Enthalpie (J mol-1)	Entropie (J mol-1K-1)
H ₂ O (vapeur)	-241,827	188,83
H ₂	0	130,59
O ₂	0	205,14

I.2.3.Surtension Ohmique

Les pertes ohmiques sont dues à la résistance de passage rencontré par le flux ionique en traversant l'électrolyte et à la résistance de passage rencontré par les électrons dans les électrodes et les interconnecteurs, elles sont principalement dues à l'électrolyte, elles peuvent être réduites en diminuant l'épaisseur de l'électrolyte et en améliorant sa conductivité ionique. L'électrolyte, les interconnecteurs et les électrodes obéissant à la loi d'Ohm. La perte ohmique dans chaque composant de la cellule est définie par le produit de la densité de courant (i) et la résistance électrique (R). Eq (I.25).

$$\eta_{Ohm} = i.R \quad (I.25)$$

La résistance électrique de chaque composant est définie par le rapport de l'épaisseur de l'élément (e) et sa conductivité électrique (σ). Eq (I.26). La conductivité électrique de chaque élément est donnée par le **Tableau.I.5** pour les matériaux standards (électrolyte : YSZ, anode : Ni-YSZ, cathode : LSM).

$$R = \frac{e}{\sigma} \quad (I.26)$$

Tableau.I.5. Conductivité électrique de chaque composant de la pile SOFC.

Components	σ [$\Omega^{-1} \text{ cm}^{-1}$]	Références
Electrolyte	$\sigma_{ele} = 3.34 \times 10^4 \exp(-10300/T)$	[13], [18], [43], [44], [45], [46], [47], [48], [49], [50], [51], [52], [53], [54].
Cathode	$\sigma_{cat} = \frac{4.2 \times 10^7}{T} \exp(-1200/T)$	[13], [18], [43], [44], [46], [47], [48], [50], [51], [52], [53].
Anode	$\sigma_{an} = \frac{9.5 \times 10^7}{T} \exp(-1150/T)$	[13], [18], [43], [44], [46], [47], [48], [49], [50], [51], [52], [53].
Interconnecteur	$\sigma_{in} = 9.3 \times 10^6 \exp(-1100/T)$	[13], [15], [44], [48], [50], [52].

I.2.4. Surtension d'activation

La polarisation d'activation est présente quand le taux d'une réaction électrochimique à la surface de l'électrode est contrôlé par le ralentissement de la cinétique pour cette électrode. En d'autres termes, la polarisation d'activation est directement reliée au taux de la réaction électrochimique. Dans les deux cas, pour qu'une réaction chimique ou électrochimique puisse démarrer, les réactifs doivent dépasser une barrière d'activation. Dans le cas d'une réaction électrochimique où les pertes d'activation (η_{act}) sont supérieures à 50-100 mV, la perte d'activation de la réaction chimique est décrite par l'équation de Butler-Volmer. Eq (I.27). [7], [23], [24], [25], [36], [54] et [55].

$$i = i_{0,j} \left[\exp\left(\frac{\alpha.n.F.\eta_{Act,j}}{R.T}\right) - \exp\left(-\frac{(1-\alpha).n.F.\eta_{Act,j}}{R.T}\right) \right], j = anode, cathode \quad (I.27)$$

Où α est le coefficient de transfert électronique (le coefficient de transfert de charge) et i_0 est la densité de courant d'échange pour chaque électrode (anode et cathode).

Li et al [4], Tan et al [5], Ji et al [8], Qi et al [9], Yuan et al [11], Yang et al [13], Ni et al [15], Saidi et al [25], Akikur et al [28], Minutillo et al [30], Aloui et al [33], Meratizaman et al [36], Tanim et al [37], Manage et al [38], Yang et al [42], Chan et al [56], Cordiner et al [57], Hussain et al [58], Larrain et al [59], Monder et al [60], Noren et al [61] et Liu et al [62], favorisent la quantification de la perte d'activation par l'équation non linéaire de Butler-Volmer simplifiée pour un coefficient de transfert électronique de ($\alpha=0,5$). Eq (I.28).

$$\eta_{Act,j} = \frac{R.T}{\alpha.n.F} \cdot \sinh^{-1}\left(\frac{i}{2.i_{0,j}}\right), j = anode, cathode \quad (I.28)$$

Quant à **Saebea et al [17]** et **Murshed et al [19]**, ils expriment la surtension d'activation anodique par l'introduction des rapports de pressions partielles comme des coefficients pour les deux termes exponentiels. Eq (I.29).

$$i = i_{0,an} \left[\frac{P_{H_2,TPB}}{P_{H_2,f}} \exp\left(\frac{\alpha.n.F.\eta_{Act,j}}{R.T}\right) - \frac{P_{H_2O,TPB}}{P_{H_2O,f}} \exp\left(-\frac{(1-\alpha).n.F.\eta_{Act,j}}{R.T}\right) \right] \quad (I.29)$$

Où l'indice TPB signifie la zone active de la réaction électrochimique, et f indique la zone référentielle pour les pressions partielles qui sont généralement à l'entrée des canaux anodique et cathodique.

Par contre **Park et al [7]** représentent la perte d'activation par l'équation suivante :

$$\eta_{Act,j} = \frac{R.T}{n.F} \cdot \sinh^{-1}\left(\frac{i}{i_{0,j}}\right), j = anode, cathode \quad (I.30)$$

Vivanpatarakij et al [29], Boigues-Munoz et al [63], AlZahrani et al [64], représentent la perte d'activation par une quantité double représentée par **Park et al [7]**. Eq (I.31).

$$\eta_{Act,j} = \frac{R.T}{F} \cdot \sinh^{-1} \left(\frac{i}{i_{0,j}} \right), j = anode, cathode \quad (I.31)$$

La perte d'activation est gouvernée par l'Eq (I.32) selon **Rokni [65, 66]**.

$$\eta_{Act,j} = \frac{R.T}{(0,001698.T - 1,254) \cdot F} \sinh^{-1} \left(\frac{i}{2 \cdot (13,087.T - 1,096 \cdot 10^4)} \right) \quad (I.32)$$

Mounir et al [12], Kakaça et al [32], Haile et al [34], Burt et al [35], Ferguson et al [44], Zhang et al [48], Jiang et al [67], Jurado et al [68], Zhao et al [69], Pramuanjaroenkij et al [70], Zhang et al [71] et Zhao et al [72], préfèrent d'utiliser la formulation expérimentale de Tafel (I.33), où le deuxième terme de l'équation de Butler-Volmer est négligé devant le premier terme.

$$i = i_{0,j} \left[\exp \left(\frac{\alpha \cdot n \cdot F \cdot \eta_{Act,j}}{R.T} \right) \right], j = anode, cathode \quad (I.33)$$

Ce qui donne la perte d'activation par l'Eq (I.34).

$$\eta_{Act,j} = \frac{R.T}{\alpha \cdot n \cdot F} \cdot \ln \left(\frac{i}{i_{0,j}} \right), j = anode, cathode \quad (I.34)$$

Selon **Milewski et al [1]**, la perte d'activation prend la formulation suivante :

$$\eta_{Act,j} = 2,3026 \frac{R.T}{\alpha_j \cdot n \cdot F} \cdot \log \left(\frac{i}{i_{0,j}} \right), j = anode, cathode \quad (I.35)$$

Où les coefficients de transfert de charge anodique (α_{anode}) et cathodique ($\alpha_{cathode}$) sont des fonctions linéaires du premier ordre de température, ces coefficients sont donnés par les Eqs (I.36) et (I.37) respectivement :

$$\alpha_{anode} = 0,0675 + 0,00095.T \quad (I.36)$$

$$\alpha_{cathode} = 0,1175 + 0,00095.T \quad (I.37)$$

Ni [27], représente la perte d'activation par l'équation suivante :

$$\eta_{Act,j} = \frac{R.T}{n \cdot F} \cdot \left(\frac{i}{i_{0,j}} \right), j = anode, cathode \quad (I.38)$$

Hernandez-Pacheco [73], a précisé que l'Eq (I.38) a été obtenue après un développement de la formulation de Tafel en série de Taylor et négliger tous les termes qui ont un ordre supérieur à un.

La densité du courant d'échange de la réaction d'électrode à l'équilibre i_0 est représentée généralement par une expression exponentielle (Eq (I.39)) ou une constante (**Tableau.I.6**), sa valeur est fortement influencée par le type de matériau d'électrode, la température, les concentrations des espèces et la longueur de la frontière à trois phases.

$$i_{0,j} = k_j \cdot \exp\left(-\frac{E_j}{R.T}\right), j = anode, cathode \quad (I.39)$$

k_j et E_j représentent le facteur pré-exponentiel et l'énergie d'activation, qui sont généralement des constantes ou une fonction de température ou des pressions partiels. [1], [11], [25], [38], [39], [42] et [64]. **Tableau.I.7**.

Li et al [4], Tan et al [5], Choi et al [6], Park et al [7], Vivanpatarakij et al [29], Tanim et al [37], Anderson et al [40] et Boigues-Munoz et al [63], expriment la densité de courant d'échange de la réaction d'électrode à l'équilibre i_0 par une expression exponentielle identique à (I.39) multipliée par les rapports des pressions partielles des différentes espèces. Eqs (I.40) et (I.41).

$$i_{0,an} = k_{an} \cdot \left(\frac{P_{H_2}}{P_{amb}}\right) \left(\frac{P_{H_2O}}{P_{amb}}\right)^m \cdot \exp\left(-\frac{E_{an}}{R.T}\right) \quad (I.40)$$

$$i_{0,cat} = k_{cat} \cdot \left(\frac{P_{O_2}}{P_{amb}}\right)^{0.25} \cdot \exp\left(-\frac{E_{cat}}{R.T}\right) \quad (I.41)$$

Tableau.I.6. Valeur de la densité de courant d'échange i_0 .

$I_{0,an}$ [Am^{-2}]	$I_{0,cat}$ [Am^{-2}]	Références
1,29	970	[11]
800	800	[25]
6500	2500	[42]
2000	5300	[38]
3,15	3,15	[1]
6610	3550	[39]
0,65	0,25	[64]

Tableau.I.7. Valeurs et expressions du facteur pré-exponentiel et de l'énergie d'activation.

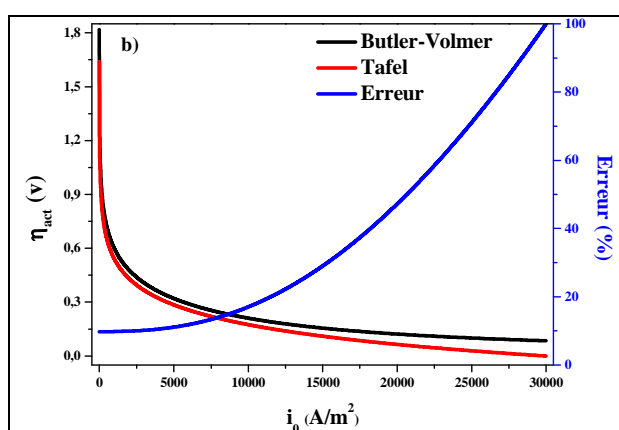
modèles	Anode		Cathode		Références
	k_{an} [Am^{-2}]	E_{an} [$J mol^{-1}$]	k_{cat} [Am^{-2}]	E_{cat} [$J mol^{-1}$]	
1	$2,051 \times 10^{12}$	$1,2 \times 10^5$	$1,344 \times 10^{13}$	10^5	[28]
2	10^5	$1,2 \times 10^5$	$1,2 \times 10^5$	10^5	[22]
3	$6,54 \times 10^{11} \cdot \frac{R.T}{2.F}$	$1,4 \times 10^5$	$2,35 \times 10^{11} \cdot \frac{R.T}{2.F}$	$1,37 \times 10^5$	[15], [17], [19], [26], [55].
4	$2,33 \times 10^{11} \cdot \frac{R.T}{2.F}$	10^5	$6,54 \times 10^{11} \cdot \frac{R.T}{2.F}$	$1,2 \times 10^5$	[12]

Le facteur pré-exponentiel (k_j), l'énergie d'activation (E_j) et la constante (m) sont donnés par le **Tableau.I.8**. [4], [5], [6], [7], [29], [37], [40], [63] et [74].

Tableau.I.8. Expressions et valeurs de facteur pré-exponentiel, l'énergie d'activation et de la constante m.

modèles	Anode			Cathode		Références
	k_{an} [$A \cdot m^{-2}$]	E_{an} [$J \cdot mol^{-1}$]	m	k_{cat} [$A \cdot m^{-2}$]	E_{cat} [$J \cdot mol^{-1}$]	
1	$5,5 \times 10^8$	5×10^4	1	7×10^8	10^5	[4]
2	$5,5 \times 10^8$	10^5	1	7×10^8	$1,17 \times 10^5$	[37]
3	$5,5 \times 10^8$	$1,2 \times 10^5$	1	$5,5 \times 10^8$	$1,2 \times 10^5$	[63]
4	7×10^9	$1,2 \times 10^5$	-0.5	$2,9 \times 10^9$	$1,2 \times 10^5$	[7]
5	$6,54 \times 10^{11} \cdot \frac{R \cdot T}{2 \cdot F}$	$1,4 \times 10^5$	-0.5	$2,35 \times 10^{11} \cdot \frac{R \cdot T}{2 \cdot F}$	$1,37 \times 10^5$	[6]
6	$1,3448 \times 10^{10}$	10^5	1	$2,051 \times 10^9$	$1,2 \times 10^5$	[5]
7	$5,5 \times 10^8$	10^5	1	7×10^8	$1,2 \times 10^5$	[29]
8	$2,9 \times 10^8$	120	1	7×10^8	120	[40]
9	$5,5 \times 10^8$	$1,2 \times 10^5$	1	7×10^8	$1,2 \times 10^5$	[75]

La **Figure I.3** représente la variation de la perte d'activation en fonction de la densité du courant d'échange pour une densité de courant égal à 30000 A/m^2 et une température de fonctionnement égale à 1023 K selon les deux modèles les plus utilisés dans la littérature (le modèle de Butler-Volmer et le modèle Tafel). Suivant ces deux différentes expressions de perte d'activation, un programme en langage FORTRAN a été réalisé pour faire une comparaison entre ces deux modèles, les deux courbes obtenues présentées dans la **Figure I.3** ayant presque la même forme. La perte d'activation prend des valeurs supérieures à un volt lorsque les valeurs de la densité de courant d'échange sont inférieures à trois cent ampères par mètre carré, elles sont de l'ordre de $0,5 - 0,25$ volt pour des valeurs de densité de courant d'échange correspondantes à $1750 - 10000 \text{ A/m}^2$, enfin, elles sont inférieures à $0,25$ volt quand les valeurs de la densité du courant d'échange sont supérieures à 10000 A/m^2 .

**Fig.I.3.** Comparaison entre le modèle Butler-Volmer et le modèle de Tafel en fonction de i_0 . [4] et [12].

La **Figure I.4** montre l'évolution de la perte d'activation en fonction de la densité du courant pour trois valeurs de température de fonctionnement ($773, 923$ et 1073 K) pour les deux

expressions de Tafel et Butler-Volmer. Les deux modèles de la perte d'activation présentés par la **Figure I.4**, montrent que la perte d'activation augmente successivement suivant la croissance de la densité de courant. Pour des valeurs de densité de courant inférieures à 10000 A/m^2 , la perte d'activation est grande, elle se développe hyperboliquement en fonction de la densité de courant, quant aux valeurs de densité de courant qui sont supérieures à 10000 A/m^2 la perte d'activation varie quasi linéairement en fonction de la densité de courant. Enfin, on remarque des valeurs négatives de la perte d'activation sur la **Figure I.4.A** selon l'expression de Tafel, ce qui signifie une production illogique.

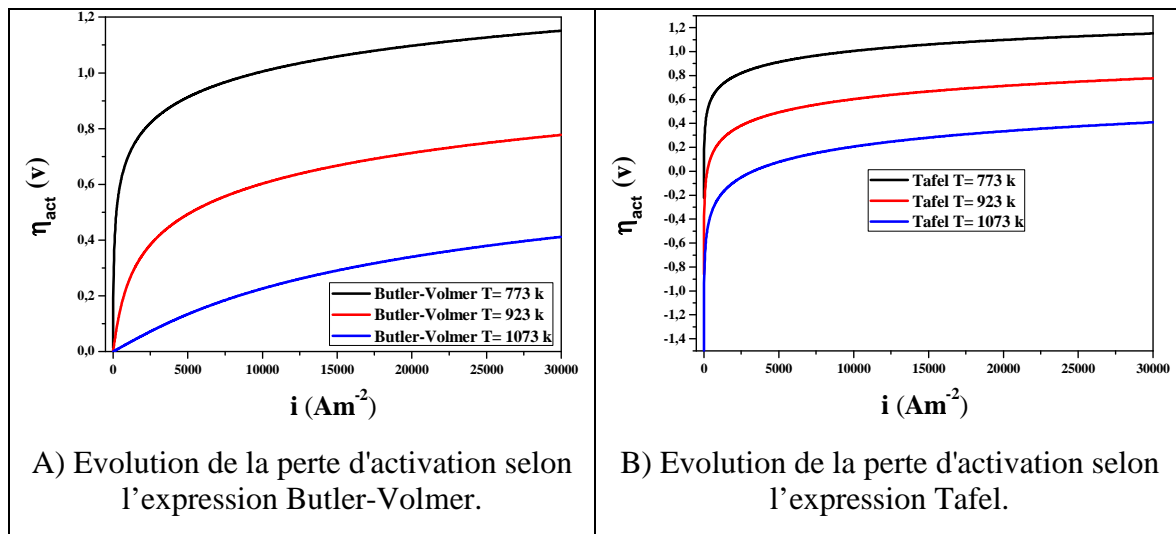


Fig.I.4. Comparaison entre le modèle Butler-Volmer et le modèle de Tafel en fonction de i . [4] et [12].

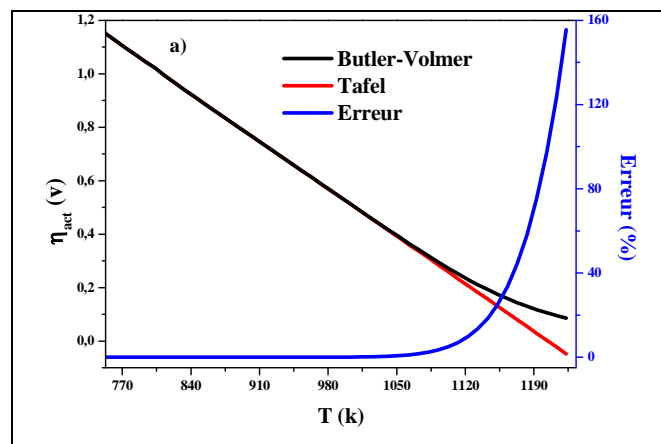


Figure I.5. Comparaison entre le modèle Butler-Volmer et le modèle de Tafel en fonction de température de fonctionnement. [4] et [12].

La température de fonctionnement de la pile à combustible à oxyde solide est un paramètre clé et dominant entre tous les paramètres physiques, la **Figure I.5** prévoit la caractérisation de la perte d'activation par rapport aux différentes températures de

fonctionnement pour les deux modèles (Tafel et Butler-Volmer). Le modèle de Butler-Volmer présente une variation de la perte d'activation identique à celle du modèle de Tafel pour des valeurs de températures inférieures à 980 K, quant aux valeurs de températures qui sont supérieures à 980 K le modèle de Butler-Volmer présente des valeurs positives et presque nuls ce qui est logique, contrairement au modèle Tafel qui présente des valeurs négatives.

I.2.5. Surtension de concentration

A une électrode, lorsque, il y a une perte de potentiel du à l'incapacité du système de maintenir les concentrations initiales ou nécessaires des réactifs, alors la formation d'un gradient de concentration est logiquement produite. De nombreux facteurs peuvent contribuer à la polarisation de concentration : la faible diffusion du gaz à travers les électrodes poreuses, la dissolution des réactants ou des produits dans l'électrolyte, la diffusion des réactifs ou des produits du site de la réaction vers l'électrolyte ou l'inverse. A des densités de courant élevées, la faible vitesse du transport des réactifs ou des produits vers le site de la réaction est la contribution majeure à la polarisation de concentration. Il existe plusieurs modèles de perte de concentration. **Burt et al [35], Manage et al [38], Zhang et al [39], Yang et al [42], Zhang et al [75], Fardadi et al [76], Kang et al [77] et Cao et al [78]**, expriment la perte de concentration par la somme des deux pertes anodique et cathodique, ces deux pertes sont présentées par l'équation simplifiée suivante :

$$\eta_{conc,j} = -\frac{RT}{n.F} \cdot \ln\left(1 - \frac{i}{i_{l,j}}\right), j = anode, cathode \quad (I.42)$$

Où R est la constante des gaz parfaits, T est la température de fonctionnement, n est le nombre des électrons de transfert, F est le nombre de Faraday, i est la densité du courant et $i_{l,j}$ est le courant limite de chaque électrode, il est généralement représenté par une constante.

Tableau.I.9.

Minutillo et al [30], représentent les pertes dues aux limitations de transfert de masse de la phase gazeuse dans et à travers l'électrode par les deux équations suivantes :

$$\eta_{Conc,an} = -\frac{RT}{2.F} \cdot \ln\left(1 - \frac{i}{i_{l,an}}\right) + \frac{RT}{2.F} \cdot \ln\left(1 + \frac{P_{H_2} \cdot i}{P_{H_2O} \cdot i_{l,an}}\right) \quad (I.43)$$

$$\eta_{Conc,cat} = \frac{RT}{2.F} \cdot \ln\left(1 - \frac{i}{i_{l,cat}}\right) \quad (I.44)$$

Les densités de courant limites anodique et cathodique $i_{l,an}$ et $i_{l,cat}$ sont données par les Eqs (I.45) et (I.46).

$$i_{l,an} = \frac{2.F.P_{H_2}.D_{eff,an}}{R.T} \quad (I.45)$$

$$i_{l,cat} = \frac{2.F.P_{O_2}.D_{eff,cat}}{R.T} \quad (I.46)$$

Tableau.I.9. Valeurs de courant limite dans chaque électrode.

Anode [A.m ⁻²]	Cathode [A.m ⁻²]	Références
2,99 x 10 ⁴	2,16 x 10 ⁴	[39], [75]
9 x 10 ³	9 x 10 ³	[42], [76]
6 x 10 ³	6 x 10 ³	[37]
3 x 10 ³	3 x 10 ³	[35]
1,2 x 10 ⁴	1,2 x 10 ⁴	[77]
10 ⁴	10 ⁴	[78]

Où P_{O_2} et P_{H_2} sont les pressions partielles de l'oxygène et d'hydrogène respectivement, les coefficients de diffusion anodique et cathodique $D_{eff,an}$ et $D_{eff,cat}$ sont calculés par l'équation suivante :

$$D_{eff,j} = D_j \cdot \left(\frac{T}{273} \right)^{1.5} \cdot \frac{\varepsilon}{\tau} \quad (I.47)$$

$D_{eff,j}$ est le coefficient de diffusion de chaque électrode j , D_j représente la diffusivité effective de chaque espèce gazeuse j , ε et τ désignant respectivement la porosité et la tortuosité des deux électrodes.

AlZahrani et al [64], représentent les pertes de concentrations par l'équation suivante :

$$\eta_{conc} = -\frac{R.T}{2.F} \cdot \ln \left(1 - \frac{i}{i_{l,an}} \right) + \frac{R.T}{2.F} \cdot \ln \left(1 - \frac{P_{H_2}.i}{P_{H_2O}.i_{l,an}} \right) - \frac{R.T}{4.F} \cdot \ln \left(1 - \frac{i}{i_{l,cat}} \right) \quad (I.48)$$

Où P_{H_2} et P_{H_2O} sont les pressions partielles d'hydrogène et de la vapeur d'eau, les courants limites de chaque électrode sont donnés par les Eqs (I.49) et (I.50).

$$i_{l,an} = \frac{2.F.P_{H_2}.D_{eff,an}}{R.T.e_{an}} \quad (I.49)$$

$$i_{l,cat} = \frac{4.F.P_{O_2}.D_{eff,cat}}{\left(\frac{P - P_{O_2}}{P} \right) R.T.e_{cat}} \quad (I.50)$$

Où P est la pression d'injection de comburant, les coefficients de diffusion effectives anodique et cathodique $D_{eff,an}$ et $D_{eff,cat}$ sont considérés comme constantes de 0.2 cm²/s et 0.05 cm²/s respectivement.

Yuan et al [11], présentent la perte de concentration par l'Eq (I.51).

$$\eta_{Conc} = -\frac{R.T}{2.F} \cdot \ln \left(\frac{1 - (R.T / 2.F) \cdot (e_{an} / D_{eff,an} \cdot P_{H_2}) \cdot i}{1 + (R.T / 2.F) \cdot (e_{an} / D_{eff,an} \cdot P_{H_2}) \cdot i} \right) \quad (I.51)$$

Où $D_{eff,an}$ est le coefficient de diffusion effective de l'anode, qui est égale 2.10^{-5} m/s, e_{an} représente l'épaisseur de l'anode et P_{H_2} indique la pression partielle d'hydrogène dans le carburant.

Choi et al [6], Saebea et al [17,19], Tippawan et al [55] et Andersson et al [26], utilisent les expressions des pertes de concentration anodique et cathodique présentées par les Eqs (I.52) et (I.53).

$$\eta_{Conc,an} = \frac{R.T}{2.F} \cdot \ln \left(\frac{P_{H_2O,TPB} \cdot P_{H_2}}{P_{H_2O} \cdot P_{H_2,TPB}} \right) \quad (I.52)$$

$$\eta_{Conc,cat} = \frac{R.T}{4.F} \cdot \ln \left(\frac{P_{O_2}}{P_{O_2,TPB}} \right) \quad (I.53)$$

$P_{H_2,TPB}$, $P_{H_2O,TPB}$ et $P_{O_2,TPB}$ sont les pressions partielles à limite triphasée qui peuvent être déterminées par l'utilisation du modèle de transport de gaz en milieu poreux, donné par **Saebea et al [22] et Tippawan et al [55]**. Eqs (I.54), (I.55) et (I.56).

$$P_{H_2,TPB} = P_{H_2} - \left(\frac{R.T \cdot e_{an}}{2.F \cdot D_{eff,an}} \cdot i \right) \quad (I.54)$$

$$P_{H_2O,TPB} = P_{H_2O} + \left(\frac{R.T \cdot e_{an}}{2.F \cdot D_{eff,an}} \cdot i \right) \quad (I.55)$$

$$P_{O_2,TPB} = P - (P - P_{O_2}) \cdot \exp \left(\frac{R.T \cdot e_{cat}}{4.F \cdot D_{eff,an} \cdot P} \cdot i \right) \quad (I.56)$$

Saebea et al [19], ont pris les coefficients de diffusion anodique et cathodique comme constantes de $3.66.10^{-5}$ m²/s et $1.37.10^{-5}$ m²/s respectivement, **Tippawan et al [55]**, ont aussi considéré que ces coefficients sont des constantes de $33.4.10^{-5}$ m²/s et $1.37.10^{-5}$ m²/s respectivement.

Li et al [4], Tanim et al [37] représentent les pertes de concentration par le même modèle utilisé par **Choi et al [6], Saebea et al [17,19], Andersson et al [26] et Tippawan et al [55]**, mais **Li et al [4] et Tanim et al [37]** utilisent les concentrations des espèces au lieu des pressions partielles.

Arpornwichanop et al [25], considèrent que les deux pertes de concentration sont gouvernées par les Eqs (I.57) et (I.58).

$$\eta_{Conc,an} = \frac{R.T}{2.F} \cdot \ln \left(\frac{P_{H_2}}{P_{H_2,TPB}} \right) \quad (I.57)$$

$$\eta_{Conc,cat} = \frac{R.T}{2.F} \cdot \ln \left(\left(\frac{P_{O_2}}{P_{O_2,TPB}} \right)^{1/2} \cdot \left(\frac{P_{H_2O,TPB}}{P_{H_2O}} \right) \right) \quad (I.58)$$

Où $P_{H_2,TPB}$, $P_{H_2O,TPB}$ et $P_{O_2,TPB}$ sont les pressions partielles à limite triphasée, elles sont obtenues par les Eqs (I.59), (I.60) et (I.61).

$$P_{H_2,TPB} = P - (P - P_{H_2}) \cdot \exp \left(\frac{R.T \cdot e_{an}}{2.F \cdot D_{eff,an} \cdot P} \cdot i \right) \quad (I.59)$$

$$P_{H_2O,TPB} = P_{H_2O} + \left(\frac{R.T \cdot e_{cat}}{4.F \cdot D_{eff,cat}} \cdot i \right) \quad (I.60)$$

$$P_{O_2,TPB} = P_{O_2} - \left(\frac{R.T \cdot e_{cat}}{2.F \cdot D_{eff,cat}} \cdot i \right) \quad (I.61)$$

Où $D_{eff,cat}$ est le coefficient de diffusion effective de la cathode, e_{cat} représente l'épaisseur de la cathode, P_{O_2} et P_{H_2O} indiquent les pressions partielles d'oxygène et de la vapeur d'eau respectivement.

Rokni [65], a utilisé l'équation simplifiée (I.62) pour quantifier la perte de concentration.

$$\eta_{conc} = D \cdot \left(-\ln \left(1 + \frac{P_{H_2} \cdot i}{P_{H_2O} \cdot i_l} \right) - \ln \left(1 - \frac{i}{i_l} \right) \right) \quad (I.62)$$

Où D est le coefficient de diffusion qui est déterminé par l'utilisation de la technique d'étalonnage, Eq (I.63), et i_l est le courant limite de l'anode.

$$D = \left(\frac{0,008039}{X_{H_2}} - 0,007272 \right) \cdot \frac{T}{T_{ref}} \quad (I.63)$$

Où T_{ref} est la température de référence de 1023 K, et X_{H_2} est la concentration d'hydrogène.

Akikur et al [28], ont représenté les pertes de concentration anodique et cathodique par les Eqs (I.64) et (I.65).

$$\eta_{Conc,an} = -\frac{R.T}{4.F} \cdot \ln \left(\frac{\sqrt{\left(P_{O_2,TPB} \right)^2 + \left(i \cdot R.T \cdot \mu \cdot e_{an} / 2.F \cdot k \right)}}{P_{O_2,TPB}} \right) \quad (I.64)$$

$$\eta_{Conc,cat} = -\frac{R.T}{2.F} \cdot \ln \left(\frac{1 + \left(R.T / 2.F \right) \cdot \left(e_{an} / D_{eff,H_2O} \cdot P_{H_2,TPB} \right) \cdot i}{1 - \left(R.T / 2.F \right) \cdot \left(e_{an} / D_{eff,H_2O} \cdot P_{H_2O,TPB} \right) \cdot i} \right) \quad (I.65)$$

Où μ est la viscosité dynamique de l'oxygène, k représente la perméabilité de l'écoulement et $D_{\text{eff,H}_2\text{O}}$ est le coefficient de diffusion effective de la vapeur d'eau.

I.3. Modélisations des phénomènes de transfert de chaleur dans les SOFC

Dans ce qui suit, on présente une synthèse bibliographique sur les modèles de transfert de chaleur dans les SOFC planaires. Plus d'intérêt sera porté à la description des différents modèles de transfert de chaleur et les expressions des termes sources utilisées par chaque auteur.

I.3.1. Modélisations unidimensionnelle des phénomènes de transfert de chaleur

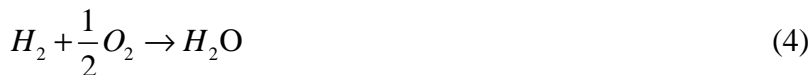
Aguiar et al [45], ont réalisé une étude numérique unidimensionnelle et instationnaire pour obtenir les variations de la tension de la cellule sur une pile SOFC planaire à anode supporté. Le modèle utilisé prend en considération l'influence du transfert de chaleur par rayonnement entre le cœur de la pile (électrode positive, l'électrolyte, l'électrode négative) et les plaques de séparation (inter connecteur). Ils considèrent que le transfert de chaleur se fait par convection dans les canaux et entre les composants solides de la cellule et les gaz, et par conduction à travers les composants solides. Les coefficients de transfert de chaleur entre les gaz et les parties solides sont calculés par l'utilisation du nombre de Nusselt. Les équations gouvernantes le transport de chaleur dans la pile sont données par chaque élément.

a)- Les canaux de la pile

L'équation gouvernante le transfert de chaleur dans le canal anodique est donnée par :

$$\rho.C_p.\frac{\partial T}{\partial t} = -u.\rho.C_p.\frac{\partial T}{\partial x} + \frac{h_{f-PEN}(T_{PEN} - T)}{Ha} + \frac{h_{f-int}(T_{int} - T)}{Ha} + \sum_{i=1,2} \frac{(-\Delta H.K)_i}{Ha} \quad (I.66)$$

Où ρ est la masse volumique, Ha est la hauteur de canal, K est le débit molaire par unité de surface des réactions suivantes :



Où h est le coefficient de transfert de chaleur par convection, il est donné par les Eqs (I.68) et (I.69).

$$h_{f-an} = h_{f-int} = Nu.\frac{\lambda_f}{dh_f} \quad (I.68)$$

$$h_{f-cat} = h_{a-int} = Nu \cdot \frac{\lambda_a}{dh_a} \quad (I.69)$$

Le nombre de Nusselt Nu est constant et égal à 3.09, dh_f , dh_a sont les diamètres hydrauliques des canaux anodique et cathodique, ils sont donnés par l'équation suivante :

$$dh_a = dh_f = dh = \frac{2.W.Ha}{W + Ha} \quad (I.70)$$

L'équation gouvernante le transfert de chaleur dans le canal cathodique est donnée par :

$$\rho.C_p \cdot \frac{\partial T}{\partial t} = -u \cdot \rho.C_p \cdot \frac{\partial T}{\partial x} + \frac{h_{f-PEN}(T_{PEN} - T)}{Ha} + \frac{h_{a-int}(T_{int} - T)}{Ha} + \sum_{l=i,ii} \frac{(-\Delta H.K)_l}{Ha} \quad (I.71)$$

b)- La partie solide

L'équation gouvernante le transfert de chaleur dans le cœur de la pile est donnée par :

$$\rho.C_p \cdot \frac{\partial T}{\partial t} = \left(\lambda_{PEN} \cdot \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} - \frac{h_{f-PEN}(T - T_f)}{Ha_{PEN}} - \frac{h_{a-PEN}(T - T_a)}{Ha_{PEN}} + \frac{(-\Delta H.K)_4 - i.V}{Ha_{PEN}} + \frac{\sigma(T_I^4 - T_{PEN}^4)}{Ha_{PEN} \left(\frac{1}{Ha_I} + \frac{1}{Ha_{PEN}} - 1 \right)} \right) \quad (I.72)$$

L'équation gouvernante le transfert de chaleur dans l'inter connecteur est donnée par:

$$\rho.C_p \cdot \frac{\partial T}{\partial t} = \lambda_I \cdot \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} - \frac{h_{f-I}(T - T_f)}{Ha_I} - \frac{h_{a-I}(T - T_a)}{Ha_I} - \frac{\sigma(T_I^4 - T_{PEN}^4)}{Ha_I \left(\frac{1}{Ha_I} + \frac{1}{Ha_{PEN}} - 1 \right)} \quad (I.73)$$

Les conditions aux limites sont données par un flux de chaleur nul aux extrémités des parties solides de la cellule et une température constante au début des canaux anodique et cathodique de la pile.

Wang et al [79], ont développé un modèle mathématique unidimensionnel et instationnaire pour étudier les variations des différents paramètres dans une cellule (SOFC) planaire à anode supportée. Le modèle prend en compte la variation des propriétés de gaz locales. Il peut non seulement tenir compte des caractéristiques des paramètres distribués de SOFC, mais aussi satisfaire à l'exigence de la simulation dynamique en temps réel. Le modèle considère que le flux thermique est transporté dans l'inter connecteur et dans le cœur de la pile par conduction, pendant ce temps, le flux thermique est transporté par convection entre les gaz et les éléments solides. Les coefficients de transfert de chaleur entre les gaz et les parties solides sont calculés par l'utilisation du nombre de Nusselt qui est supposé constant et égal à 3.09. En raison des températures élevées, l'énergie transportée par rayonnement entre

l'interconnecteur et le cœur de la pile est également incluse dans l'équation de l'énergie. Les équations gouvernantes le transport de chaleur dans la pile sont données par chaque élément.

a)- Les canaux de la pile

L'équation gouvernante le transfert de chaleur dans le canal anodique est donnée par :

$$\frac{\partial(\rho.e)}{\partial t} = -\frac{\partial(u.\rho.C_p.T)}{\partial x} + \frac{h_{f-PEN}(T_{PEN} - T)}{Ha} + \frac{h_{f-int}(T_{int} - T)}{Ha} + \sum_{i=1,2} \frac{(-\Delta H.K)_i}{Ha} \quad (I.74)$$

Où Ha , u sont la hauteur du canal et la vitesse de fuel, h est le coefficient de transfert de chaleur par convection et K est le débit molaire par unité de surface des réactions suivantes :



e est l'énergie interne, elle est donné par la formule suivante :

$$e = H - \frac{P}{\rho} \quad (I.76)$$

Où H , P et ρ sont respectivement l'enthalpie, la pression et la masse volumique, ΔH est la variation d'enthalpie, elle est donnée pour le système d'équations (I.75) par :

$$\Delta H_1 = \Delta H_1^0 - 16373,61 + R \left(7,951.T - 4,35.e^{-3T^2} + 0,7213.e^{-6T^3} - \frac{0,097.e^5}{T} \right) \quad (I.77)$$

$$\Delta H_2 = \Delta H_2^0 - 7756,56 + R \left(1,86.T - 0,27.e^{-3T^2} + \frac{1,164.e^5}{T} \right) \quad (I.78)$$

$$\Delta H_3 = \Delta H_3^0 - 4097,22 + R \left(1,5985.T - 0,3875.e^{-3T^2} - \frac{0,1515.e^5}{T} \right) \quad (I.79)$$

Où ΔH^0 est la variation d'enthalpie à l'état standard.

L'équation gouvernante le transfert de chaleur dans le canal cathodique est donnée par :

$$\frac{\partial(\rho.e)}{\partial t} = -\frac{\partial(u.\rho.C_p.T)}{\partial x} + \frac{h_{a-PEN}(T_{PEN} - T)}{Ha} + \frac{h_{a-int}(T_{int} - T)}{Ha} \quad (I.80)$$

b)- La partie solide

L'équation gouvernante le transfert de chaleur dans le cœur de la pile est donnée par :

$$\rho.C_p \cdot \frac{\partial T}{\partial t} = \lambda_{PEN} \cdot \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} - \frac{1}{Ha_{PEN}} \left\{ \begin{array}{l} h_{f-PEN}(T - T_f) + h_{a-PEN}(T - T_a) \\ - [(-\Delta H.K)_3 - i.V] - \frac{\sigma(T_I^4 - T_{PEN}^4)}{\left(\frac{1}{Ha_I} + \frac{1}{Ha_{PEN}} - 1 \right)} \end{array} \right\} \quad (I.81)$$

L'équation gouvernante le transfert de chaleur dans l'inter connecteur est donnée par :

$$\rho.C_p \cdot \frac{\partial T}{\partial t} = \lambda_l \cdot \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} - \frac{1}{Ha_l} \left\{ h_{f-l} (T - T_f) + h_{a-l} (T - T_a) + \frac{\sigma (T_l^4 - T_{PEN}^4)}{\left(\frac{1}{Ha_l} + \frac{1}{Ha_{PEN}} - 1 \right)} \right\} \quad (I.82)$$

Les conditions aux limites sont données par un flux de chaleur nulle aux extrémités des parties solides de la cellule et une température constante au début des canaux anodique et cathodique de la pile.

Wongchanapai et al [80], ont présenté un modèle numérique unidimensionnel et stationnaire pour analyser le rendement thermodynamique des cas co- et contre-courant d'une (SOFC) planaire à anode supporté. Le modèle développé a été validé en le comparant avec les résultats expérimentaux et simulés tirés de la littérature. Ce modèle est capable de capturer la répartition détaillée des températures, les concentrations des espèces, la densité de courant et les pertes de polarisation dans la direction longitudinale. Le processus de génération de chaleur et le transfert de chaleur considérés dans ce modèle sont la libération et l'absorption de chaleur résultant des réactions électrochimiques, la résistance électrique, le transfert de chaleur par convection entre la phase solide et les gaz et le transfert de chaleur par conduction dans la partie solide, le transfert de chaleur par rayonnement est négligé. Les équations gouvernantes le transport de chaleur dans la pile sont données par chaque élément.

a)- Les canaux de la pile

L'équation de conservation de l'énergie dans canal cathodique est donnée par :

$$\rho.C_p \cdot \Delta x \cdot A_c \cdot u \cdot \frac{\partial T}{\partial x} - h \cdot A_{s,air} \cdot (T_s - T) = 0 \quad (I.83)$$

Où ρ est la densité d'air, C_p est la capacité thermique spécifique d'air et A_c est l'aire de la section transversale du canal cathodique. h est le coefficient de transfert de chaleur, il est donné par l'expression de Nusselt.

$$h = Nu \cdot \frac{\lambda}{dh} \quad (I.84)$$

Où dh est le diamètre hydraulique du canal. Les valeurs du nombre de Nusselt de l'air et de fuel sont respectivement 4 et 6.2.

L'équation de l'énergie qui régit le canal du combustible est la suivante :

$$\rho.C_p \cdot \Delta x \cdot A_c \cdot u \cdot \frac{\partial T}{\partial x} - h \cdot A_{s,fuel} \cdot (T_s - T) = Q \quad (I.85)$$

Le terme source dans le canal anodique est exprimé comme suit :

$$Q = -y \cdot \Delta H \quad (I.86)$$

b)- La partie solide

L'équation de conservation d'énergie pour la partie solide de la cellule est donnée par :

$$\lambda.\Delta x.A_c.\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + h_{air}.A_{s.air}.(T - T_{air}) + h_{fuel}.A_{s.fuel}.(T - T_{fuel}) = Q \quad (I.87)$$

A_c , $A_{s.air}$ et $A_{s.fuel}$ sont respectivement l'aire de la section transversale de la partie solide, l'aire de l'interface solide/air et l'aire de l'interface solide/fuel. La source de chaleur dans la structure solide Q est provoquée par l'effet des réactions électrochimiques, du méthane et le reformage de la vapeur et la perte ohmique, elle est donnée par l'équation suivante :

$$Q = x.\Delta H - z.T.\Delta S_{H_2} + i.A.\eta_{ohm} \quad (I.88)$$

Où ΔH est la variation d'enthalpie de reformage de chaque substance, et x , y et z sont respectivement les débits molaires des substances CH_4 , CO et H_2 .

Les conditions aux limites sont données par un flux de chaleur nulle aux extrémités des parties solides de la cellule et une température constante au début des canaux anodique et cathodique de la pile.

I.3.2.Modélisations bidimensionnelle des phénomènes de transfert de chaleur

Inui et al [81], ont présenté un modèle instationnaire et bidimensionnel parallèle au sens d'écoulement dans une SOFC planaire à électrolyte supporté, le modèle prévoit les variations de polarisation (potentiel/densité de courant) et de la température. Le calcul de la température se fait par application de l'équation de conservation d'énergie dans toutes les parties de la pile. Le transfert de chaleur par convection entre la structure solide et les canaux est pris en compte par un terme de génération de chaleur, le transfert de chaleur par rayonnement est négligé. Les équations gouvernantes le transport de chaleur dans la pile sont données par chaque élément.

a)- Les canaux de la pile

L'équation gouvernante le transfert de chaleur dans le canal anodique est donnée par :

$$\frac{d}{dx} \left\{ \sum_{i=1}^n h_i.N_i \right\} = \left(\begin{array}{l} -\Delta N_r.q_r + \Delta N_s.q_s - w \frac{i}{2.F} (h_h - h_v) \\ -w_{ch} \alpha_{fge} (T_{fg} - T_e) - (w_{ch} + 2.I_{ch}) \alpha_{fgi} (T_{fg} - T_{fi}) \end{array} \right) \quad (I.89)$$

L'équation gouvernante le transfert de chaleur dans le canal cathodique est donnée par :

$$\frac{d}{dx} \left\{ \sum_{i=1}^n h_i.N_i \right\} = -w \frac{i}{4.F} h_0 - w_{ch} \alpha_{age} (T_{ag} - T_e) - (w_{ch} + 2.I_{ch}) \alpha_{agi} (T_{ag} - T_{ai}) \quad (I.90)$$

Où N est le débit molaire du gaz [mol/s]. ΔN_s la variation de débit en moles de monoxyde de carbone par unité de longueur [mol/s.m], q_s la génération de chaleur par unité de moles [j/mol], I_{ch} la hauteur de canal, α le coefficient de transfert de chaleur. ΔH_v est l'enthalpie

par mole généré par l'oxydation d'une unité de l'hydrogène, E la force électromotrice, V_{af} et V_{aa} les surtensions d'activation au niveau des électrodes carburant et d'air, V_{re} , V_{rf} et V_{ra} la tension résistive au niveau de l'électrolyte/électrodes (cœur de la pile), l'inter connecteur côté anodique et cathodique, l et l_e sont les hauteurs de la cellule et de électrolyte/électrodes, h l'enthalpie du gaz par unité molaire [J/mol], h' l'enthalpie par mole de gaz dans les électrodes / électrolyte [J/mol], w la hauteur de canal, w_{ch} la largeur de canal, l_{ch} la hauteur de canal, α le coefficient de transfert de chaleur. F est la constante de Faraday. Les indices h, v, e, fi, ai, fg, ag, fge et age sont respectivement l'hydrogène, vapeur d'eau, électrodes/électrolyte, interconnecteur coté fuel, interconnecteur coté air, fuel gaz, aire gaz, fuel gaz électrodes/électrolyte et aire gaz électrodes/électrolyte.

b- La partie solide

L'équation de chaleur gouvernant les éléments solides de la pile est donnée par :

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left\{ \lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right\} + \frac{\partial}{\partial z} \left\{ \lambda \frac{\partial T}{\partial z} \right\} + S \quad (I.91)$$

Où S est le terme source, il est donné dans chaque partie solide par les équations suivantes :

Le cœur de la pile

$$S_e = \frac{1}{w.l_e} \left\{ w \frac{i}{2.F} \Delta H_v - w.i (E - V_{af} - V_{aa} - V_{re}) + w \frac{i}{2.F} \left(h_h - h'_v + \frac{1}{2} h_0 \right) \right\} + w_{ch} \cdot \alpha_{fge} (T_{fg} - T_e) + w_{ch} \cdot \alpha_{agi} (T_{ag} - T_e) \quad (I.92)$$

L'interconnecteur partie anodique

$$S_{fi} = \frac{w.i.V_{rf} + (w_{ch} + 2.l_{ch}) \alpha_{fgi} (T_{fg} - T_{fi})}{w \left(\frac{l-l_e}{2} \right) - w_{ch} \cdot l_{ch}} \quad (I.93)$$

L'interconnecteur partie cathodique

$$S_{fi} = \frac{w.i.V_{ra} + (w_{ch} + 2.l_{ch}) \alpha_{agi} (T_{ag} - T_{ai})}{w \left(\frac{l-l_e}{2} \right) - w_{ch} \cdot l_{ch}} \quad (I.94)$$

Les conditions aux limites sont données par un flux de chaleur nulle aux extrémités des parties solides de la cellule et une température constante au début des canaux anodique et cathodique de la pile.

Colpan et al [82], ont présenté un modèle de transfert de chaleur bidimensionnel et instationnaire dans une SOFC. Le modèle englobe tous les modes de transfert de chaleur, la conduction, la convection et le rayonnement, il considère les polarisations, ohmique,

d'activation et de concentration, Le modèle est validé par les résultats d'un test de référence et deux études numériques obtenues à partir de la littérature. Les équations gouvernantes le transport de chaleur dans la pile sont données par chaque élément.

a)- Les canaux de la pile

L'équation gouvernante le transfert de chaleur dans le canal anodique est donnée par :

$$\rho.C_p \cdot \frac{\partial T}{\partial t} + \sum_{i=1}^n \frac{\partial}{\partial x} (H_i \cdot N_i) = \frac{h_{conv} (T_{PEN} - T) + h_{ray} (T_{int} - T) - \frac{i}{4.F} \cdot H_{O_2} \cdot \left(\frac{w}{w_{can}} \right)}{Ha_{can}} \quad (I.95)$$

L'équation gouvernante le transfert de chaleur dans le canal cathodique est donnée par l'Eq (I.93). Où N_i est le débit molaire, H est l'enthalpie spécifique et F est le nombre de Faraday (96 485,3321233 C.mol⁻¹).

$$\rho.C_p \cdot \frac{\partial T}{\partial t} + \sum_{i=1}^n \frac{\partial}{\partial x} (H_i \cdot N_i) = \left(\frac{h_{conv} (T_{PEN} - T) + h_{ray} (T_{int} - T)}{Ha_{can}} \right) \cdot \left(\frac{\sum H_{prod} \cdot N_{prod} - \sum H_{react} \cdot N_{react}}{Ha_{can}} \right) \cdot \left(\frac{w}{w_{can}} \right) \quad (I.96)$$

b)- La Partie solide

L'équation gouvernante le transfert de chaleur dans cœur de la pile est donnée par :

$$\frac{\rho C_p}{\lambda} \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{1}{\lambda} \cdot \frac{\sum \Delta H \cdot N - i \cdot V}{Ha_{PEN}} \quad (I.97)$$

La condition à la limite électrolyte-canaux est donnée par l'Eq (I.47).

$$-\lambda_{PEN} \cdot \frac{\partial T}{\partial y} = \frac{w_{can}}{w} \cdot [h_{conv} (T - T_{gaz}) + h_{ray} (T - T_{int})] + \lambda_{int} \cdot \left(1 - \frac{w_{can}}{w} \right) \frac{(T - T_{int})}{Ha_{can}} \quad (I.98)$$

L'équation gouvernante le transfert de chaleur dans l'interconnecteur est donnée par :

$$\frac{\rho C_p}{\lambda} \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \quad (I.99)$$

La condition à la limite Interconnecteur- canaux est donnée par l'équation suivante :

$$-\lambda_{int} \cdot \frac{\partial T}{\partial y} = \frac{w_{can}}{w} \cdot [h_{conv} (T - T_{gaz}) + h_{ray} (T - T_{PEN})] + \lambda_{int} \cdot \left(1 - \frac{w_{can}}{w} \right) \frac{(T - T_a)}{Ha_{can}} \quad (I.100)$$

Où w et w_{can} sont les largeurs de la cellule et du canal, Ha_{can} est la hauteur de canal, h est le coefficient de transfert de chaleur convectif où radiatif.

Les conditions aux limites sont données par un flux de chaleur nulle aux extrémités des parties solides de la cellule et une température constante au début des canaux anodique et cathodique de la pile.

Chyou et al [83], se sont concentrés sur la conception et l'analyse thermique de la pile (SOFC), ils ont mis une isolation en tant qu'une pièce jointe d'un pile SOFC pour réduire la perte de chaleur. En outre, ils ont aussi élaboré un modèle de transfert de chaleur bidimensionnelle pour l'analyse de conception simplifiée avec une méthodologie de calcul pour caractériser la performance thermique d'une SOFC planaire. Les équations gouvernantes le transport de chaleur dans la pile sont données par chaque élément.

a)- Les canaux de la pile

L'équation gouvernante le transfert de chaleur dans les canaux de la pile est donnée par :

$$\sum_{i=1}^n \frac{\partial(Cp_i \cdot N_i \cdot T)}{\partial x} \cdot dx - A \cdot h \cdot (T_s - T) = Q \quad (I.101)$$

b)- La partie solide

L'équation gouvernante le transfert de chaleur dans les éléments solide de la pile est donnée par l'Eq (I.99).

$$\left(\lambda \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \lambda \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right) dx \cdot dy \cdot dz - A_f h_f (T - T_f) - A_a h_a (T - T_a) = Q \quad (I.102)$$

Où Q est la source de chaleur, elle est donnée par la formule suivante :

$$Q = -Q_f - Q_a - i \cdot (\eta_{Nernst} - \eta_{Ohm} - \eta_{act} - \eta_{con}) \quad (I.103)$$

Les conditions aux limites sont données par un flux de chaleur nulle aux extrémités des parties solides de la cellule et une température constante au début des canaux anodique et cathodique de la pile.

I.3.3. Modélisations tridimensionnelle des phénomènes de transfert de chaleur

Inui et al [84], 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 pour 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.

Le calcul de température se fait par application de l'équation de conservation d'énergie dans la partie solide de la pile. Les conditions aux limites sont données par le flux de chaleur nulle autour de la pile et une température constante au début des canaux anodique et cathodique de la pile. Les équations gouvernantes le transport de chaleur dans la pile sont données par chaque élément.

a)- Les canaux de la pile

L'équation gouvernante le transfert de chaleur dans le canal anodique est donnée par l'Eq (I.104).

$$\frac{\partial}{\partial x} \left\{ \sum_{i=1}^n h_i \cdot N_i \right\} = \Delta N_s q_s - w \frac{i}{2.F} (h_h - h_v) - w_{ch} \alpha_{fge} (T_{fg} - T_e) - (w_{ch} + 2.l_{ch}) \alpha_{fgi} (T_{fg} - T_{fi}) \quad (\text{I.104})$$

L'équation gouvernante le transfert de chaleur dans le canal cathodique est donnée par :

$$\frac{\partial}{\partial x} \left\{ \sum_{i=1}^n h_i \cdot N_i \right\} = -w \frac{i}{4.F} h_0 - w_{ch} \alpha_{age} (T_{ag} - T_e) - (w_{ch} + 2.l_{ch}) \alpha_{agi} (T_{ag} - T_{ai}) \quad (\text{I.105})$$

b)- La partie solide

L'équation gouvernante le transfert de chaleur dans la partie solide de la pile est donnée par l'équation suivante :

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left\{ \lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right\} + \frac{\partial}{\partial y} \left\{ \lambda \frac{\partial T}{\partial y} \right\} + \frac{\partial}{\partial z} \left\{ \lambda \frac{\partial T}{\partial z} \right\} + S \quad (\text{I.106})$$

Dans le code de simulation utilisé, les effets de transfert de chaleur par convection sont pris en compte par un terme source de chaleur dans chaque partie solide de la pile.

Cœur de la pile

$$S_e = \frac{1}{w.l_e} \left\{ w \frac{i}{2.F} \Delta H_v - w.i (E - V_{af} - V_{aa} - V_{re}) + w \frac{i}{2.F} \left(h_h - h_v + \frac{1}{2} h_0 \right) + -w_{ch} \alpha_{fge} (T_{fg} - T_e) + (w_{ch} + 2.l_{ch}) \alpha_{agi} (T_{ag} - T_e) \right\} \quad (\text{I.107})$$

L'interconnecteur partie anodique

$$S_{fi} = \frac{w.i.V_{rf} + (w_{ch} + 2.l_{ch}) \alpha_{fgi} (T_{fg} - T_{fi})}{w \left(\frac{l - l_e}{2} \right) - w_{ch} \cdot l_{ch}} \quad (\text{I.108})$$

L'interconnecteur partie cathodique

$$S_{fi} = \frac{w.i.V_{ra} + (w_{ch} + 2.l_{ch}) \alpha_{agi} (T_{ag} - T_{ai})}{w \left(\frac{l - l_e}{2} \right) - w_{ch} \cdot l_{ch}} \quad (\text{I.109})$$

Où N est le débit molaire du gaz [mol/s]. ΔN_s la variation de la vitesse d'écoulement en moles de monoxyde de carbone par unité de longueur par la réaction de déplacement [mol/s.m], q_s la génération de chaleur par unité de moles par la réaction de déplacement [j/mol], l_{ch} la hauteur de canal, α le coefficient de transfert de chaleur. ΔH_v est l'enthalpie par mole généré par l'oxydation d'une unité de l'hydrogène, E la force électromotrice, V_{af} et V_{aa} les surtensions

d'activation au niveau des électrodes carburant et d'air, V_{re} , V_{rf} et V_{ra} la tension résistif tombe dans l'électrolyte/électrodes, l'interconnecteur côté anodique et l'interconnecteur côté cathodique. l et l_e les hauteurs de la cellule et de électrolyte / électrodes, h l'enthalpie du gaz par unité molaire [j/mol], h' l'enthalpie par mole de gaz dans les électrodes / électrolyte [j/mol], w la hauteur de canal, w_{ch} la largeur de canal, l_{ch} la hauteur de canal, α le coefficient de transfert de chaleur. F est la constante de Faraday. Les indices h, v, e, fi, ai, fg, ag, fge et age sont respectivement l'hydrogène, vapeur d'eau, électrodes/électrolyte, interconnecteur coté fuel, interconnecteur coté air, fuel gaz, aire gaz, fuel gaz électrodes/électrolyte et aire gaz électrodes/électrolyte.

Chaisantikulwat et al [85], ont présenté un modèle tridimensionnel et instationnaire d'une SOFC planeaire à anode supporté, il prévoit la courbe de polarisation (potentiel/densité de courant), les champs des fractions molaires, la vitesse, la température, les concentrations d'espèce et la distribution du courant dans la cellule ...etc. Le modèle est basé sur un transfert de chaleur par conduction dans la partie solide (interconnecteur et électrolyte) et un transfert de chaleur par convection et conduction dans les parties poreuses (électrodes) et utilise une conductivité thermique effective. Les équations gouvernantes le transport de chaleur dans la pile sont données par chaque élément.

a)- Les canaux de la pile

Le transfert de chaleur dans les canaux de la pile, est gouverné par l'Eq (I.110).

$$(\rho C_p)_f \frac{\partial T_f}{\partial t} = \left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial}{\partial x} \left\{ \lambda_{eff} \frac{\partial T}{\partial x} - \sum_{i=1}^n h_i \cdot x_i \right\} \\ + \frac{\partial}{\partial y} \left\{ \lambda_{eff} \frac{\partial T}{\partial y} - \sum_{i=1}^n h_i \cdot x_i \right\} \\ + \frac{\partial}{\partial z} \left\{ \lambda_{eff} \frac{\partial T}{\partial z} - \sum_{i=1}^n h_i \cdot x_i \right\} \end{array} \right\} + (\rho C_p)_f \cdot u \cdot \left(\begin{array}{l} \frac{\partial T}{\partial x} \\ + \frac{\partial T}{\partial y} \\ + \frac{\partial T}{\partial z} \end{array} \right) \quad (I.110)$$

Où h_i est l'enthalpie de l'espèce, X_i est la fraction de masse de l'espèce, i est l'espèce (chaque composant des gaz), u est la vitesse.

La convection et l'effet radiatif ont été utilisés comme condition aux limites le long des parois des canaux. Eq (I.111).

$$\left\{ \lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right\} + \left\{ \lambda \frac{\partial T}{\partial y} \right\} + \left\{ \lambda \frac{\partial T}{\partial z} \right\} = h_f (T_f - T_s) + e \cdot \sigma \cdot \beta \cdot (T_f^4 - T_s^4) \quad (I.111)$$

Où T_f est la température de fluide, T_s est la température de solide, e est l'émissivité de solide, σ est la constante de Stefan-Boltzmann, β est le facteur de vue radiatif (facteur de forme). Les conditions aux limites sont données par le flux de chaleur nulle autour de la pile. La

résolution de ce modèle se fait par utilisation de Logiciel COMSOL (2005) basé sur la Méthode des éléments finis.

b)- La partie solide

L'équation gouvernante le transfert de chaleur dans la partie solide de la pile est donnée par l'équation suivante :

$$\frac{\partial}{\partial t}((\rho C_p)T) = \frac{\partial}{\partial x} \left\{ \lambda_{eff} \frac{\partial T}{\partial x} \right\} + \frac{\partial}{\partial y} \left\{ \lambda_{eff} \frac{\partial T}{\partial y} \right\} + \frac{\partial}{\partial z} \left\{ \lambda_{eff} \frac{\partial T}{\partial z} \right\} + S \quad (I.112)$$

La conductivité thermique effective est donnée par :

$$\lambda_{eff} = \varepsilon \cdot \lambda_f + (1 - \varepsilon) \lambda_s \quad (I.113)$$

La source de chaleur prise est la somme des trois sources: source de chaleur due aux surtensions ohmique appliquée dans l'électrolyte, l'interconnecteur et les électrodes équation (I.114), les expressions de la conductivité électrique en fonction de la température sont montrées sur le **Tableau I.10**, la source de chaleur due à la surtension d'activation appliquée aux interfaces électrode/électrolyte, Eq (I.115), et la source de chaleur chimique appliquée à l'interface anode/électrolyte équation (I.116).

$$S_{Ohm} = \frac{i^2}{\sigma} \quad (I.114)$$

$$S_{act} = i \cdot \eta_{act} \quad (I.115)$$

$$S_{ch} = i \cdot \left(-\frac{T(\Delta S)}{2.F} \right) \quad (I.116)$$

La condition à la limite électrode- électrolyte est donnée par l'Eq (1.117).

$$\lambda_{eff} \frac{\partial T}{\partial x} + \lambda_{eff} \frac{\partial T}{\partial y} + \lambda_{eff} \frac{\partial T}{\partial z} = i \cdot \left(-\frac{T(\Delta S)}{2.F} + \eta_{act} \right) \quad (I.117)$$

Les conditions aux limites sont données par un flux de chaleur nulle aux extrémités des parties solides de la cellule et une température constante au début des canaux anodique et cathodique de la pile.

Tableau I.10. Expressions de la conductivité électrique. [85].

Composants	expressions
Electrolyte	$\sigma_{ele} = 3.34 \times 10^4 \exp(-10300/T)$
Cathode	$\sigma_{cat} = \frac{4.0 \times 10^7}{T} \exp(-1200/T)$
Anode	$\sigma_{an} = \frac{9.0 \times 10^7}{T} \exp(-1150/T)$
Inter connecteur	$\sigma_{intc} = 4 \times 10^6$

Kakaç et al [32], ont entamé une étude bibliographique géniale sur les modèles physiques de la pile à combustible SOFC planaire ou tubulaire, ils ont utilisé cent vingt et une références, ils contiennent des modèles électrochimiques, la dynamique des gaz, le transfert de masse et le transfert de chaleur. L'étude bibliographique effectuée par les auteurs englobe tous les modes de transfert de chaleur.

Les équations gouvernantes le transport de chaleur dans la pile sont données par chaque élément.

a)- Les canaux de la pile

L'équation gouvernante le transfert de chaleur dans les canaux anodique et cathodique est donnée par l'Eq (I.118).

Où S_e est l'énergie du aux termes sources de chaleur, S_{rad} est le l'énergie du aux termes de transfert de chaleur par rayonnement.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho.C_p.T) - \frac{\partial P}{\partial t} + \left(\begin{array}{c} \frac{\partial(\rho.u.C_p.T)}{\partial x} \\ + \frac{\partial(\rho.v.C_p.T)}{\partial y} \\ + \frac{\partial(\rho.w.C_p.T)}{\partial z} \end{array} \right) = \left(\begin{array}{c} \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda_{eff} \frac{\partial T}{\partial x} \right) \\ + \frac{\partial}{\partial y} \left(\lambda_{eff} \frac{\partial T}{\partial y} \right) \\ + \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda_{eff} \frac{\partial T}{\partial z} \right) \end{array} \right) + S_e + S_{rad} \quad (I.118)$$

b)- La partie solide

L'équation gouvernante le transfert de chaleur dans les deux électrodes est donnée par l'Eq (I.119).

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho.\varepsilon.C_p.T) - \varepsilon \frac{\partial P}{\partial t} + \left(\begin{array}{c} \frac{\partial(\rho.u.\varepsilon.C_p.T)}{\partial x} \\ + \frac{\partial(\rho.v.\varepsilon.C_p.T)}{\partial y} \\ + \frac{\partial(\rho.w.\varepsilon.C_p.T)}{\partial z} \end{array} \right) = \left(\begin{array}{c} \frac{\partial}{\partial x} \varepsilon \left(\lambda_{eff} \frac{\partial T}{\partial x} - \sum_{i=1}^n h_i \cdot J_i \right) \\ + \frac{\partial}{\partial y} \varepsilon \left(\lambda_{eff} \frac{\partial T}{\partial y} - \sum_{i=1}^n h_i \cdot J_i \right) \\ + \frac{\partial}{\partial z} \varepsilon \left(\lambda_{eff} \frac{\partial T}{\partial z} - \sum_{i=1}^n h_i \cdot J_i \right) \end{array} \right) + S_e + S_{rad} \quad (I.119)$$

Où J est le flux massique diffusé, h est le coefficient de transfert de chaleur par convection, i est l'espèce.

La conductivité thermique effective est calculée par l'équation suivante :

$$\lambda_{eff} = \varepsilon.\lambda_f + (1 - \varepsilon)\lambda_s \quad (I.120)$$

L'équation gouvernante le transfert de chaleur dans l'électrolyte est donnée par :

$$\frac{d}{dx} \left(-A.\lambda \frac{dT}{dx} \right) \Delta x = q_{e-ele.a} + q_{e-ele.c} + q_{conv-ele.a} + q_{conv-ele.c} + q_{rad.e} + q_{gen-e} + q_{e-joule} \quad (I.121)$$

A est la surface perpendiculaire, $q_{e-ele,a}$ est le flux de chaleur par conduction entre l'électrolyte et l'anode, $q_{e-ele,c}$ est le flux de chaleur par conduction entre l'électrolyte et la cathode, $q_{conv-ele,a}$ est le flux de chaleur par convection entre l'électrolyte et les réactifs dans l'anode, $q_{conv-ele,c}$ est le flux de chaleur par convection entre l'électrolyte et les réactifs dans la cathode, $S_{rad,e}$ est le l'énergie due au transfert de chaleur par rayonnement, q_{gen-e} est le terme de production de chaleur due aux changements de l'entropie, $S_{e,joul}$ est le flux de chaleur produit par la source ohmique.

L'équation gouvernante le transfert de chaleur dans l'interconnecteur est donnée par :

$$\frac{d}{dx} \left(-A \lambda \frac{dT}{dx} \right) \Delta x = q_{int-ele} + q_{conv-canal} + q_{rad.canal} + q_{gen-int} + q_{int-joule} \quad (I.122)$$

A est la surface perpendiculaire, $q_{int-ele}$ est le flux de chaleur par conduction entre l'électrolyte et les électrodes, $q_{conv-canal}$ est le flux de chaleur par convection entre l'électrolyte et les gaz dans les canaux, $S_{rad.canal}$ est le l'énergie du au transfert de chaleur par rayonnement entre l'interconnecteur et les gaz dans les canaux, q_{gen-e} est le terme de production de chaleur dû aux changements de l'entropie, $S_{e,joul}$ est le flux de chaleur produit par le terme source ohmique. Les conditions aux limites sont données par un flux de chaleur nulle aux extrémités des parties solides de la cellule et une température constante au début des canaux anodique et cathodique de la pile.

Andreassi et al [47], ont étudié et analysé la diffusion à l'intérieur des électrodes, l'écoulement des gaz à l'intérieur des canaux et la distribution de la densité de courant et la répartition de la température dans un étage circulaire d'une pile à combustible SOFC planaire à anode supporté. Le modèle tridimensionnel et stationnaire proposé englobe la dynamique des fluides, le transfert de masse, les charges électriques, les réactions électrochimiques et le transfert de chaleur par conduction et convection, ils ont négligé le transfert de chaleur par rayonnement, les pertes Ohmique et d'activation sont comptabilisées comme des sources de chaleur. La résolution de système des équations de modèle proposé est faite à l'aide de code FEMLAB.

Yang et al [86], ont décrit un outil de simulation tridimensionnel et stationnaire qui néglige le transfert radiatif pour les piles à oxyde solide planaire à anode supporté. La source de chaleur est la somme de trois sources, à savoir, la source due aux réactions électrochimiques, la source due aux surtensions d'activation et la source due aux surtensions ohmiques. L'outil décrit a l'objet de simuler plusieurs paramètres en tenant compte des modèles de cellules à contre-courant, les distributions de température, les variations des espèces et les densités de courant ont été calculés dans différentes conditions.

Ho et al [87], ont étudié une SOFC planaire à anode supportée avec un modèle numérique instationnaire en trois dimensions, il contient les équations décrivant le transport des processus chimiques et électrochimiques de la masse, les espèces et l'énergie, il néglige le transfert thermique par rayonnement et tous types de source de chaleur sauf la source chimique, la résolution des équations est faite par le logiciel Star-CD.

Khaleel et al [88], ont décrit un outil de simulation tridimensionnel des piles à oxyde solide planaire à anode supporté. L'outil combine la polyvalence et l'efficacité d'un code d'analyse en éléments finis, MARC, avec un module électrochimique robuste développé en interne (CE), il est basé sur les caractéristiques obtenues expérimentalement, il calcule la distribution de la densité de courant, la production de chaleur, et les concentrations des espèces du combustible et du comburant.

Wang et al [89], ont décrit un outil de simulation numérique tridimensionnel stationnaire pour le calcul des piles à oxyde solide planaire qui utilise la méthode des volumes finis pour la résolution des équations. Le transfert de chaleur radiatif est négligé et la source de chaleur est la somme de trois sources, la source due aux réactions électrochimiques, la source due aux surtensions d'activation et la source due aux surtensions ohmiques. Ils ont montré à partir de la cellule à anode supporté, les distributions de température, les concentrations molaires des espèces gazeuses, la densité de courant et en plus le potentiel a été calculé selon deux cas d'écoulement (contre-courant et co-courant).

Sun et al [90], ont étudié et évalué l'influence de la conception des canaux sur une seule unité de pile planaire micro-oxyde solide à électrolyte supporté, selon un modèle tridimensionnel et instationnaire néglige le transfert radiatif. Ils ont comparés les résultats des trois différentes compositions de comburant, 100% O₂, 50% N₂ /50% O₂ et de l'air, aussi une comparaison entre les conditions thermiques, adiabatique et isotherme appliquées à la limite extérieure de la SOFC.

Wang et al [91], ont présenté un modèle mathématique en trois dimensions pour simuler les caractéristiques électrochimiques et les multi-transferts espèces/chaleur dans une (SOFC) planaire à l'état d'équilibre. Les équations qui régissent la continuité, la masse, l'énergie et la conservation de la charge électrique sont résolues simultanément par la méthode des volumes finis. Les Polarisation d'activation, ohmique, et concentration sont considérées comme les principales sources de chaleur.

Danilov et al [92], ont étudié l'influence de divers facteurs sur le rendement de la pile à combustible SOFC à anode supporté avec une géométrie des canaux parallèles où l'écoulement est co-courant. Le modèle tridimensionnel est instationnaire appliqué sur le volume de contrôle

composé d'un étage de vingt-neuf cellules en parallèle englobe la dynamique des fluides, l'électrochimie, le transfert de masse et le transfert de chaleur par les deux modes convectif et conductif, la production de l'énergie calorifique est due aux pertes d'activation des réactions chimiques et l'effet Joule due à la résistivité des matériaux au passage de courant. La validation des résultats obtenue par la simulation des équations représentant les phénomènes étudiés à l'aide de code commercial FLUENT est faite par comparaison par rapport aux résultats d'autres modèles trouvés dans la bibliographie. Ils ont confirmé que le modèle proposé est utile pour l'optimisation de la conception de pile à combustible SOFC et les conditions de fonctionnement.

Jiang et al [93], ont étudié le comportement thermique et la contrainte thermique dans un étage planaire de pile à combustible SOFC à anode supportée lié au joint d'étanchéité où les canaux sont parallèles et l'écoulement est co-courant. Le modèle tridimensionnel dans l'état d'équilibre utilisé dans cette étude est la résultante de couplage des phénomènes physiques telle que : la chimie et l'électrochimie, la dynamique des fluides dans les canaux, le transfert de masse dans les électrodes et le transfert de chaleur par convection et conduction dans tous les éléments étudiés les différentes pertes ohmiques, d'activation et de concentration sont considérées les sources productives de chaleur. La simulation des équations qui représente le phénomène multiphysique est faite à l'aide des deux codes commerciaux FLUENT et ANSYS.

Hawkes et al [94], ont proposé un nouveau modèle pour étudier l'influence de plusieurs paramètres sur la performance d'un empilement de soixante cellules qui représentent le quart de module ILS (module de pile à combustible SOFC) qui a été fabriqué par Ceramtec. Le modèle tridimensionnel appliqué sur la pile planaire avec des canaux croisés collecte la dynamique des fluides, la chimie et l'électrochimie, le transfert de masse et le transfert de chaleur par conduction et convection, les pertes d'activation, de concentration et ohmiques sont reconnues, les sources de l'énergie calorifique. Les résultats sont obtenus à partir de simulation des équations gouvernantes les phénomènes couplés par le code commercial FLUENT.

Park et al [95], ont étudié par un modèle tridimensionnel et stationnaire les effets de différents modèles géométriques de canal du fuel H_2 sur les performances d'un étage FT-SOFC (Tube-Plat-pile à combustible à oxyde solide) à anode supportée composé de trois canaux. Les modèles physiques employés représentant les réactions électrochimiques, la mécanique des fluides et le transfert de masse, le transfert de chaleur par conduction et convection a été aussi utilisé, la source productive de l'énergie calorifique est la résultante des pertes d'activation et de l'effet Joule. Les résultats obtenus à partir de la simulation des équations régissent les phénomènes étudiés par le code commercial STAR-CD (code commercial de simulation) sont

très acceptable par-rapport aux résultats expérimentaux. Ils ont conclu que la meilleure performance est peut être obtenu dans le cas des canaux plus larges et avec un taux de diffusion massique d'hydrogène élevée.

Qu et al [96], ont étudié les processus électrochimiques d'une moitié de cellule SOFC planaire à anode supporté avec une géométrie des canaux monolithique et évaluer la performance de la conception proposée. Le modèle tridimensionnel en état d'équilibre gouverne les processus électrochimiques, la dynamique des fluides le transfert de masse, le transport d'énergie calorifique est étudié pour la conduction et convection, les pertes d'activations de la réaction chimique et l'effet de joules sont comptabilisés par des termes sources additionnelles dans l'équation de l'énergie. La simulation des équations gouvernantes les phénomènes étudiés est réalisée par le code commercial FLUENT. La résultante de la simulation a été validée par-rapport aux résultats expérimentaux. Ils ont conclu que la géométrie des canaux cathodiques a un effet important sur la distribution de l'oxygène et donc la performance globale de la SOFC.

Mauro et al [97], ont proposé un nouveau algorithme par la méthode des éléments finis en trois dimensions pour étudier les différents paramètres dans une pile à combustible SOFC planaire à anode supporté avec des canaux parallèles pour configuration d'écoulement contre-courant, le domaine d'étude est délimité par le cœur de la pile (anode, cathode et électrolyte) et les canaux de fuel et d'air. Le modèle tridimensionnel et stationnaire développé regroupe la dynamique des fluides, l'électrochimie, le transfert de masse, le transfert de chaleur par conduction et convection, la production de l'énergie thermique est due aux pertes d'activation, de concentration et la résistance électrique des matériaux produit par l'effet de joules. La simulation de modèle a été fondée par le code CBS (code de calcul développé par les auteurs), les résultats obtenus sont comparés aux données expérimentales disponibles dans la littérature et également elles sont confirmées par des résultats bidimensionnels.

Nakajo et al [98,99], ont présenté une analyse tridimensionnelle de la structure mécanique dans les conditions de fonctionnement, la performance initiale et de la dégradation d'un empilement dans deux parties (2 articles), la première partie porte sur les effets des conditions de fonctionnement et les alternatives de conception. Le modèle présenté combine des modèles de thermo-électrochimique pour une pile à combustible SOFC planaire à anode supporté avec des canaux parallèles pour deux Configurations d'écoulement contre-courant et co-courant. Le modèle considère seulement le transfert de chaleur par conduction et convection et uniquement la perte ohmique. Le traitement de système des équations qui représente les phénomènes étudiés faits à l'aide du code de simulation ABAQUS pour la construction

mécanique et gPROMS (code commercial de simulation) pour le calcul des phénomènes à l'intérieur de l'empilement de la pile.

Park et al [100], ont examiné l'influence des paramètres géométriques sur la production de courant entre cinq types d'alimentation par carburant et air dans une pile à combustible SOFC planaire à anode supportée composée d'un empilement de six étages de cellule, avec la conservation de nombre des étages et le nombre de cellules dans chaque étage. Le modèle tridimensionnel et stationnaire regroupe les différents phénomènes tels que l'écoulement du fluide, l'électrochimie, le transfert de masse et le transfert de chaleur par conduction et convection, la production de chaleur est la résultant des pertes d'activation, de concentration et de l'effet de joules. Les résultats sont obtenus à partir de la simulation numérique par le code commercial STAR-CD, et elles sont validés par-rapport aux résultats expérimentaux réalisés. Les résultats obtenus par simulation des conceptions géométriques des canaux parallèles, serpentins, en expansion, effilés et hybride montrent que la conception des canaux serpentins qui relie la sortie de chaque étage avec l'orifice d'entrée de l'étage suivant dans l'ordre de série, possède la plus forte densité de courant en raison de la forte pression d'hydrogène.

Jiayu Li [101], ont proposé et utilisé un modèle pour étudier systématiquement les effets de la composition et de la taille des particules des matériaux d'électrode sur les propriétés électrochimiques et mécaniques dans une cellule SOFC micro-tubulaire à anode supporté. Le modèle proposé regroupe les sous modèle électrique, électrochimique, la mécanique des fluides, la mécanique des structures, le transfert de masse et de chaleur par conduction et convection, les sources de chaleur comptabilisées sont la résultante des pertes d'activation, de concentration et ohmique. Le système des équations tridimensionnelle et stationnaire représentant les phénomènes étudiés sont résolues à l'aide du code commercial COMSOL de MATLAB. Ils ont montré que la stabilité mécanique diminue considérablement avec l'augmentation de la teneur de Ni (Nickel).

Peksen et al [102], ont exposé une analyse thermomécanique en trois dimensions d'un 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. Le modèle résolu par le code CSM contient de la mécanique des fluides et de la construction mécanique couplées. Ils ont déterminé les mécanismes qui déclenchent la contrainte thermomécanique pendant le chauffage, le fonctionnement et l'étape l'arrêt.

Yan et al [103], ont examiné et évalué un nouveau design extérieur en trois dimensions d'un mineur empilement de pile à combustible SOFC planaire à anode supportée composée de

trois étages de cellules avec une configuration monolithique des canaux et un écoulement croisé. L'analyse et la résolution de modèle instationnaire proposé qui contient la dynamique de fluide incompressible en régime turbulent dans les canaux pour les deux fluides air et carburant, le transfert de chaleur par conduction et convection a été faite à l'aide de code commercial ANSYS. Le design proposé est jugé par une performance excellente et bonne stabilité.

Peksen [104], a étudié dans un environnement tridimensionnel la thermomécanique d'un mineur étage composé de six cellules planaire SOFC par un modèle couplé pour localiser les zones critiques dans la pile à combustible à long terme. Le modèle contient aussi l'électrochimie, le transfert de chaleur par les trois modes (conduction, convection et rayonnement), la dynamique des fluides dans les canaux de la pile et la production de chaleur due à la perte ohmique. La résolution de modèle couplé a été faite à l'aide de code commercial ANSYS pour la structure mécanique et FLUENT pour les autres modèles.

Elizalde-Blancas et al [105], ont évalué l'utilisation potentielle de biogaz produit à partir de différentes sources organiques transformé en bio digesteurs comme carburant pour les SOFC. Le modèle proposé dans cette étude englobe le transport des charges électriques, les espèces chimiques et d'énergie dans le cœur d'une cellule SOFC cylindrique à anode supportée, le modèle instationnaire utilise que le transfert thermique par conduction, les sources de chaleur due aux pertes ohmique et les réactions chimiques sont comptabilisées par un terme source additionnel dans l'équation de l'énergie. La résolution des équations gouvernantes est réalisée à l'aide d'un code non commercial développé par les auteurs (DREAM_SOFC), les résultats obtenus par les auteurs sont validés et comparés avec les résultats expérimentaux.

Fan et al [106], ont présenté une étude pour but de prédire l'influence de différents paramètres cinétiques de réaction de reformage sur la performance, avec une attention particulière à la cinétique de la réaction du reformage. Le modèle tridimensionnel et stationnaire d'une seule cellule planaire d'une pile à combustible SOFC à anode supportée avec des canaux monolithique ou l'écoulement est co-courant. Le modèle contient de la dynamique des fluides, le transfert de masse et de chaleur, la chimie et de l'électrochimie avec une attention pour la réaction de reformage interne. Les modes de transfert de chaleur par conduction et convection sont étudiés. La production de chaleur est due aux pertes d'activation, de concentration et de l'effet de joules. Aussi ils ont réalisé une analyse comparative avec des différents travaux pour valider les résultats des simulations obtenues par le code FLUENT.

Razbani et al [107], ont rapporté un modèle numérique complet d'un écoulement transversal dans un empilement mineur de pile à combustible à oxyde solide composé de six

cellules planaires à électrolyte supporté. Le modèle tridimensionnel et stationnaire comprend la conduction électrique, le transfert de chaleur, le transport de masse en phase gazeuse et les réactions chimiques. L'énergie sous forme de chaleur est supposée transporter par convection et conduction, la source de production de chaleur est due aux pertes chimique, électrochimique et ohmique. Pour vérifier les résultats de la simulation du code COMSOL, un dispositif expérimental d'une pile à six cellules a été construit, la comparaison et validation des valeurs de la température de courant et de tension.

Chapitre II

Modélisations mathématiques

Introduction

Dans le présent chapitre deux modèles mathématiques ont été exposés, le premier modèle concerne une étude thermodynamique de la pile SOFC planaire, où un modèle 0-D de chaque potentiel ou surtension (potentiel de Nernst, potentiel idéal, surtension d'activation, surtension de concentration et la surtension due aux pertes ohmique) est présenté. Le deuxième modèle expose les équations mathématiques qui régissent le phénomène de transfert de chaleur dans les différentes parties solides et poreuses de la pile à combustible à oxyde solide (SOFC) planaire, ces équations sont modélisées à l'état d'équilibre et dans un environnement tridimensionnel.

II.1. Modélisation thermodynamique des piles à combustibles SOFC

II.1.1. Performance des piles à combustible

La tension de la pile SOFC est définie par la différence entre la tension théorique de Nernst et la somme des différentes pertes de tension générées par plusieurs phénomènes :

$$V = E_{Nernst} - Pertes \quad (II.1)$$

E_{Nernst} est le potentiel de Nernst, il est donné par l'équation suivante [1], [2], [4], [8], [9], [10], [13] et [114] :

$$E_{Nernst} = E_0 + \frac{RT}{n.F} \left[\ln \left(\frac{P_{H_2} \cdot P_{O_2}^{0.5}}{P_{H_2O}} \right) \right] \quad (II.2)$$

Où R est la constante des gaz parfaits, T est la température de fonctionnement, n est le nombre des électrons de transfert, F est le nombre de Faraday, P_i est la pression partielle de chaque espèce (hydrogène, oxygène et vapeur d'eau) et E_0 est le potentiel idéal, il est défini généralement par un polynôme de premier ordre en fonction de la température [6], [22], [23], [24], [25], [26], [27], [28], [29] et [114]:

$$E_0 = a + b.T \quad (II.3)$$

Où a et b sont des constantes, elles sont définies par le tableau suivant :

Tableau.II.1. Coefficients a et b utilisés pour le calcul du potentiel idéal.		
a	b	Références
1,253	$-2,4516 \times 10^{-4}$	[6], [22], [23], [24], [25], [26], [27], [28], [29], [114].

Les pertes de tension définies par l'Eq (1), regroupent trois types de pertes ; d'activations, de concentrations et ohmiques.

II.1.2.Surtension Ohmique

Les pertes ohmiques sont dues à la résistance rencontrée par le flux ionique en traversant l'électrolyte et à la résistance rencontrée par les électrons dans les électrodes et le circuit électrique, elles sont principalement dues à l'électrolyte, elles peuvent être réduites en diminuant l'épaisseur de l'électrolyte et en améliorant sa conductivité ionique. L'électrolyte, les interconnexions et les électrodes obéissant à la loi d'Ohm. Les pertes ohmiques sont définies par l'équation suivante :

$$\eta_{Ohm} = i.R \quad (\text{II.4})$$

Où i est la densité de courant et R est la résistance électrique.

La résistance électrique de chaque composant est définie par le rapport de l'épaisseur de l'élément (e) et sa conductivité électrique (σ). Eq (II.5). La conductivité électrique de chaque élément pour des matériaux standard : YSZ (Yttria Stabilized Zirconia), pour l'électrolyte, LSM (Lanthanum Strontium Manganite) pour la cathode Ni-YSZ (Nickel oxide–Yttria Stabilized Zirconia) pour l'anode et SS (Stainles Steel) pour les interconnecteurs) est donnée par le **Tableau.II.2**.

$$R = \frac{e}{\sigma} \quad (\text{II.5})$$

Tableau.II.2. Conductivité électrique des composants de la pile SOFC.

Composants	σ [$\Omega^{-1} \text{ cm}^{-1}$]	Références
Electrolyte	$\sigma_{ele} = 3,34 \times 10^4 \exp(-10300/T)$	[9], [10], [11], [12], [13], [14], [15], [16], [114].
Cathode	$\sigma_{cat} = \frac{4,2 \times 10^7}{T} \exp(-1200/T)$	[9], [10], [11], [12], [13], [14], [15], [16], [114].
Anode	$\sigma_{an} = \frac{9,5 \times 10^7}{T} \exp(-1150/T)$	[9], [10], [11], [12], [13], [14], [15], [16], [114].

II.1.3.Surtension d'activation

La polarisation d'activation est présente quand le taux d'une réaction électrochimique à la surface de l'électrode est contrôlé par le ralentissement de la cinétique pour cette électrode. En d'autres termes, la polarisation d'activation est directement reliée au taux de la réaction électrochimique. Dans les deux cas, pour qu'une réaction chimique ou électrochimique puisse démarrer, les réactifs doivent dépasser une barrière d'activation. Dans

le cas d'une réaction électrochimique où les pertes d'activation (η_{act}) sont supérieures à 50-100 mV, η_{act} est décrite par l'équation suivante :

$$\eta_{Act,j} = \frac{RT}{\alpha.n.F} \cdot \sinh^{-1} \left(\frac{i}{2.i_{0,j}} \right), j = anode, cathode \quad (II.6)$$

Où R est la constante des gaz parfaits, T est la température de fonctionnement, n est le nombre des électrons de transfert, F est le nombre de Faraday, α est le coefficient de transfert électronique où 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 [15], [17], [19], [26], [55] et [114]:

$$i_{0,j} = k_j \cdot \exp \left(-\frac{E_j}{RT} \right), j = anode, cathode \quad (II.7)$$

Où R est la constante des gaz parfaits, T est la température de fonctionnement, k_j et E_j représentent le facteur pré-exponentiel et l'énergie d'activation, ils sont représentés respectivement par une fonction de température de premier ordre et une constante.

Tableau.II.3.

Tableau.II.3. Valeurs et expressions du facteur pré-exponentiel et de l'énergie d'activation.

Anode		Cathode		Références
$k_{an} [Am^{-2}]$	$E_{an} [J mol^{-1}]$	$k_{cat} [Am^{-2}]$	$E_{cat} [J mol^{-1}]$	
$6,54 \cdot 10^{11} \frac{R.T}{2.F}$	$1,4 \times 10^5$	$2,35 \cdot 10^{11} \frac{R.T}{2.F}$	$1,37 \times 10^5$	[15], [17], [19], [26], [55] , [114].

II.1.4.Surtension de concentration

A une électrode, lorsqu'il y a une perte de potentiel due à l'incapacité du système de maintenir les concentrations initiales qui sont nécessaires pour des réactifs, c'est alors que la formation d'un gradient de concentration est logiquement produite. De nombreux facteurs peuvent contribuer à la polarisation de concentration : la faible diffusion du gaz à travers les électrodes poreuses, la dissolution des réactifs où la présence des produits dans les électrodes, la diffusion des réactifs où se trouve des produits du site de la réaction vers l'électrolyte ou l'inverse. A des densités de courant élevées, la faible vitesse du transport des réactifs où des produits vers le site de la réaction est la contribution majeure à la polarisation de concentration. On peut exprimer ces pertes par l'équation simplifiée suivante [35], [38], [39], [42], [75], [76] et [114] :

$$\eta_{conc,j} = -\frac{RT}{n.F} \cdot \ln\left(1 - \frac{i}{i_{l,j}}\right), j = anode, cathode \quad (II.8)$$

où i est la densité du courant et $i_{l,j}$ est le courant limite de chaque électrode, il est généralement représenté par une constante. **Tableau.II.4.**

Tableau.II.4. Valeurs du courant limite dans chaque électrode.

Anode [Am^{-2}]	Cathode [Am^{-2}]	Références
$2,99 \times 10^4$	$2,16 \times 10^4$	[35], [38], [39], [42], [75], [76], [77], [114], [118].

II.1.5.Densité de puissance

La densité de puissance délivrée par la pile à combustible SOFC est définie par le produit de la densité de courant produite par la pile et leur potentiel réel produit. Equation (II.9).

$$P_d = i.E \quad (II.9)$$

II.1.6.Structure du programme

Après avoir collecté les équations représentant le modèle physique, la procédure de réalisation d'un programme ordinateur dans le FORTRAN commencera alors. Ce programme se compose de quatre étapes; La première étape représente la lecture des données qui concerne les paramètres suivants: les coefficients de potentiel idéal 'a' et 'b', la température de fonctionnement «T», la pression d'alimentation 'P', les concentrations des trois espèces « X_{H_2} », ' X_{H_2O} ' et ' X_{O_2} ', la densité de courant limite de chaque électrode ' $i_{l, an}$ ' et ' $i_{l, cat}$ ', le nombre d'électrons de transfert 'n', le nombre de Faraday 'F' et les épaisseurs d'électrolyte et les deux électrodes ' e_{an} ', ' e_{cat} ' et ' e_{ele} '. La deuxième étape concerne le calcul des variables qui ne sont pas des fonctions de densité de courant: les potentiels idéal et de Nernst ' E_0 ' et ' E_{Nernst} ', les conductivités électriques de l'anode ' σ_{an} ', la cathode ' σ_{cat} ' et l'électrolyte ' σ_{ele} ', les résistances électriques de l'électrolyte ' r_{ele} ' et des électrodes ' r_{an} ' et ' r_{cat} ', les facteurs pré-exponentiels de l'anode ' K_{an} ' et de la cathode ' K_{cat} ' et les densités des courants d'échange de l'anode ' $i_{0,an}$ ' et de la cathode ' $i_{0, cat}$ '. La troisième étape de programme concerne le calcul des variables qui sont des fonctions de densité de courant, ces paramètres sont: la perte d'activation, la perte de concentration et la perte ohmique de chaque composant de la cellule (anode, cathode et électrolyte) ' $\eta_{act, an}$ ', ' $\eta_{act, cat}$ ', ' $\eta_{conc, an}$ ', ' $\eta_{conc, cat}$ ', ' $\eta_{Ohm, an}$ ', ' $\eta_{Ohm, cat}$ ' et ' $\eta_{Ohm, ele}$ ', la tension de la cellule 'E' et la densité de puissance de la cellule ' P_d ' pour chaque valeur de densité de courant.

Enfin, la quatrième étape représente l'affichage des résultats obtenus. L'organigramme du programme de calcul est donné par la **Figure.II.1**.

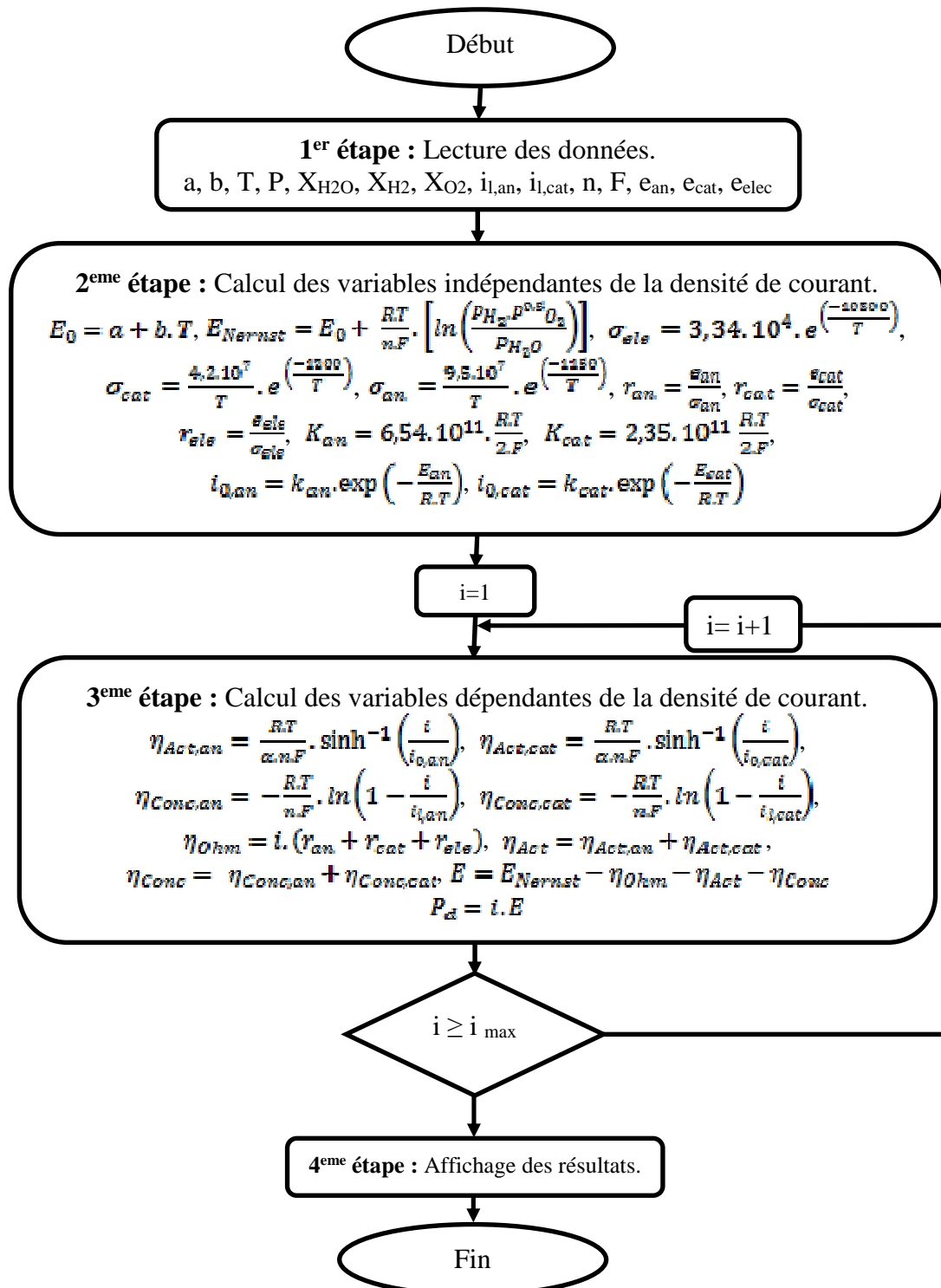


Fig.II.1. Organigramme de programme 0D.

II.2. Modélisation thermique des piles à combustible SOFC

II.2.1. Domaine de calcul

La simulation d'une pile à combustible SOFC complète aurait nécessitera d'un matériel informatique très puissant et d'un temps de simulation excessivement long. Donc, le domaine de calcul est limité à une seule cellule SOFC qui se compose de, deux canaux d'écoulement de gaz, cathodique et anodique, et de la cathode, de l'anode, de l'électrolyte et de deux interconnecteurs anodique et cathodique.

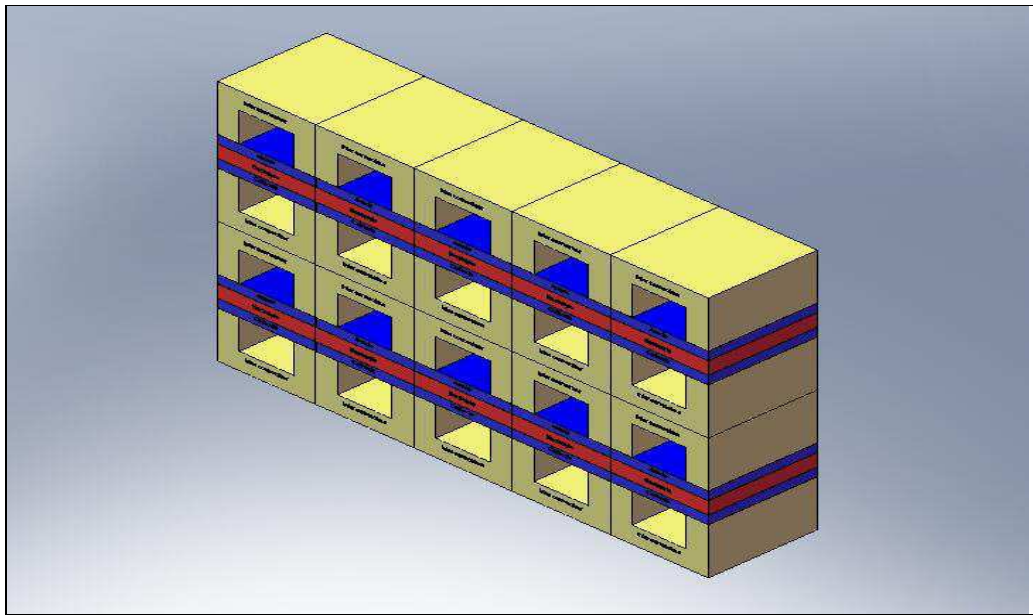


Fig.II.2. Schéma d'une pile SOFC planaire.

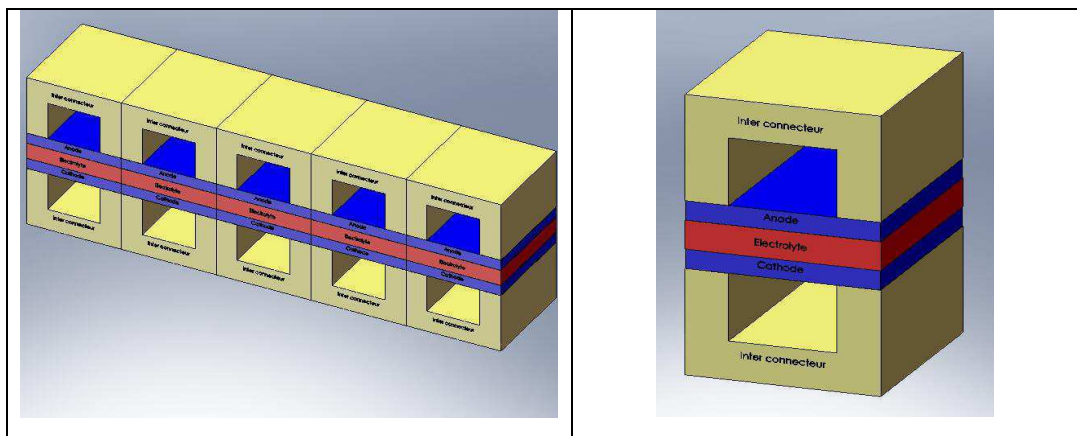


Fig.II.3. Schéma d'un étage de cellules.

Fig.II.4. Schéma d'une cellule.

II.2.2. Hypothèses simplificatrices

La modélisation tridimensionnelle d'une seule cellule en tenant compte de tous les phénomènes physiques (cas réel), représente un vrai problème majeur. A cet effet, les

équations gouvernantes de ces phénomènes deviennent très compliquées, ce qui rend la résolution de système d'équations résultant très difficile à tous les niveaux (complexité des schémas numériques, le temps de calcul, les erreurs numériques...etc.).

Donc il apparait clairement que l'introduction des hypothèses est nécessaire afin de simplifier le système d'équation et rendre le problème plus simple et moins difficile.

Dans ce modeste travail on cite les hypothèses suivantes:

- Un modèle de calcul tridimensionnel et stationnaire;
- Un milieu continu;
- Des composants de la pile homogènes et isotropes;
- La température des fluides à l'entrée des canaux est constante (fluides brassées);
- La conductivité électrique des gaz est négligeable;
- La vitesse d'écoulement dans les canaux supposée très faible;
- Le transfert de chaleur par rayonnement est négligé;
- Une densité de courant constante dans tous les éléments de la pile;

II.2.3. Equations régissant le phénomène du transfert thermique

Dans cette section de ce chapitre, les équations régissant le phénomène de transfert de chaleur dans toutes les parties de la pile à combustible SOFC planaire et les différentes expressions de sources de chaleur dans chaque composant du domaine objet de notre étude ont été présentées.

II.2.3.1. Interconnecteur

L'énergie thermique est transportée par conduction dans les interconnecteurs de la pile, les effets des pertes ohmiques sont pris en considération par un terme additionnel de la source de chaleur produite dans l'équation du bilan d'énergie, ainsi l'équation de conservation d'énergie dans les interconnecteurs est donnée par l'Eq (II.10) pour un environnement tridimensionnel.

$$\frac{\partial}{\partial x} \left\{ \lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right\} + \frac{\partial}{\partial y} \left\{ \lambda \frac{\partial T}{\partial y} \right\} + \frac{\partial}{\partial z} \left\{ \lambda \frac{\partial T}{\partial z} \right\} + S = 0 \quad (\text{II.10})$$

La source d'énergie qui existe dans les deux interconnecteurs de la pile SOFC planaire est due uniquement aux pertes ohmiques ; elle est exprimée par le rapport entre le carré de la densité de courant et la conductivité électrique de l'interconnecteur. Equation (II.11).

$$S = S_{Ohm,in} = \frac{i^2}{\sigma_{in}} \quad (\text{II.11})$$

II.2.3.2. Electrolyte

L'énergie est transportée uniquement par conduction à travers l'électrolyte de la pile SOFC planaire, les effets des pertes ohmiques dues aux passages des ions traversant l'électrolyte sont pris en considération par un terme additionnel de la source de chaleur produite dans l'équation du bilan d'énergie, ce qui donne l'équation de conservation d'énergie tridimensionnelle suivante :

$$\frac{\partial}{\partial x} \left\{ \lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right\} + \frac{\partial}{\partial y} \left\{ \lambda \frac{\partial T}{\partial y} \right\} + \frac{\partial}{\partial z} \left\{ \lambda \frac{\partial T}{\partial z} \right\} + S = 0 \quad (\text{II.12})$$

La source d'énergie existante dans l'électrolyte de la pile SOFC planaire est due uniquement aux pertes ohmiques ; elle est exprimée par le rapport entre le carré de la densité de courant et la conductivité électrique de l'électrolyte. Eq (II.13).

$$S_{Ohm,el} = \frac{i^2}{\sigma_{el}} \quad (\text{II.13})$$

II.2.3.3. Anode

L'énergie thermique est transportée par conduction et convection dans l'anode poreuse de la pile SOFC planaire. Les effets des pertes ohmiques et d'activation sont pris en considération par un terme additionnel de la source de chaleur produite dans l'équation du bilan énergétique, ainsi l'équation de conservation de l'énergie dans la partie solide de l'anode est donnée pour environnement tridimensionnelle par l'équation suivante :

$$\frac{\partial}{\partial x} \left\{ \lambda_s \frac{\partial T}{\partial x} \right\} + \frac{\partial}{\partial y} \left\{ \lambda_s \frac{\partial T}{\partial y} \right\} + \frac{\partial}{\partial z} \left\{ \lambda_s \frac{\partial T}{\partial z} \right\} + S_s = 0 \quad (\text{II.14})$$

La source d'énergie thermique existante dans la partie solide de l'anode est due uniquement aux pertes ohmiques ; elle est exprimée par le rapport entre le carré de la densité de courant et la conductivité électrique de l'anode, ce qui est traduit par l'équation suivante :

$$S_{Ohm,an} = \frac{i^2}{\sigma_{an}} \quad (\text{II.15})$$

Au niveau des pores de l'anode, l'énergie calorifique est transportée par conduction et convection. La vitesse d'écoulement dans les pores de l'anode est supposée très faible, ce qui conduit à un transport d'énergie calorifique conductif en négligeant tout transport convectif. Donc, l'équation de conservation de l'énergie dans les pores de l'anode est donnée pour environnement tridimensionnel par l'Eq (II.16).

$$\frac{\partial}{\partial x} \left\{ \lambda_f \frac{\partial T}{\partial x} \right\} + \frac{\partial}{\partial y} \left\{ \lambda_f \frac{\partial T}{\partial y} \right\} + \frac{\partial}{\partial z} \left\{ \lambda_f \frac{\partial T}{\partial z} \right\} = 0 \quad (\text{II.16})$$

La chaleur est produite uniquement par l'activation des réactions électrochimiques dans le fluide qui circule dans les pores de l'anode. La source de chaleur due aux pertes d'activation est formulée par le produit de perte d'activation et de la densité de courant, ce qui est traduit par l'équation suivante :

$$S_{Act} = \eta_{Act} \cdot i \quad (\text{II.17})$$

La perte d'activation de la réaction chimique est décrite par l'équation de Butler-Volmer. Eq (II.18). [7], [23], [24], [25], [36], [54] et [55].

$$i = i_{0,an} \left[\exp \left(\frac{\alpha \cdot n \cdot F \cdot \eta_{Act,an}}{RT} \right) - \exp \left(- \frac{(1-\alpha) \cdot n \cdot F \cdot \eta_{Act,an}}{RT} \right) \right] \quad (\text{II.18})$$

Où α est le coefficient de transfert électronique ou le coefficient de transfert de charge, n est le nombre d'électron de transfert, qui est égal à 2 pour la réaction de formation de l'eau, F est le nombre de Faraday, R est la constante des gaz parfait, T est la température de lieu de réaction et $i_{0,an}$ est la densité de courant d'échange de l'anode.

Pour un coefficient de transfert électronique de ($\alpha=0.5$), la quantification de la perte d'activation par l'équation non linéaire de Butler-Volmer peut-être simplifiée et écrite par l'équation suivante :

$$\eta_{Act,an} = \frac{RT}{\alpha \cdot n \cdot F} \cdot \sinh^{-1} \left(\frac{i}{2 \cdot i_{0,an}} \right) \quad (\text{II.19})$$

Pour une porosité de l'anode ε , l'équation gouvernante le transport et la génération de l'énergie thermique peut-être écrite sous la forme suivante :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial}{\partial x} \left\{ (\varepsilon \cdot \lambda_f + (1-\varepsilon) \cdot \lambda_s) \frac{\partial T}{\partial x} \right\} + \\ \frac{\partial}{\partial y} \left\{ (\varepsilon \cdot \lambda_f + (1-\varepsilon) \cdot \lambda_s) \frac{\partial T}{\partial y} \right\} + \\ \frac{\partial}{\partial z} \left\{ (\varepsilon \cdot \lambda_f + (1-\varepsilon) \cdot \lambda_s) \frac{\partial T}{\partial z} \right\} \end{array} \right\} + (1-\varepsilon) S_s = 0 \quad (\text{II.20})$$

Pour une conductivité thermique effective donnée par l'équation suivante :

$$\lambda_{eff} = \varepsilon \cdot \lambda_f + (1-\varepsilon) \cdot \lambda_s \quad (\text{II.21})$$

L'équation gouvernante le transport et la production de la chaleur dans l'anode poreuse peut-être écrite en fonction de la conductivité thermique effective, comme suit :

$$\frac{\partial}{\partial x} \left\{ \lambda_{eff} \frac{\partial T}{\partial x} \right\} + \frac{\partial}{\partial y} \left\{ \lambda_{eff} \frac{\partial T}{\partial y} \right\} + \frac{\partial}{\partial z} \left\{ \lambda_{eff} \frac{\partial T}{\partial z} \right\} + S_s = 0 \quad (\text{II.22})$$

La source de chaleur due aux pertes de concentration présente dans l'anode est définie par le produit de la densité de courant et la perte de concentration. Eq (II.22).

$$S_{conc} = \eta_{conc} \cdot i \quad (II.23)$$

La perte de concentration est donnée par l'équation suivante :

$$\eta_{conc,an} = -\frac{RT}{n.F} \cdot \ln\left(1 - \frac{i}{i_{l,an}}\right) \quad (II.24)$$

Où $i_{l,an}$ est le courant limite de l'anode ($2,99 \times 10^4 \text{ A.m}^{-2}$). [35], [38], [39], [42], [75], [76] et [77].

La source de chaleur électrochimique due à la formation d'eau à l'anode qui est présente dans l'interface anode/électrolyte est donnée par l'Eq (II.25).

$$S_{elec} = \frac{Q_{elec} \cdot i}{2.F.\delta} \quad (II.25)$$

Où δ est l'épaisseur de la zone lieu de la réaction ($5 \mu\text{m}$) et Q_{elec} est la chaleur dégagée par la réaction électrochimique de formation de l'eau, elle est donnée par l'équation suivante [115] et [116] :

$$Q_{elec} = T.\Delta S \quad (II.26)$$

Où ΔS est la variation l'entropie qui est calculé par l'équation suivante :

$$\Delta S = S_{H_2O} - S_{H_2} - \frac{1}{2}S_{O_2} \quad (II.27)$$

Les S_i des trois espèces (hydrogène, oxygène et de la vapeur d'eau) sont calculés par l'Eq (II.28).

$$S_i = S_{i,298.15} + \int_{298.15}^T \frac{C_p}{T} dT \quad (II.28)$$

Les entropies de la vapeur d'eau, de l'hydrogène et de l'oxygène pour une température de référence de 298.15 K sont données par le **tableau.II.5**. Les chaleurs spécifiques de chaque espèce (H_2 , O_2 et H_2O) sont déterminées de l'équation (II.29).

$$C_p = a_1 T^{b_1} + a_2 T^{b_2} + a_3 T^{b_3} + a_4 T^{b_4} \quad (II.29)$$

Les constantes empiriques a_i et b_i présentés dans l'Eq (II.29) sont données pour chaque espèce (hydrogène, oxygène et de la vapeur d'eau) dans le **tableau.II.6**.

II.2.3.4.Cathode

L'énergie thermique est transférée par la conduction et la convection dans la cathode poreuse de la pile SOFC planaire. Les effets des pertes ohmiques et d'activation des réactions

chimiques dans la cathode sont prises en considération par un terme source additionnel dans l'équation du bilan énergétique. L'équation de conservation d'énergie tridimensionnelle est donnée pour la partie solide de la cathode par :

$$\frac{\partial}{\partial x} \left\{ \lambda_s \frac{\partial T}{\partial x} \right\} + \frac{\partial}{\partial y} \left\{ \lambda_s \frac{\partial T}{\partial y} \right\} + \frac{\partial}{\partial z} \left\{ \lambda_s \frac{\partial T}{\partial z} \right\} + S_s = 0 \quad (\text{II.30})$$

Tableau.II.5. Entropie et enthalpie de la vapeur d'eau, d'hydrogène et d'oxygène.

[21,42,117]		
Espèces	Enthalpie (J mol ⁻¹)	Entropie (J mol ⁻¹ K ⁻¹)
H ₂ O (vapeur)	-241,827	188,83
H ₂	0	130,59
O ₂	0	205,14

La source d'énergie existante dans la partie solide de la cathode poreuse est due uniquement aux pertes ohmiques ; elle est exprimée comme suit :

$$S_{Ohm,cat} = \frac{i^2}{\sigma_{cat}} \quad (\text{II.31})$$

Tableau.II.6. Constantes empirique a_i et b_i de chaque espèce (H₂, O₂ et H₂O). [21,42,117]

Espèces	a ₁	b ₁	a ₂	b ₂	a ₃	b ₃	a ₄	b ₄
vapeur	143,05	0	-58,040	0,25	8,2751	0,5	-0,036989	1
H ₂	56,505	0	-22222,6	-0,75	116500	-1	-560700	-1,5
O ₂	37,432	0	2,0102*10 ⁻⁵	1,5	-178570	-1,5	2368800	-2

Au niveau des pores de la cathode, l'énergie calorifique est transportée par conduction et convection. La vitesse d'écoulement dans les pores de la cathode est supposée très faible, ce qui conduit à un transport d'énergie calorifique conductif en négligeant tout transport convectif. Donc, l'équation de conservation de l'énergie dans les pores de la cathode est donnée pour environnement tridimensionnel par l'Eq (II.32).

$$\frac{\partial}{\partial x} \left\{ \lambda_f \frac{\partial T}{\partial x} \right\} + \frac{\partial}{\partial y} \left\{ \lambda_f \frac{\partial T}{\partial y} \right\} + \frac{\partial}{\partial z} \left\{ \lambda_f \frac{\partial T}{\partial z} \right\} = 0 \quad (\text{II.32})$$

Comme à l'anode, l'énergie thermique est produite uniquement par l'activation des réactions électrochimiques dans le fluide qui passe à travers les pores de l'anode. La source de chaleur due aux pertes d'activation est exprimée par le produit entre la perte d'activation

accomplie dans la cathode et de la densité de courant produite par la pile SOFC planaire, ce qui est interprété par la suivante équation :

$$S_{Act} = \eta_{Act} \cdot i \quad (\text{II.33})$$

La perte d'activation des réactions chimiques au niveau de la cathode poreuse est gouvernée par l'équation de Butler-Volmer. Equation (I.25). [7], [23], [24], [25], [36], [54], [55], [118] et [119].

$$i = i_{0,cat} \left[\exp\left(\frac{\alpha \cdot n \cdot F \cdot \eta_{Act,cat}}{R \cdot T}\right) - \exp\left(-\frac{(1-\alpha) \cdot n \cdot F \cdot \eta_{Act,cat}}{R \cdot T}\right) \right] \quad (\text{II.34})$$

Pour un nombre d'électrons de transfert ($n=2$) et un coefficient de transfert électronique de ($\alpha=0.5$) qui convient à la réaction de formation de l'eau, la perte d'activation est déterminée par l'équation non linéaire de Butler-Volmer simplifiée décrite par l'équation suivante :

$$\eta_{Act,cat} = \frac{R \cdot T}{\alpha \cdot n \cdot F} \cdot \sinh^{-1}\left(\frac{i}{2 \cdot i_{0,cat}}\right) \quad (\text{II.35})$$

De la même manière utilisée pour l'anode, quel que soit la porosité de l'anode, l'équation gouvernante le transfert et la production de chaleur dans la cathode poreuse de la SOFC planaire peut-être écrite par la formule suivante :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial}{\partial x} \left\{ (\varepsilon \cdot \lambda_f + (1-\varepsilon) \cdot \lambda_s) \frac{\partial T}{\partial x} \right\} + \\ \frac{\partial}{\partial y} \left\{ (\varepsilon \cdot \lambda_f + (1-\varepsilon) \cdot \lambda_s) \frac{\partial T}{\partial y} \right\} + \\ \frac{\partial}{\partial z} \left\{ (\varepsilon \cdot \lambda_f + (1-\varepsilon) \cdot \lambda_s) \frac{\partial T}{\partial z} \right\} \end{array} \right\} + (1-\varepsilon) S_s = 0 \quad (\text{II.36})$$

La conductivité thermique effective (λ_{eff}) de la cathode est définie par la somme de deux produits, le premier est le produit de porosité de la cathode et la conductivité thermique du gaz traversant la cathode, le deuxième est la résultante de la multiplication du rapport de volume de solide et le volume total de la cathode et la conductivité thermique de la matière utilisée pour la fabrication de la cathode. Eq (II.37).

$$\lambda_{eff} = \varepsilon \cdot \lambda_f + (1-\varepsilon) \cdot \lambda_s \quad (\text{II.37})$$

En utilisant la conductivité thermique effective, l'équation gouvernante le transport et la production de la chaleur dans la cathode poreuse peut-être exprimée par l'équation suivante :

$$\frac{\partial}{\partial x} \left\{ \lambda_{eff} \frac{\partial T}{\partial x} \right\} + \frac{\partial}{\partial y} \left\{ \lambda_{eff} \frac{\partial T}{\partial y} \right\} + \frac{\partial}{\partial z} \left\{ \lambda_{eff} \frac{\partial T}{\partial z} \right\} + S_s = 0 \quad (\text{II.38})$$

La source de chaleur due aux pertes de concentration présente dans la cathode est définie par le produit de la densité de courant et la perte de concentration cathodique. Eq (II.39).

$$S_{conc} = \eta_{conc} \cdot i \quad (\text{II.39})$$

La perte de concentration cathodique est donnée par l'équation suivante :

$$\eta_{conc,cat} = -\frac{RT}{n.F} \cdot \ln \left(1 - \frac{i}{i_{l,cat}} \right) \quad (\text{II.40})$$

Où $i_{l,an}$ est le courant limite de la cathode ($2,16 \times 10^4 \text{ A.m}^{-2}$). [35], [38], [39], [42], [75], [76], [77] et [114].

II.2.3.5. Canaux anodique et cathodique

L'énergie thermique se transporte par convection et conduction dans les canaux cathodique et anodique de la pile SOFC planeaire, les deux vitesses des gaz réactifs dans ces canaux sont supposées très faibles, de façon où le terme convectif est très petit comparativement au terme conductif, ce qui conduit à la négligence de terme convectif. On considère alors que la conduction des gaz dans les deux canaux anodique et cathodique de la pile à combustible SOFC planeaire, ce qui donne l'équation de conservation d'énergie thermique tridimensionnelle suivante :

$$\frac{\partial}{\partial x} \left\{ \lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right\} + \frac{\partial}{\partial y} \left\{ \lambda \frac{\partial T}{\partial y} \right\} + \frac{\partial}{\partial z} \left\{ \lambda \frac{\partial T}{\partial z} \right\} = 0 \quad (\text{II.41})$$

II.2.4. Conductivité électrique

La source de chaleur due aux pertes ohmiques présente dans toutes les parties solides et poreuses de la pile à combustible SOFC planeaire (électrolyte, interconnecteurs et électrodes) dépend du rapport de la densité de courant au carré divisé par la conductivité électrique de chaque point de domaine solide ou poreux. La conductivité électrique des éléments de cellule SOFC planeaire varie d'un matériau de conception à un autre, donc la conductivité électrique de chaque composant est différente de celle des autres composants, ainsi que les expressions de la conductivité électrique. Les expressions de la conductivité électrique de chaque composant de la pile SOFC planeaire sont données par le tableau suivant :

Tableau.II.7. Expressions de la conductivité électrique.

Components	σ [$\Omega^{-1} \text{ cm}^{-1}$]	Références
Electrolyte	$\sigma_{\text{ele}} = 3,34 \times 10^4 \exp(-10300/T)$	[13], [18], [43], [44], [45], [46], [47], [48], [49], [50], [51], [52], [53], [54].
Cathode	$\sigma_{\text{cat}} = \frac{4,2 \times 10^7}{T} \exp(-1200/T)$	[13], [18], [43], [44], [46], [47], [48], [50], [51], [52], [53].
Anode	$\sigma_{\text{an}} = \frac{9,5 \times 10^7}{T} \exp(-1150/T)$	[13], [18], [43], [44], [46], [47], [48], [49], [50], [51], [52], [53].
Interconnecteur	$\sigma_{\text{in}} = 9,3 \times 10^6 \exp(-1100/T)$	[13], [15], [44], [48], [50], [52].

II.3.5. Conditions aux limites

Les conditions aux limites du domaine d'étude qui est délimité par une seule cellule SOFC planaire sont du type de Neumann sur toutes les surfaces externes et dans toutes les directions extérieures qui contournent la cellule SOFC, sauf à l'entrée des deux canaux où on prend une valeur constante de la température dont les conditions sont devenues de type Dirichlet comme montre la **Figure.II.5. Tableau.II.8.**

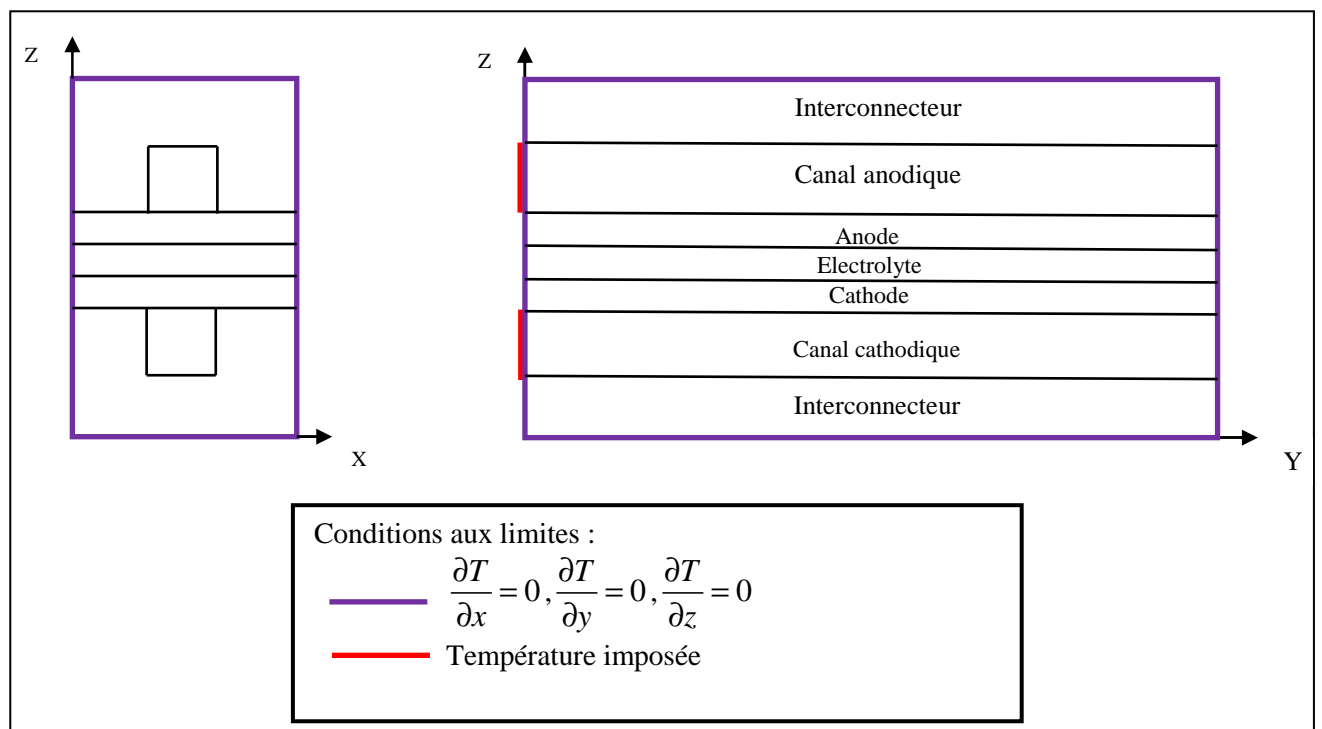
**Fig.II.5.** Conditions aux limites de la cellule élémentaire.

Tableau.II.8. Conditions aux limites.

Composant	Axe OX		Axe OY		Axe OZ	
	(0,y,z)	(Lx,y,z)	(x,0,z)	(x,Ly,z)	(x,y,0)	(x,y,Lz)
Electrolyte	$\frac{\partial T}{\partial x} = 0$	$\frac{\partial T}{\partial x} = 0$	$\frac{\partial T}{\partial y} = 0$	$\frac{\partial T}{\partial y} = 0$	$\frac{\partial T}{\partial z} = 0$	$\frac{\partial T}{\partial z} = 0$
Cathode	$\frac{\partial T}{\partial x} = 0$	$\frac{\partial T}{\partial x} = 0$	$\frac{\partial T}{\partial y} = 0$	$\frac{\partial T}{\partial y} = 0$	$\frac{\partial T}{\partial z} = 0$	$\frac{\partial T}{\partial z} = 0$
Anode	$\frac{\partial T}{\partial x} = 0$	$\frac{\partial T}{\partial x} = 0$	$\frac{\partial T}{\partial y} = 0$	$\frac{\partial T}{\partial y} = 0$	$\frac{\partial T}{\partial z} = 0$	$\frac{\partial T}{\partial z} = 0$
Interconnecteur	$\frac{\partial T}{\partial x} = 0$	$\frac{\partial T}{\partial x} = 0$	$\frac{\partial T}{\partial y} = 0$	$\frac{\partial T}{\partial y} = 0$	$\frac{\partial T}{\partial z} = 0$	$\frac{\partial T}{\partial z} = 0$
Canal anodique	$\frac{\partial T}{\partial x} = 0$	$\frac{\partial T}{\partial x} = 0$	$T = T_{H_2} = C^{ste}$	$\frac{\partial T}{\partial y} = 0$	$\frac{\partial T}{\partial z} = 0$	$\frac{\partial T}{\partial z} = 0$
Canal cathodique	$\frac{\partial T}{\partial x} = 0$	$\frac{\partial T}{\partial x} = 0$	$T = T_{air} = C^{ste}$	$\frac{\partial T}{\partial y} = 0$	$\frac{\partial T}{\partial z} = 0$	$\frac{\partial T}{\partial z} = 0$

II.2.6. Discrétisation des équations

La méthode des différences finies consiste à remplacer toutes les dérivées partielles par des différences divisées connues où la combinaison des valeurs ponctuelles des fonctions en un nombre fini de points discrets dans des nœuds de maillage du domaine d'étude. Les avantages de cette méthode sont : la grande simplicité d'écriture des équations gouvernantes les phénomènes étudiés et le faible coût de calcul. Les inconvénients de la méthode des différences finies sont : la limitation à des géométries simples et la difficulté de prise en compte des conditions aux limites de type Neumann.

II.2.6.1. Approche aux différences finies

Les équations gouvernantes les phénomènes physiques présentés dans le domaine de calcul sont des équations aux dérivées partielles paraboliques de second ordre et avec des coefficients constants, elles ont un terme source de chaleur non linéaire.

En raison de la complexité de ces résultantes équations ; elles ne peuvent être absolument résolues analytiquement, cependant, elles peuvent être résolues numériquement en utilisant des méthodes de résolutions numériques. La méthode numérique la plus utilisée pour la résolution de ces équations dans des problématiques similaires de notre étude est la méthode des différences finies.

La méthode des différences finies est une méthode qui utilise des approximations pour chaque terme de dérivée dans chacune des équations aux dérivées partielles ou aux différentielles de système d'équations gouvernant les phénomènes étudiés.

II.2.6.2. Approche numérique

La méthode de discrétisation utilisée dans notre travail est la méthode des différences finies. Elle est généralement utilisée pour la résolution des problématiques thermiques, elle présente aussi un efficace outil numérique de résolution qui se base sur la discrétisation et la méthodologie de résolution de près en près : les opérateurs différentiels sont exprimés pour un point du champ de température étudié en fonction des inconnues aux points voisins. Le maillage de la cellule élémentaire objet de notre étude est réalisé avec plusieurs points (nœuds) dans une géométrie tridimensionnelle (3D).

II.2.6.3. Procédure de numérisation

La résolution numérique de ces résultantes équations du phénomène de diffusion s'appuie principalement sur une discrétisation directionnelle des termes aux différences finies. Après avoir échantillonné le volume du domaine d'étude de notre travail (maillage $D(x,y,z) = D$), on rapproche toutes les dérivées directionnelles des différentes composantes par leur développement en série de Taylor avec un reste ou une erreur du deuxième ordre.

II.2.6.4. Discrétisation des équations gouvernantes

Pour réaliser la discrétisation des équations gouvernantes le transport et la génération d'énergie calorifique dans la cellule SOFC planaire, on procède directement au remplacement des équations aux dérivées partielles par un équivalent système algébrique à coefficients constants, de manière que le système obtenu doit être linéaire.

a) Eléments solides (l'électrolyte et les interconnecteurs)

A cet effet, dans tous les éléments solides de la cellule SOFC planaire, on utilise un schéma centré de second ordre pour l'approximation des termes de dérivées de second ordre, ce qui donnera les équations suivantes pour calculer les termes du premier et du deuxième ordre de dérivées, comme c'est expliqué ci-dessous :

Sur l'axe des X

$$\frac{\partial T}{\partial x} = \frac{T(i + \frac{1}{2}, j, k) - T(i - \frac{1}{2}, j, k)}{\Delta x} \quad (\text{II.42})$$

$$\frac{\partial T}{\partial x} \left(i + \frac{1}{2}, j, k \right) = \frac{T(i+1, j, k) - T(i, j, k)}{\Delta x} \quad (\text{II.43})$$

$$\frac{\partial T}{\partial x} \left(i - \frac{1}{2}, j, k \right) = \frac{T(i, j, k) - T(i-1, j, k)}{\Delta x} \quad (\text{II.44})$$

L'opérateur de diffusion de chaleur du second ordre sur la direction de l'axe OX s'écrit alors comme suit :

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = \frac{\frac{\partial T}{\partial x} \left(i + \frac{1}{2}, j, k \right) - \frac{\partial T}{\partial x} \left(i - \frac{1}{2}, j, k \right)}{\Delta x} = \frac{1}{\Delta x^2} \cdot \left\{ \begin{array}{l} T(i+1, j, k) + \\ T(i-1, j, k) - \\ 2T(i, j, k) \end{array} \right\} \quad (\text{II.45})$$

Sur l'axe des Y

$$\frac{\partial T}{\partial y} = \frac{T(i, j + \frac{1}{2}, k) - T(i, j - \frac{1}{2}, k)}{\Delta y} \quad (\text{II.46})$$

$$\frac{\partial T}{\partial y} \left(i, j + \frac{1}{2}, k \right) = \frac{T(i, j+1, k) - T(i, j, k)}{\Delta y} \quad (\text{II.47})$$

$$\frac{\partial T}{\partial y} \left(i, j - \frac{1}{2}, k \right) = \frac{T(i, j, k) - T(i, j-1, k)}{\Delta y} \quad (\text{II.48})$$

L'opérateur de diffusion de chaleur du second ordre sur la direction de l'axe OY s'écrit alors comme suit :

$$\frac{\partial^2 T}{\partial y^2} = \frac{\frac{\partial T}{\partial y} \left(i, j + \frac{1}{2}, k \right) - \frac{\partial T}{\partial y} \left(i, j - \frac{1}{2}, k \right)}{\Delta y} = \frac{1}{\Delta y^2} \cdot \left\{ \begin{array}{l} T(i, j+1, k) + \\ T(i, j-1, k) - \\ 2T(i, j, k) \end{array} \right\} \quad (\text{II.49})$$

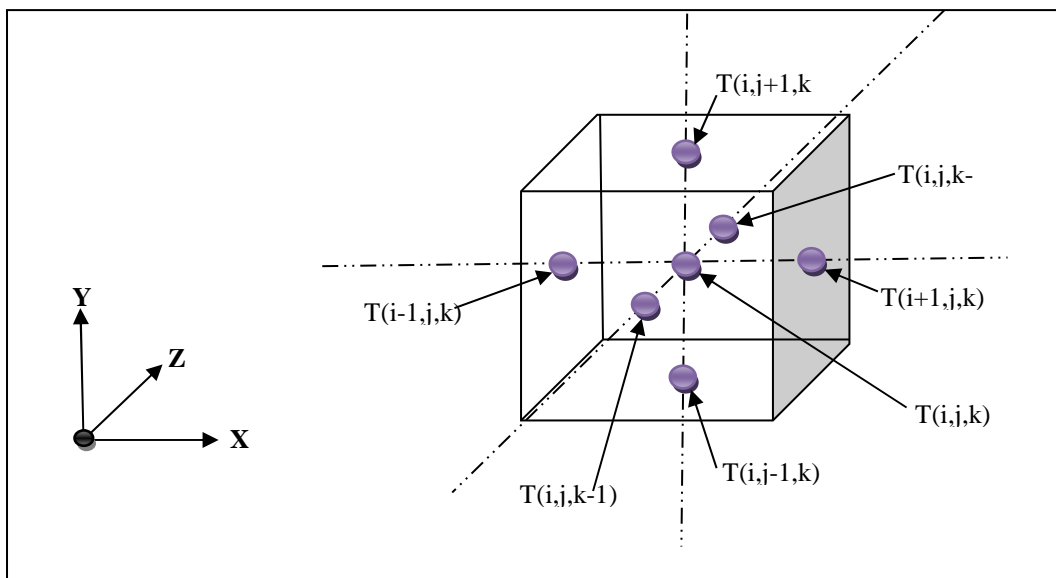


Fig.II.6. Volume de contrôle.

Sur l'axe des Z

$$\frac{\partial T}{\partial z} = \frac{T(i, j, k + \frac{1}{2}) - T(i, j, k - \frac{1}{2})}{\Delta z} \quad (\text{II.50})$$

$$\frac{\partial T}{\partial z} \left(i, j, k + \frac{1}{2} \right) = \frac{T(i, j, k + 1) - T(i, j, k)}{\Delta z} \quad (\text{II.51})$$

$$\frac{\partial T}{\partial z} \left(i, j, k - \frac{1}{2} \right) = \frac{T(i, j, k) - T(i, j, k - 1)}{\Delta z} \quad (\text{II.52})$$

La formulation discrétisée de l'opérateur de diffusion de chaleur du second ordre sur la direction de l'axe OZ s'écrit alors comme suit :

$$\frac{\partial^2 T}{\partial z^2} = \frac{\frac{\partial T}{\partial z} \left(i, j, k + \frac{1}{2} \right) - \frac{\partial T}{\partial z} \left(i, j, k - \frac{1}{2} \right)}{\Delta z} = \frac{1}{\Delta z^2} \cdot \left\{ \begin{array}{l} T(i, j, k + 1) + \\ T(i, j, k - 1) - \\ 2T(i, j, k) \end{array} \right\} \quad (\text{II.53})$$

L'erreur résultante de l'approximation des termes dans les équations gouvernantes les phénomènes étudiés est connue, car elle est totalement liée au développement de série de Taylor effectué (le reste de développement de Taylor est de deuxième ordre).

La source de chaleur s'écrit comme suit :

$$S = S(i, j, k) = \frac{i^2}{\sigma(i, j, k)} \quad (\text{II.54})$$

L'équation de conservation d'énergie dans le domaine tridimensionnel s'écrit comme l'indique l'équation suivante :

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} + \frac{S}{\lambda} = 0 \quad (\text{II.55})$$

En remplaçant toute approximation de terme dans l'équation d'énergie tridimensionnelle on obtient l'équation suivante :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{T(i+1, j, k) + T(i-1, j, k) - 2T(i, j, k)}{\Delta x^2} + \\ \frac{T(i, j+1, k) + T(i, j-1, k) - 2T(i, j, k)}{\Delta y^2} + \\ \frac{T(i, j, k+1) + T(i, j, k-1) - 2T(i, j, k)}{\Delta z^2} \end{array} \right\} + \frac{S(i, j, k)}{\lambda} = 0 \quad (\text{II.56})$$

En multipliant l'équation (II.56) par $(\Delta z^2 \cdot \Delta y^2 \cdot \Delta x^2)$, on obtient l'équation suivante :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{T(i+1, j, k) + T(i-1, j, k) - 2T(i, j, k)}{\Delta x^2} + \\ \frac{T(i, j+1, k) + T(i, j-1, k) - 2T(i, j, k)}{\Delta y^2} + \\ \frac{T(i, j, k+1) + T(i, j, k-1) - 2T(i, j, k)}{\Delta z^2} \end{array} \right\} (\Delta z^2 \cdot \Delta y^2 \cdot \Delta x^2) = -\frac{S(i, j, k)}{\lambda} (\Delta z^2 \cdot \Delta y^2 \cdot \Delta x^2) \quad (\text{II.57})$$

Par arrangement de l'équation (II.57), on trouve l'équation finale suivante :

$$T(i, j, k) = \frac{(\Delta z^2 \cdot \Delta y^2 \cdot \Delta x^2)}{2 \cdot ((\Delta y^2 \cdot \Delta z^2) + (\Delta x^2 \cdot \Delta z^2) + (\Delta x^2 \cdot \Delta y^2))} \left\{ \begin{array}{l} \frac{T(i+1, j, k) + T(i-1, j, k)}{\Delta x^2} + \\ \frac{T(i, j+1, k) + T(i, j-1, k)}{\Delta y^2} + \\ \frac{T(i, j, k+1) + T(i, j, k-1)}{\Delta z^2} + \\ \frac{S(i, j, k)}{\lambda} \end{array} \right\} \quad (\text{II.58})$$

b) Electrodes

De la même façon de traitement utilisée pour les éléments solides (électrolyte et interconnecteurs), l'équation gouvernante le transfert de chaleur dans les deux électrodes poreuses (anode et cathode) de la pile SOFC planaire est donnée par l'équation (II.59).

Où $S(i, j, k)$ représente la source de chaleur dans les deux électrodes, elle est définie par la somme de deux sources, la première source est due aux pertes de potentiel ohmique, équation (II.60), et la deuxième source est la résultante des pertes de potentiel dues à l'activation des réactions chimiques dans les deux électrodes, équation (II.61).

$$T(i, j, k) = \frac{(\Delta z^2 \cdot \Delta y^2 \cdot \Delta x^2)}{2 \cdot ((\Delta y^2 \cdot \Delta z^2) + (\Delta x^2 \cdot \Delta z^2) + (\Delta x^2 \cdot \Delta y^2))} \left\{ \begin{array}{l} \frac{T(i+1, j, k) + T(i-1, j, k)}{\Delta x^2} + \\ \frac{T(i, j+1, k) + T(i, j-1, k)}{\Delta y^2} + \\ \frac{T(i, j, k+1) + T(i, j, k-1)}{\Delta z^2} + \\ \frac{S(i, j, k)}{\lambda} \end{array} \right\} \quad (\text{II.59})$$

$$S = S(i, j, k) = \frac{i^2}{\sigma(i, j, k)} \quad (\text{II.60})$$

$$S_{Act} = \eta_{Act} \cdot i \quad (\text{II.61})$$

c) Les gaz dans les canaux

De la même manière utilisée pour le traitement de toutes les parties solides, l'équation gouvernante le transport de chaleur dans les deux canaux anodique et cathodique de la cellule

élémentaire SOFC s'écrit comme suit :

$$T(i, j, k) = \frac{(\Delta z^2 \cdot \Delta y^2 \cdot \Delta x^2)}{2 \cdot ((\Delta y^2 \cdot \Delta z^2) + (\Delta x^2 \cdot \Delta z^2) + (\Delta x^2 \cdot \Delta y^2))} \left\{ \begin{array}{l} \frac{T(i+1, j, k) + T(i-1, j, k)}{\Delta x^2} + \\ \frac{T(i, j+1, k) + T(i, j-1, k)}{\Delta y^2} + \\ \frac{T(i, j, k+1) + T(i, j, k-1)}{\Delta z^2} \end{array} \right\} \quad (\text{II.62})$$

d) Conductivité électrique

Pour la modélisation des thermes de la source de chaleur ohmique produite dans les différentes parties solides et poreuses de la pile SOFC planaire, on procède à remplacer les termes de température T dans toutes les expressions de conductivité électrique par leurs valeurs nœudales T(i,j,k). Les expressions de la conductivité électrique de chaque composant sont présentées dans le **Tableau.II.9**.

Tableau.II.9. Expressions des conductivités électriques modélisées.

Composant de SOFC	σ [$\Omega^{-1} \text{ cm}^{-1}$]
Electrolyte	$\sigma_{ele} = 3,34 \times 10^4 \exp(-10300/T(i, j, k))$
Cathode	$\sigma_{cat} = \frac{4,2 \times 10^7}{T(i, j, k)} \exp(-1200/T(i, j, k))$
Anode	$\sigma_{an} = \frac{9,5 \times 10^7}{T(i, j, k)} \exp(-1150/T(i, j, k))$
Interconnexions	$\sigma_{intc} = \frac{9,3 \times 10^5}{T(i, j, k)} \exp(-1100/T(i, j, k))$

e) Interfaces entre interconnecteur/électrode/électrolyte

Les échelles d'épaisseurs de différents composants de la pile SOFC planaire donnent un nombre très important de points, la simulation de modèle avec ce nombre de points prend un très grand temps de calcul, ce qui pose un problème de simulation et cela conduit à utiliser un pas variable selon l'axe OZ et un pas fixe sur les axes OX et OY, comme montrés dans le schéma de la **Figure.II.7**.

L'utilisation d'un pas variable n'impose aucune contrainte à un traitement spécifique à l'intérieur des composants de la cellule, contrairement aux interfaces entre tous les éléments (interconnecteur/anode, canal/anode, anode/électrolyte, électrolyte/cathode, cathode/canal et cathode/interconnecteur). Pour ce cas, l'équation gouvernante le transport de chaleur dans les points des interfaces est donnée par l'Eq (II.63).

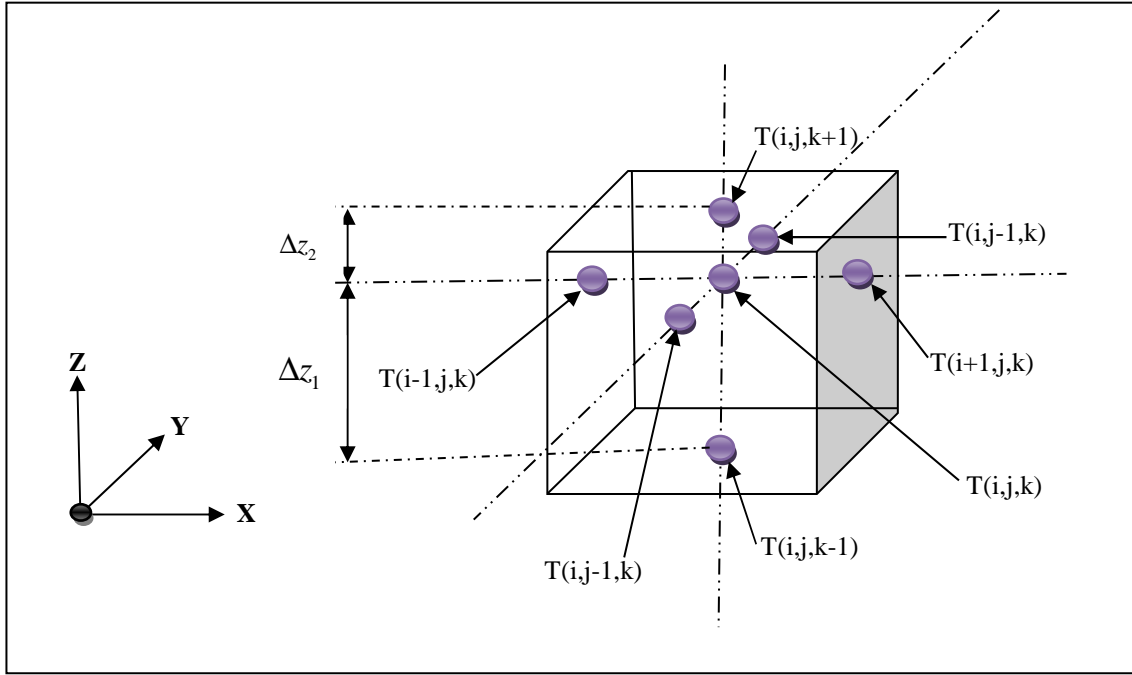


Fig.II.7. Volume de contrôle des interfaces interconnecteur/électrode/électrolyte.

$$T(i, j, k) = \frac{(\Delta y^2 \Delta z_1 \Delta z_2 \Delta x^2)}{2 \left((\Delta z_1 \Delta z_2 \Delta y^2) + (\Delta x^2 \Delta y^2) + (\Delta x^2 \Delta z_1 \Delta z_2) \right)} \left\{ \begin{array}{l} \frac{T(i+1, j, k) + T(i-1, j, k)}{\Delta x^2} + \\ \frac{T(i, j+1, k) + T(i, j-1, k)}{\Delta y^2} + \\ \frac{T(i, j, k+1) \Delta z_2 + T(i, j, k-1) \Delta z_1}{\frac{1}{2}(\Delta z_1 + \Delta z_2) \Delta z_1 \Delta z_2} + \\ \frac{S(i, j, k)}{\lambda} \end{array} \right\} \quad (II.63)$$

f) Conditions aux limites

Les conditions de Neumann des surfaces externes de la cellule SOFC plane dans toutes les directions conduit à une dérivée directionnelle de température égale à zéro, à cet effet, les équations aux dérivées partielles deviennent alors des équations différentielles.

Les conditions de Dirichlet qui imposent une température constante des gaz sur les surfaces d'entrées des deux canaux anodique et cathodique de la cellule élémentaire SOFC plane, ne posent aucun problème car elles sont définies par une simple valeur constante.

Pour le traitement des conditions de Neumann, on procède au remplacement de l'équation différentielle par un système algébrique simple à coefficients constants (linéaire) par des différences en arrière ou en avant, La **Figure.II.8** montre le volume de contrôle des conditions aux limites du type Neumann.

Les conditions aux limites type Neumann pour l'axe OX sont :

$$\frac{\partial T}{\partial x}(x=0) = 0 \Rightarrow \frac{T(2, j, k) - T(1, j, k)}{\Delta x} = 0 \Rightarrow T(1, j, k) = T(2, j, k) \quad (\text{II.64})$$

$$\frac{\partial T}{\partial x}(x=L_x) = 0 \Rightarrow \frac{T(n, j, k) - T(n-1, j, k)}{\Delta x} = 0 \Rightarrow T(n, j, k) = T(n-1, j, k) \quad (\text{II.65})$$

Où L_x représente la largeur de la cellule suivant l'axe OX.

Les conditions aux limites type Neumann pour l'axe OY sont :

$$\frac{\partial T}{\partial y}(y=0) = 0 \Rightarrow \frac{T(i, 2, k) - T(i, 1, k)}{\Delta y} = 0 \Rightarrow T(i, 1, k) = T(i, 2, k) \quad (\text{II.66})$$

$$\frac{\partial T}{\partial y}(y=L_y) = 0 \Rightarrow \frac{T(i, n, k) - T(i, n-1, k)}{\Delta y} = 0 \Rightarrow T(i, n, k) = T(i, n-1, k) \quad (\text{II.67})$$

Où L_y : représente la longueur de la cellule suivant l'axe OY

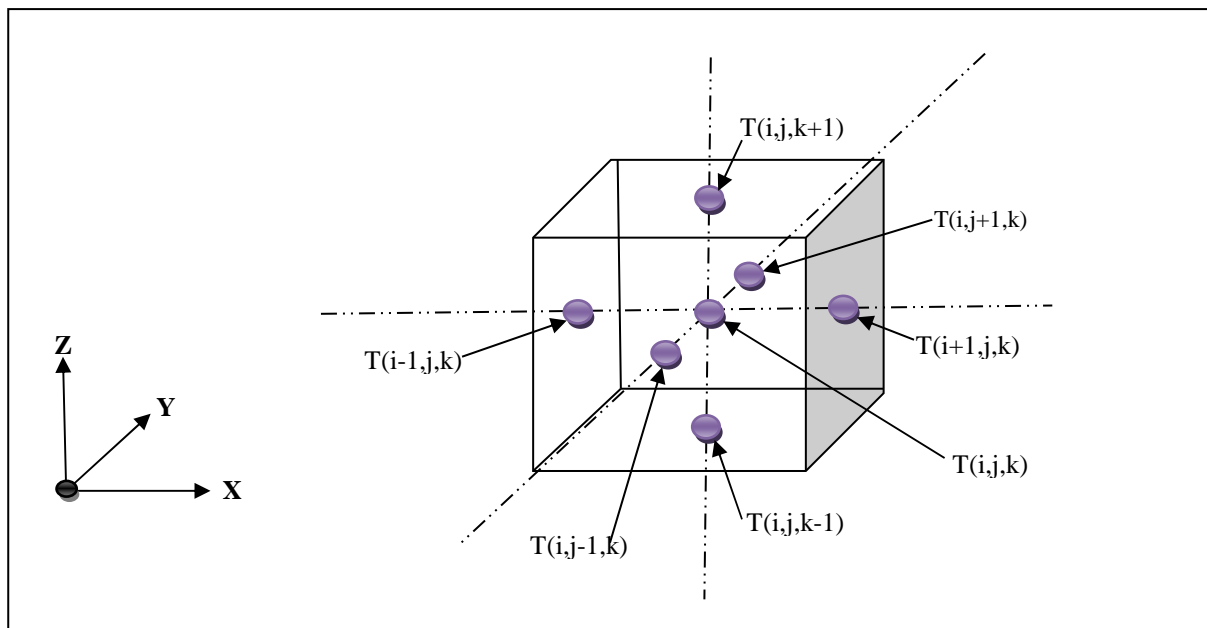


Fig.II.8. Volume de contrôle des conditions aux limites type Neumann.

Les conditions aux limites type Neumann pour l'axe OZ sont :

$$\frac{\partial T}{\partial z}(z=0) = 0 \Rightarrow \frac{T(i, j, 2) - T(i, j, 1)}{\Delta z} = 0 \Rightarrow T(i, j, 1) = T(i, j, 2) \quad (\text{II.68})$$

$$\frac{\partial T}{\partial z}(z=L_z) = 0 \Rightarrow \frac{T(i, j, n) - T(i, j, n-1)}{\Delta z} = 0 \Rightarrow T(i, j, n) = T(i, j, n-1) \quad (\text{II.69})$$

Où L_z représente la hauteur de la cellule suivant l'axe OZ et à l'entrée des canaux la température est indiquée par une constante ($T(i, j, k) = cst$).

II.2.7. Résolution du système d'équations

Après réalisation de la discrétisation d'équation d'énergie, on obtient alors un système d'équations algébriques linéaires et à coefficients constants.

L'unique complexité de résolution de ce système d'équations algébriques est la taille des résultats, qui dépend de la dimensionnalité du problème, c'est à dire du nombre de nœuds de maillage et de la façon de discrétisation.

Dans ce présent travail on se sert de la méthode la plus utilisée dans les problèmes numériques similaires qui est connue par la méthode de Gauss-Seidel pour la résolution de système d'équations résultant par la discrétisation de l'équation d'énergie dans chaque partie de la cellule SOFC planaire.

II.2.7.1.Méthode de Gauss Seidel

Il existe deux familles de méthode de résolution des systèmes d'équation linéaire, la première famille regroupe les méthodes directes de résolution qui procèdent généralement en deux étapes pour effectuer la résolution, d'abord la transformation du système original, ensuite la résolution du système obtenu par la transformation (ex : méthode de Gauss et les méthodes LU). La transformation utilisée par les méthodes directes consiste à factoriser les matrices obtenues par les systèmes d'équations linéaires, puis la résolution s'applique sur les systèmes triangulaires remontés par la transformation.

De ce fait, les méthodes directes conduites, abstraction faite des erreurs d'arrondi dans la solution exacte de système d'équation, après un nombre connu et fini d'opérations élémentaires.

La deuxième famille est la seule des méthodes itératives qui génèrent une séquence d'approximations de vecteur de solution et de ce fait fournissent des réponses approximatives en un nombre infini d'itérations. Néanmoins, dans la pratique de ces méthodes l'approximation de vecteur de solution est souvent satisfaisante dans un bout de nombre d'itérations relativement petit.

Les méthodes itératives procèdent simplement à des produits matrice-vecteur et il devient alors facile de programmer ce produit de sorte à éviter des opérations redondantes impliquant des éléments nuls de la matrice.

Les méthodes itératives peuvent dans certaines circonstances constituer une alternative aux méthodes directes creuses.

Les méthodes itératives nécessitent un nombre infini d'itérations pour converger vers la solution, ainsi, pour rendre ces méthodes opérationnelles, il convient d'introduire un critère d'arrêt pour le procédé itératif.

On fait arrêter les itérations lorsque les changements dans le vecteur de solution sont minimales, c'est-à-dire l'erreur devient suffisamment petite. La méthode de Gauss Seidel consiste donc à estimer une solution $T^l(i,j,k)$ dans l'itération l , pour calculer $T^{l+1}(i,j,k)$.

II.2.7.2. Condition de convergence

On peut envisager plusieurs manières de mesurer l'erreur entre une valeur approchée et une valeur exacte (Erreur absolue, Erreur relative...etc.).

$$\text{Erreur absolue : } \left| T_{(i,j,k)}^{l+1} - T_{(i,j,k)}^l \right| \quad (\text{II.70})$$

$$\text{Erreur relative : } \frac{\left| T_{(i,j,k)}^{l+1} - T_{(i,j,k)}^l \right|}{\left| T_{(i,j,k)}^l \right|} \quad (\text{II.71})$$

Dans notre cas, on choisit alors une combinaison entre ces deux types d'erreur (l'erreur absolue et l'erreur relative) ce qui conduira à stopper le calcul itératif lorsque la condition de convergence suivante est satisfaisante. [120], [121] et [122].

$$\frac{\left| T_{(i,j,k)}^{l+1} - T_{(i,j,k)}^l \right|}{\left| T_{(i,j,k)}^l \right| + 1} \leq \varepsilon \quad (\text{II.72})$$

Où ε une tolérance donnée dans le calcul.

Si la condition de convergence n'est pas satisfaite, on suppose que $(T^l(i,j,k) = T^{l+1}(i,j,k))$, et on procède au calcul par la même formule jusqu'à la vérification de cette condition de convergence. Pour que la condition de convergence dans un domaine de calcul connu doive être satisfaisante, il faut qu'elle doive être satisfaisante dans tous les points du domaine de calcul.

II.2.7.3. Temps de calcul

De toute évidence, les différents critères imposés sur les valeurs de la divergence relative et du maillage, tout comme les contraintes sur les critères de stationnarité, sont issus du meilleur compromis possible entre précision du résultat et temps nécessaire pour calculer celui-ci.

L'illustration du temps de calcul nécessaire dépend de la précision des résultats, qui seront par la suite présentés pour des maillages d'environ 160 000 nœuds. Pour cela, les moyens informatiques à disposition permettent de réaliser environ 80 000 itérations pour la convergence des résultats. Le temps de calcul est d'environ de 40 min pour un ε de 10^{-6} .

A titre indicatif, le temps de calcul principalement lié à la taille des matrices à manipuler, c'est-à-dire, il est lié aux nombres de nœuds représentés dans la discrétisation.

II.2.8. Données utilisées dans le calcul

Dans cette partie de ce chapitre, on mentionne les différentes données utilisées par le programme de calcul tridimensionnel réalisé pour obtenir les résultats montrés dans le chapitre qui suit.

La **Figure.II.9** présente les deux configurations répétition et symétrie des étages de cellules, le domaine d'étude et les dimensions de chaque composant de la SOFC (anode, cathode, cathode, électrolyte, interconnecteurs et les deux canaux anodique et cathodique).

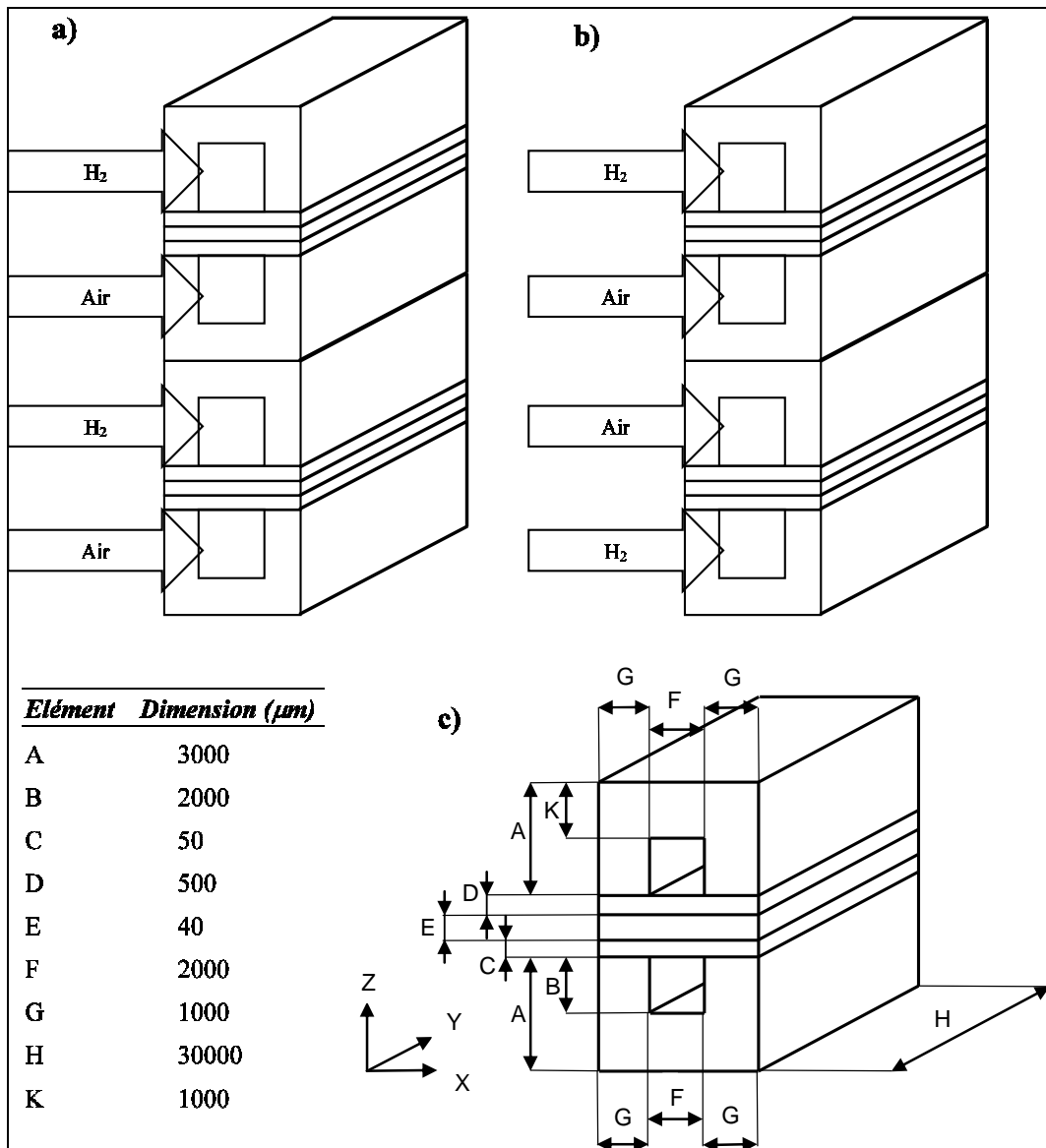


Fig.II.9. Configurations et dimensions du domaine de calcul. a) Répétitions des étages, b) symétrie des étage, c) Dimensions du domaine de calcul.

Les conductivités thermiques des éléments solides et poreuses de la cellule SOFC objet de notre étude sont données par le **Tableau.II.10**.

II.2.9. Structure de programme

Le comportement d'un système physique est généralement représenté par un système d'équations aux dérivées partielles, associé à des conditions aux limites sur le domaine considéré. Comme il n'est pas toujours possible de trouver les solutions analytiquement dans la plupart de ces problèmes physiques, à cet effet, le système d'équations aux dérivées partielles est remplacé par un système discret équivalent décrit par des équations algébriques qu'on peut résoudre par les méthodes numériques. Les étapes de résolution sont exposées par la **Figure.II.10**.

Tableau.II.10. Valeurs des conductivités thermiques.

Composant	Conductivité thermique λ (Wm ⁻¹ K ⁻¹)	Matériau	Références
anode	5,84	Ni-YSZ	[108], [113].
cathode	4	La _{1-x} Sr _x MnO ₃	[87], [113].
électrolyte	2,16	YSZ	[108], [113].
interconnecteur	6	LaCrO ₃	[32], [113].

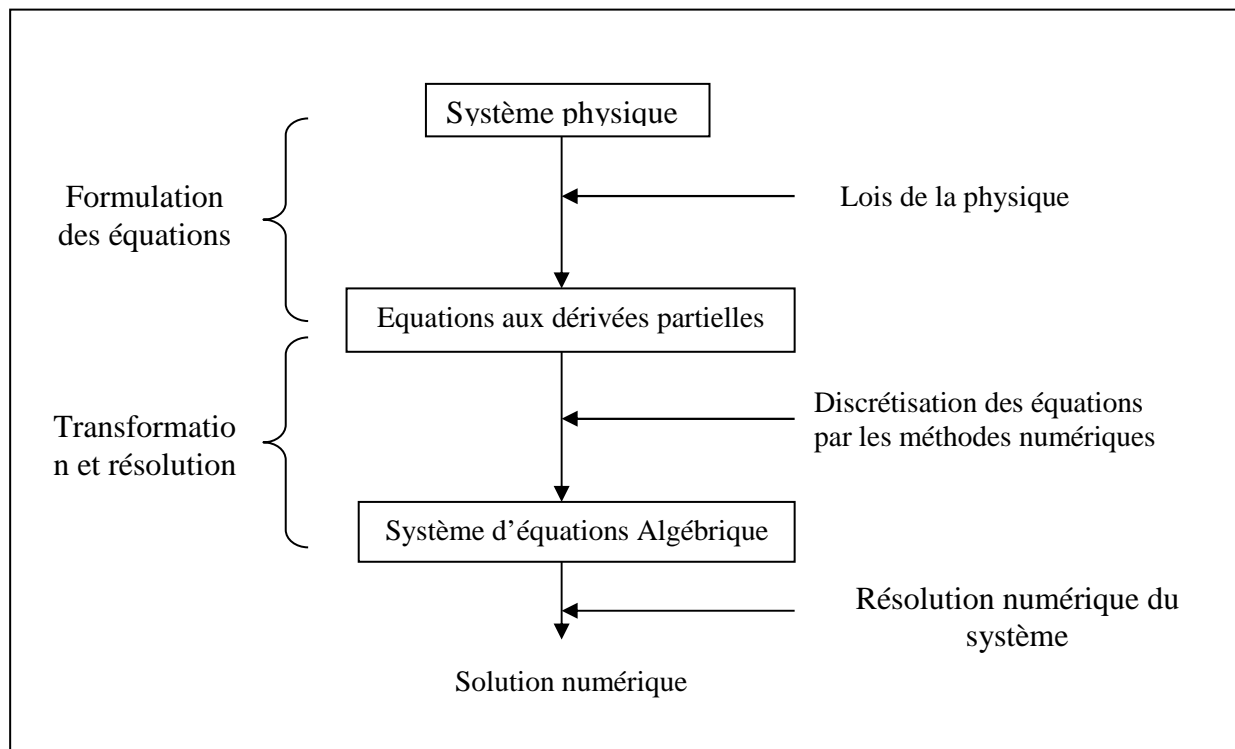


Fig.II.10. Schéma des démarches de résolution.

Le programme élaboré est écrit en langage de programmation FORTRAN. Les démarches décrites dans l'organigramme suivant l'algorithme de calcul à chaque étape, peuvent être résumées de la façon suivante : lire pour chaque partie de la pile toutes les données, estimer les champs de température, résoudre l'équation de l'énergie pour le calcul de température, retourner à l'étape 3 et répéter l'opération jusqu'à la convergence, l'affichage des résultats. L'organigramme du programme de calcul est donné par la **Figure. II.11**.

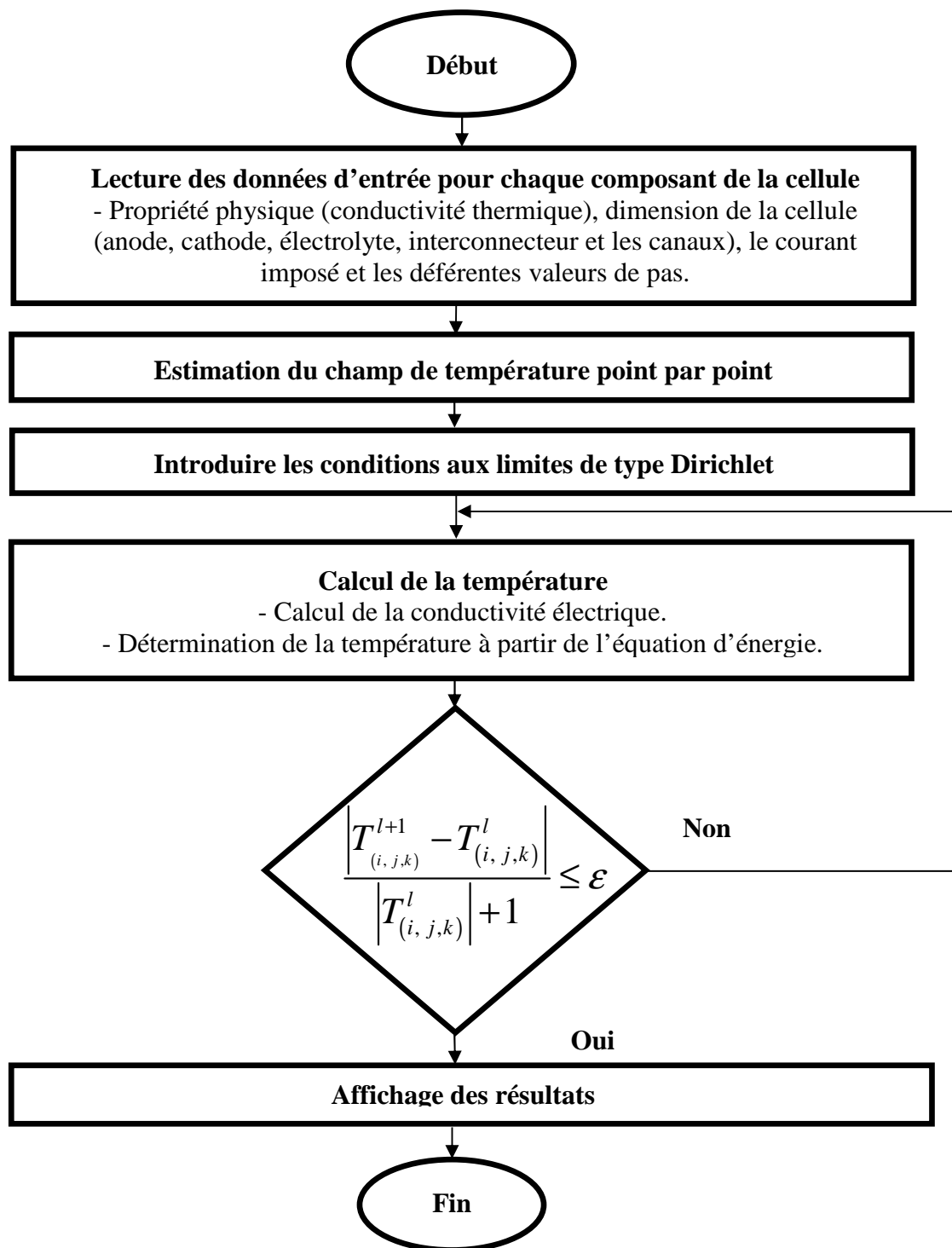


Fig.II.11. Organigramme de la méthode.

Chapitre III

Résultats et Interprétations

Introduction

Après avoir préparé les programmes de calcul en langage Fortran 6.6, qui se base sur les deux modèles entamés dans le précédent chapitre (0D et 3D), la totalité des courbes objets de notre étude ont été accomplies en utilisant le logiciel de type tableur OriginPro 8, quant aux ensembles des champs bidimensionnels et tridimensionnels, elles ont été effectuées en se servant du logiciel de visualisation Tecplot 9.2.

Dans ce chapitre, les résultats sont présentés en deux parties, la première partie expose les résultats obtenus par la résolution du modèle thermodynamique (0D) selon plusieurs paramètres, quant à la deuxième partie, elle concerne la présentation des résultats obtenus par simulation du modèle thermique de la pile SOFC plane dans un environnement tridimensionnel.

III.1. Thermodynamique des piles à combustibles SOFC

Dans cette partie les résultats sont présentés en sept classes, la première classe expose l'impact de chaque polarisation sur la polarisation totale. La deuxième classe, présente l'explication de l'influence de la température de fonctionnement sur le potentiel et la densité de puissance de la cellule SOFC. En troisième classe, l'effet de la pression d'alimentation de la pile sur le potentiel et la densité de puissance de la pile est exposé. La quatrième classe, illustre les participations des concentrations de la vapeur d'eau et d'oxygène dans le bouleversement du potentiel et de la densité de puissance de la SOFC. La cinquième classe, concerne l'analyse des résultats obtenus par les différentes dimensions de l'épaisseur de l'électrolyte. La sixième classe porte sur l'analyse des résultats obtenus par les différentes dimensions de l'épaisseur de l'anode. Enfin, la septième classe examine les résultats obtenus par les différentes dimensions d'épaisseur de la cathode.

III.1.1. Effet de différents types de polarisation sur la performance de la SOFC

La courbe de polarisation et la courbe de la densité de puissance présentées par la **Figure.III.1** sont parvenues par une pile à combustible à oxyde solide à électrodes supportées. Les électrodes et l'électrolyte sont fabriqués par les matériaux standards (NiYSZ) pour l'anode, (LSM) pour la cathode et (YSZ) pour l'électrolyte, les épaisseurs des éléments du cœur de la pile sont de 100 μm pour les électrodes et de 50 μm pour l'électrolyte. La SOFC est alimentée par l'hydrogène humidifié ($X_{\text{H}_2\text{O}}=0,05$) comme carburant et de l'air ($X_{\text{O}_2}=0,21$) comme comburant, la pression d'alimentation en fuel et en air est la même, elle est d' 1 bar. La

température de fonctionnement de la cellule est supposée identique à 1073 K. La figure fait apparaître trois types de pertes distinctes, la première perte est la plus grande, elle est générée par la polarisation ohmique qui est localisée essentiellement dans l'électrolyte. La deuxième chute de potentiel est due à la surtension d'activation qui est générée par la polarisation d'activation au niveau des deux électrodes anodique et cathodique. La troisième perte est la plus petite, elle fait apparaître les problèmes de diffusion des réactifs vers les sites catalytiques qui est localisée aux électrodes de la SOFC. La valeur maximale du potentiel de la pile atteint lors de cette étude est de 0.7731V, elle est celle de Nernst qui correspond à une densité de courant nul. La densité de courant maximale est d'environ 17000 A.m⁻², elle convient à des très faibles potentiels et un très important dégagement de chaleur. La densité de puissance maximale produite par la pile est supérieure à 3027 W.m⁻², elle est définie pour une densité de courant de 8390 A.m⁻². Pour des valeurs minimales de la densité de courant, la densité de puissance de la cellule est faible, elle augmente hyperboliquement par rapport à la densité de courant jusqu' à ses valeurs maximales à une densité de courant de 8390 A.m⁻², ensuite un effondrement hyperbolique de la densité de puissance qui est débitée par les différentes surtensions.

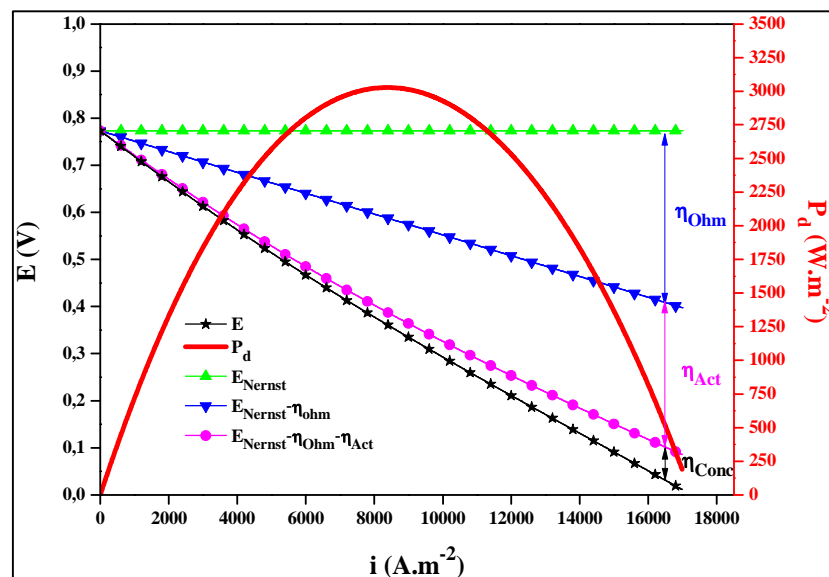


Fig.III.1. Courbe de polarisation, de potentiel et de la densité de puissance de la pile SOFC.

III.1.2.Effet de la température de fonctionnement sur la performance de la SOFC

Les résultats présentés, montre l'effet de la température de fonctionnement sur les courbes de polarisation et de la densité de puissance qui sont parvenues par une pile à combustible SOFC à électrodes supportées où les matériaux de construction sont (NiYSZ) pour l'anode, (LSM) pour la cathode et (YSZ) pour l'électrolyte, les épaisseurs des éléments du cœur de la pile sont 100 μm pour les électrodes et 50 μm pour l'électrolyte.

Le carburant est l'hydrogène humidifié ($X_{H_2O}=0,05$), et l'air ($X_{O_2}=0,21$) est le comburant, la pression d'alimentation est commune pour le fuel et l'air, elle est de 1 bar. Les températures de fonctionnement de la cellule sont supposées semblables aux (973, 1073 et 1173 K). Le plus important potentiel de Nernst remarqué parmi les trois tests effectués est celui qui convient à une température de fonctionnement égale à 973 K. La valeur plus mineure du potentiel de Nernst enregistrée est celle de la pile fonctionnant à une température identique à 1173 K. Raisonnablement, le potentiel de Nernst qui correspond à une température d'exploitation semblable à 1073 K est compris entre les deux potentiels de Nernst exposés antérieurement. Les valeurs maximales de la densité de puissance et du potentiel réel sont appartenues à la SOFC fonctionnant à une température pareille à 1173 K. Les faibles valeurs de la densité de puissance et du potentiel réel sont obtenues par la pile fonctionnant à une température équivalente de 973 K, cependant, une température de fonctionnement de 1073 K conduit à des valeurs moyennes de densité de puissance et de potentiel réel de la cellule, ce qui démontre que le potentiel de Nernst est inversement proportionnel à la température de fonctionnement de la pile. Le potentiel réel de la cellule est proportionnel à la température de fonctionnement de la pile, autrement dit, la totalité des pertes sont inversement proportionnelles à la température de fonctionnement de la pile, ce qui conduit directement à un potentiel et une densité de puissance proportionnels à la température de fonctionnement. **Figure.III.2.**

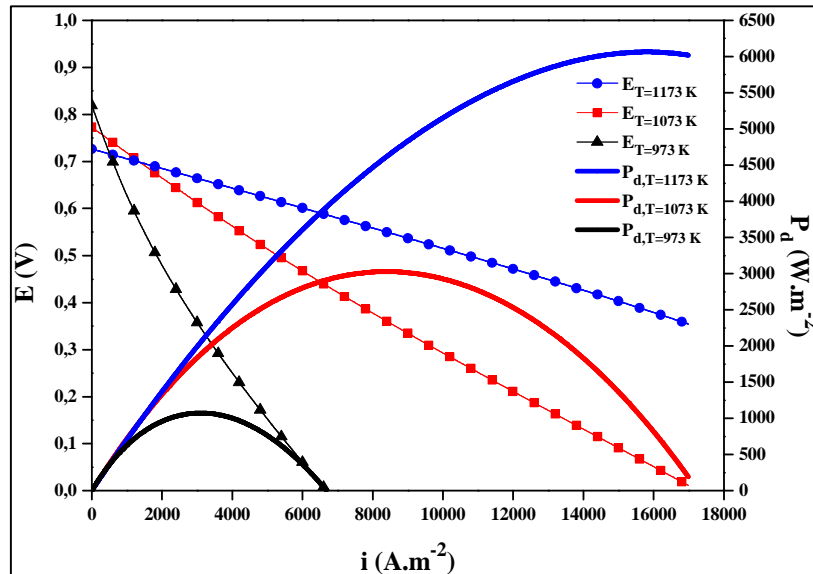


Fig.III.2. Evolution de potentiel et de la densité de puissance selon la température de fonctionnement.

III.1.3. Effet de la pression de fonctionnement sur la performance de la SOFC

L'effet de la pression de fonctionnement sur les courbes de polarisation et de la densité de puissance est présenté dans **Figure.III.3**, les résultats sont parvenues par une pile à combustible SOFC à électrodes supportées où les matériaux de construction sont (NiYSZ) pour l'anode, (LSM) pour la cathode et (YSZ) pour l'électrolyte, les épaisseurs des éléments du cœur de la pile sont 100 μm pour les deux électrodes et 50 μm pour l'électrolyte. Le carburant est l'hydrogène humidifié ($X_{\text{H}_2\text{O}}=0,05$), et l'air ($X_{\text{O}_2}=0,21$) est le comburant, la température de fonctionnement de la cellule est identique à 1073 K. Les pressions d'alimentation sont communes pour les deux gaz, elles sont comptabilisées par (1, 2 et 4 bars).

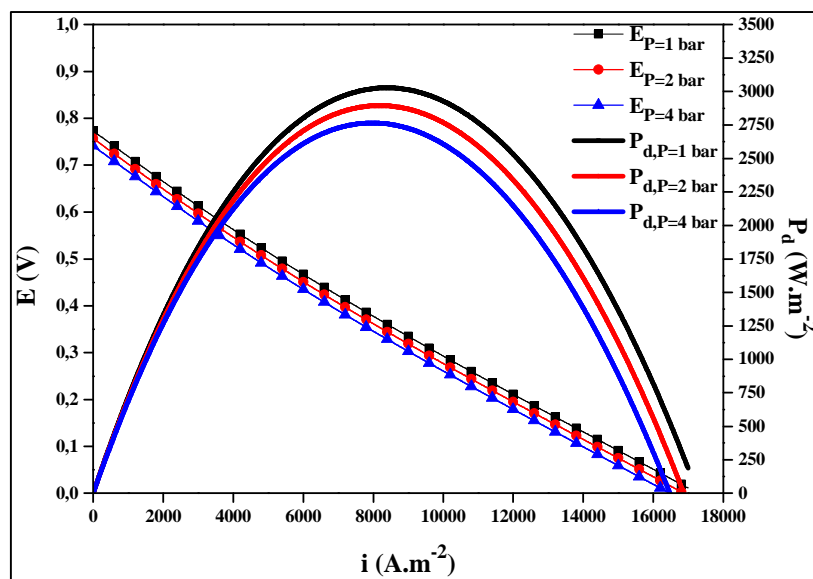


Fig.III.3. Evolution de potentiel et de la densité de puissance selon la pression de fonctionnement.

Les valeurs les plus élevées de potentiel de Nernst, potentiel réel et la densité de puissance remarquées dans les trois tests effectués appartiennent à la cellule qui fonctionne à une pression identique à 1 bar. Les plus basses valeurs du potentiel de Nernst, potentiel réel et la densité de puissance enregistrées appartiennent à la pile approvisionnée par une pression d'alimentation de 4 bars. Logiquement, le potentiel de Nernst, le potentiel réel et la densité de puissance qui correspondent à une pression d'alimentation intermédiaire de carburant et d'air sont entre les deux potentiels de Nernst, les deux potentiels réels et les deux densités de puissance présentées auparavant. Donc, le potentiel de Nernst et le potentiel réel sont inversement proportionnels à la pression de fonctionnement de la pile. Ainsi, la densité de puissance de la pile est inversement proportionnelle à la pression de fonctionnement, car les

changements de la pression de fonctionnement de la pile n'ont aucune influence sur les trois surtensions. **Figure.III.3.**

III.1.4.Effet des concentrations d'eau et d'oxygène sur la performance de la SOFC

L'effet de la teneur en eau du carburant et la concentration d'oxygène dans le comburant sur le potentiel et de la densité de puissance de pile à combustible SOFC à électrodes supportées est présenté dans la **Figure.III.4.** Les matériaux de construction sont (NiYSZ) pour l'anode, (LSM) pour la cathode et (YSZ) pour l'électrolyte, les épaisseurs des éléments du cœur de la pile sont de 100 μm pour les électrodes et 50 μm pour l'électrolyte. La température de fonctionnement de la cellule est identique à 1073 K. La pression de fonctionnement est commune pour le carburant et le comburant, elle est d' 1 bar. L'hydrogène est humidifié ($X_{\text{H}_2\text{O}}=0,03, 0,06$ et $0,09$) pour le premier test **Figure.III.4.a** et ($X_{\text{H}_2\text{O}}=0,05$) pour le deuxième test **Figure.III.4.b.** La concentration de l'air dans le comburant est ($X_{\text{O}_2}=0,21$) pour le premier test **Figure.III.4.a** et de ($X_{\text{O}_2}=0,21, 0,50$ et $1,00$) pour le deuxième test. **Figure.III.4.b.**

Les plus grandes valeurs de potentiel de Nernst, potentiel réel et la densité de puissance remarquées dans les tests effectués sont celles qui conviennent à un taux d'humidification du carburant identique à 0,03. Les plus faibles valeurs de potentiel de Nernst, potentiel réel et la densité de puissance enregistrées sont celles qui superposent un taux d'humidification du fuel de 0,09. Logiquement, le potentiel de Nernst, le potentiel réel et la densité de puissance qui correspondent à un taux moyen d'humidification du carburant sont compris entre les deux potentiels de Nernst, les deux potentiels réels et les deux densités de puissance présentées auparavant. Donc, le potentiel de Nernst, le potentiel réel et la densité de puissance sont inversement proportionnels au taux d'humidification du carburant. **Figure.III.4.a.**

Les valeurs maximales de potentiel de Nernst, potentiel réel et la densité de puissance sont remportées par un comburant d'oxygène pur. Le potentiel de Nernst, potentiel réel et la densité de puissance prennent des faibles valeurs à un taux d'oxygène du comburant identique à 0,21. Logiquement, le potentiel de Nernst, le potentiel réel et la densité de puissance qui correspondent à un taux d'oxygène dans le comburant de 0,50 sont compris entre les deux potentiels de Nernst, les deux potentiels réels et les deux densités de puissance discutés auparavant. Ce qui démontre que le potentiel de Nernst, le potentiel réel et la densité de puissance sont proportionnels au taux de concentration de l'oxygène dans le comburant. **Figure.III.4.b.**

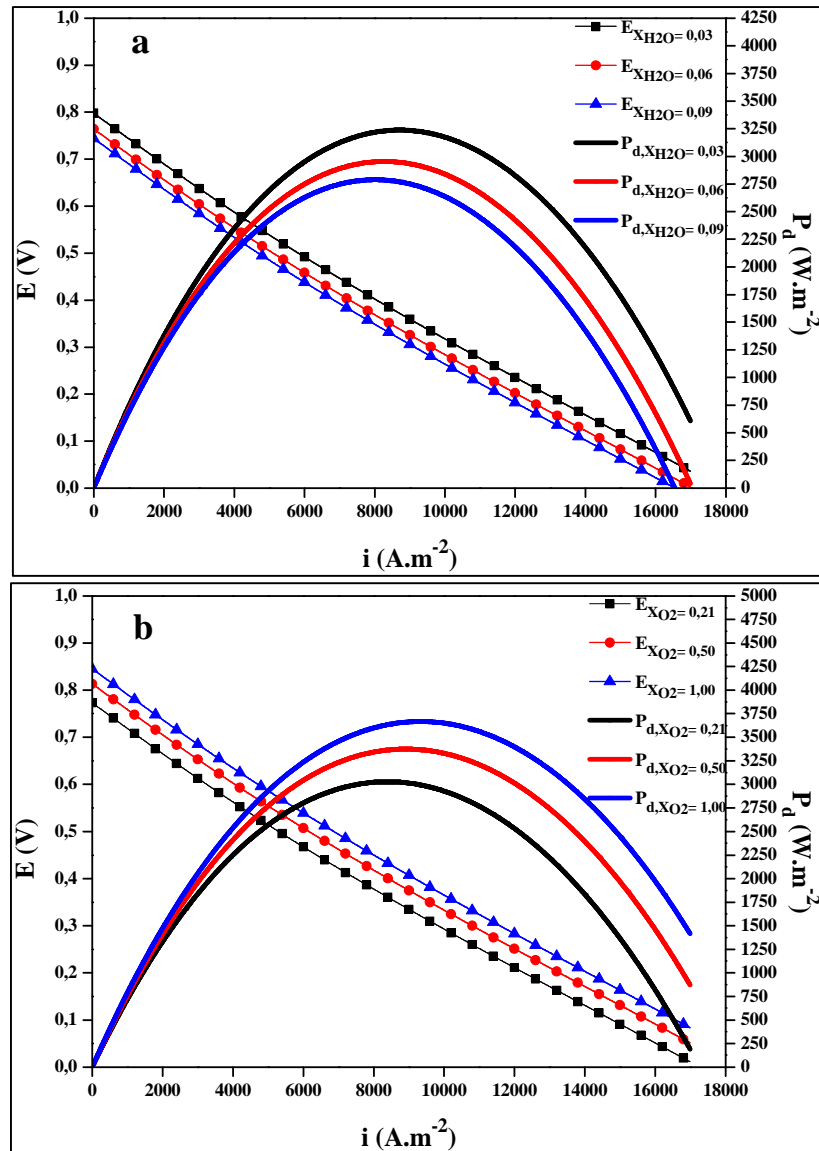


Fig.III.4. Evolution de potentiel et de la densité de puissance selon la concentration de l'eau et de l'oxygène. a) concentration de la vapeur d'eau dans le carburant, b) taux d'oxygène dans le carburant.

III.1.5.Effet de l'épaisseur de l'électrolyte sur la performance de la SOFC

L'effet de l'épaisseur de l'électrolyte sur les courbes de polarisation et de la densité de puissance parvenues par une pile à combustible SOFC à électrodes supportées est présenté par la **Figure.III.5**. Les matériaux de construction sont (NiYSZ) pour l'anode, (LSM) pour la cathode et (YSZ) pour l'électrolyte. L'épaisseur des deux électrodes est identique à 100 μm . Le carburant est l'hydrogène humidifié ($X_{H_2O}=0,05$), et l'air ($X_{O_2}=0,21$) est le comburant. La pression d'alimentation est commune pour le fuel et l'aire, elle est d' 1 bar. La température de fonctionnement de la cellule est identique à 1073 K. Les épaisseurs de l'électrolyte sont présent égales à (5, 50 et 500 μm).

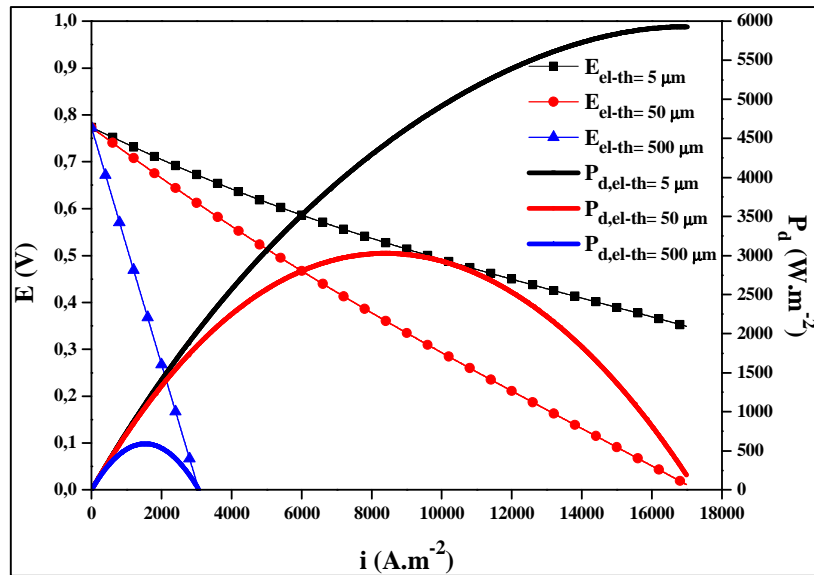


Fig.III.5. Evolution de potentiel et de la densité de puissance selon l'épaisseur de l'électrolyte.

Les plus élevées potentiel réel et densité de puissance remarquées dans les trois tests effectués suivant plusieurs dimensionnements de l'électrolyte sont convenables à la SOFC d'une très mince épaisseur de l'électrolyte. Les faibles valeurs de potentiel réel et de densité de puissance enregistrées sont-celles produites par la cellule de grande épaisseur d'électrolyte. Logiquement, le potentiel réel et la densité de puissance correspondants à une épaisseur d'électrolyte moyenne sont compris entre les deux potentiels réels et les deux densités de puissance présentées par les deux dimensions d'électrolyte citées en dessous. Ce qui confirme que le potentiel réel et la densité de puissance sont inversement proportionnels à l'épaisseur de l'électrolyte. **Figure.III.5.**

III.1.6.Effet de l'épaisseur de l'anode sur la performance de la SOFC

L'effet de l'épaisseur de l'anode sur les courbes de polarisation et de la densité de puissance parvenues par une pile à combustible SOFC à électrodes supportées est présenté par la **Figure.III.6**. Les matériaux de construction de la cellule sont (NiYSZ) pour l'anode, (LSM) pour la cathode et (YSZ) pour l'électrolyte. L'épaisseur de la cathode est de 100 μm et l'épaisseur de l'électrolyte est identique à 50 μm . Le carburant est l'hydrogène humidifié ($X_{H_2O}=0,05$), et l'air ($X_{O_2}=0,21$) est le comburant. La pression d'alimentation est commune pour le fuel et l'air, elle est d' 1 bar. La température de fonctionnement de la cellule est identique à 1073 K. Les épaisseurs de l'anode sont pris égales à (50, 500 et 5000 μm).

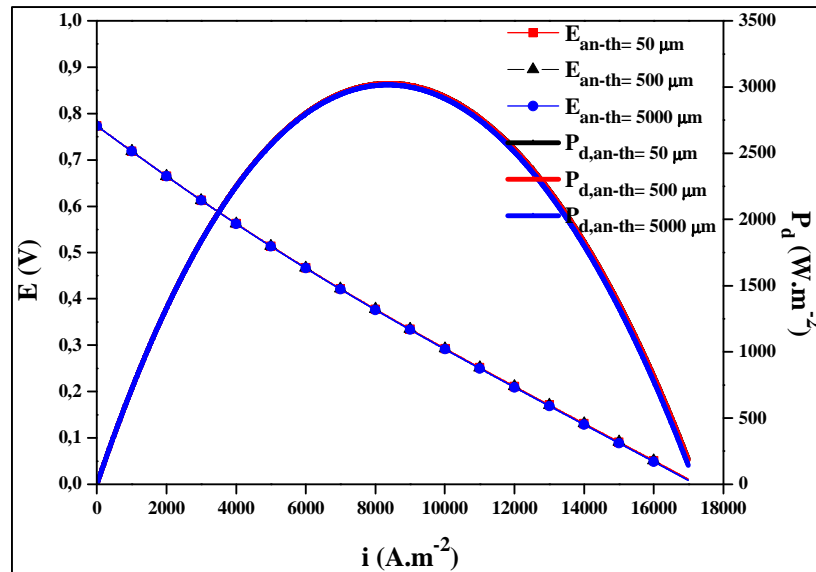


Fig.III.6. Evolution de potentiel et de la densité de puissance selon l'épaisseur de l'anode.

Les valeurs les plus élevées de potentiel réel et de la densité de puissance remarquées dans les trois tests effectués suivant plusieurs dimensionnements de l'anode sont convenables à la SOFC d'une très mince épaisseur de l'anode. Les faibles valeurs de potentiel réel et de densité de puissance enregistrées sont celles produites par la cellule de grande épaisseur d'anode. Logiquement, le potentiel réel et la densité de puissance correspondants à une épaisseur d'anode moyenne sont compris entre les deux potentiels réels et les deux densités de puissance présentées par les deux dimensions d'anode citées en dessous. Ce qui confirme que le potentiel réel et la densité de puissance sont inversement proportionnels à l'épaisseur de l'anode. Logiquement, l'épaisseur de l'anode influence uniquement sur la polarisation ohmique, donc, le potentiel réel et la densité de puissance de la SOFC. La densité de puissance est influencée par la dimension d'épaisseur de l'anode aux grandes densités de courant. **Figure.III.6.**

III.1.7.Effet de l'épaisseur de la cathode sur la performance de la SOFC

L'effet de l'épaisseur de la cathode sur les courbes de polarisation et de la densité de puissance parvenues par une pile à combustible SOFC à électrodes supportées est présenté par la **Figure.III.7**. Les matériaux de construction de la cellule sont (NiYSZ) pour l'anode, (LSM) pour la cathode et (YSZ) pour l'électrolyte. L'épaisseur de l'anode est de cent micromètres et l'épaisseur de l'électrolyte est identique à cinquante-micromètres. Le carburant est l'hydrogène humidifié ($X_{H_2O}=0,05$), et l'air ($X_{O_2}=0,21$) est le comburant. La pression d'alimentation est commune pour le fuel et l'air, elle est de 1 bar. La température de fonctionnement de la cellule est identique à 1073 K. Les épaisseurs de la cathode sont égales à (50, 500 et 5000 μm).

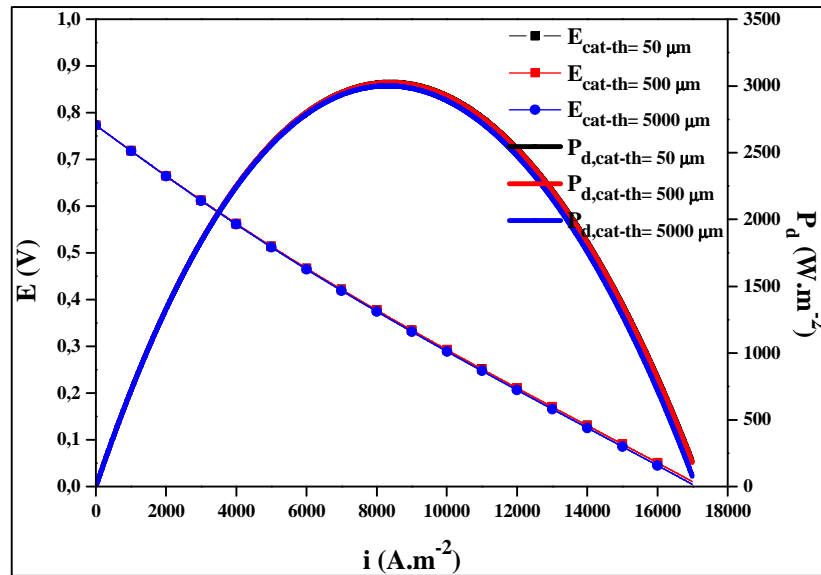


Fig.III.7. Evolution de potentiel et de la densité de puissance selon l'épaisseur de la cathode.

Les valeurs les plus élevées de potentiel réel et de la densité de puissance remarquées dans les trois tests effectués suivant plusieurs dimensionnements de la cathode sont convenables à la SOFC d'une très mince épaisseur de la cathode. Les faibles valeurs de potentiel réel et de densité de puissance enregistrées sont celles produites par la cellule de grande épaisseur de la cathode. Logiquement, le potentiel réel et la densité de puissance correspondants à une épaisseur de la cathode moyenne sont compris entre les deux potentiels réels et les deux densités de puissance présentées par les deux dimensions de la cathode citées en dessous. Ce qui confirme que le potentiel réel et la densité de puissance sont inversement proportionnels à l'épaisseur de la cathode. Logiquement, l'épaisseur de la cathode affecte uniquement la polarisation ohmique qui est traduite directement par la variation du potentiel réel et la densité de puissance de la SOFC. La densité de puissance est influencée par la dimension d'épaisseur de la cathode aux grandes densités de courant. **Figure.III.7.**

III.2.Champs thermique 3D de la SOFC pour les configurations symétrique et répétition des étages de cellules

Dans la présente partie les résultats sont exposés en quatre classes, dans la première classe, l'impact de la température d'entrée des gaz, la densité de courant et l'épaisseur de l'électrolyte sur la distribution et les valeurs extrêmes de température (minimale et maximale) selon une symétrie des étages de cellules sont présentés. En deuxième classe, la présentation de l'influence de la température d'entrée des gaz, la densité de courant et l'épaisseur de l'électrolyte sur les champs et les valeurs extrêmes de température selon une configuration basé sur la répétition des étages de cellules a été présenté. Quant à la troisième, une comparaison

entre ces deux types de configuration géométriques est présentée selon la température d'entrée des gaz, la densité de courant et l'épaisseur de l'électrolyte. Enfin une démonstration de l'impact de chaque type de source de chaleur (sans source, ohmique, activation, concentration et électrochimique) sur la distribution et les valeurs extrêmes de température est effectuée.

III.2.1.Champs de température pour une symétrie des étages de cellules

Dans cette partie du présent chapitre l'étude de l'influence de la température d'entrée des deux gaz, la densité de courant et l'épaisseur de l'électrolyte sur les valeurs maximales de la température et leurs champs selon une symétrie des étages de cellules est présentée.

III.2.1.1.Effet de la température d'entrée des gaz

L'effet de la température d'entrée des gaz dans les canaux sur les champs et les valeurs de température est présenté selon deux cas. Dans le premier cas, la valeur de la température des gaz est la même à l'entrée des deux canaux anodique et cathodique de la cellule, pour le second cas, deux différentes valeurs de température sont utilisées, c'est-à-dire que la température de fuel à l'entrée de canal anodique est différente de celle de l'air à l'entrée de canal cathodique.

Les dimensionnements des éléments du cœur de la pile sont données par 500 μm pour l'anode [45], [79], [86], [108] et [109], 40 μm pour l'électrolyte [45], [50], [110], [111] et [112] et 50 μm pour la cathode [44], [45], [48], [85] et [93]. Les conductivités thermiques et électriques de l'anode, l'électrolyte et la cathode sont identiques à celles des matériaux standards (NiYSZ), (YSZ), (LSM) respectivement, aussi une densité de courant imposée de vingt mille unités [15], [45] et [80] a été utiliser.

III.2.1.1.1.Température d'entrée des gaz identique dans les deux canaux

Selon plusieurs références consultées qui se servent de la même température d'entrée des gaz aux canaux de la pile SOFC, et ce, pour le carburant ainsi que le comburant, un grand intervalle est obtenu, a cette effet trois valeurs de température d'entrée des gaz se sont choisi pour la simulation (673, 873 et 923 K).

Les champs de température pour une pile à combustible SOFC planaire selon une symétrie de cellules pour les températures d'entrée des gaz de (673, 873 et 923 K) sont présentés par la **Figure.III.8**.

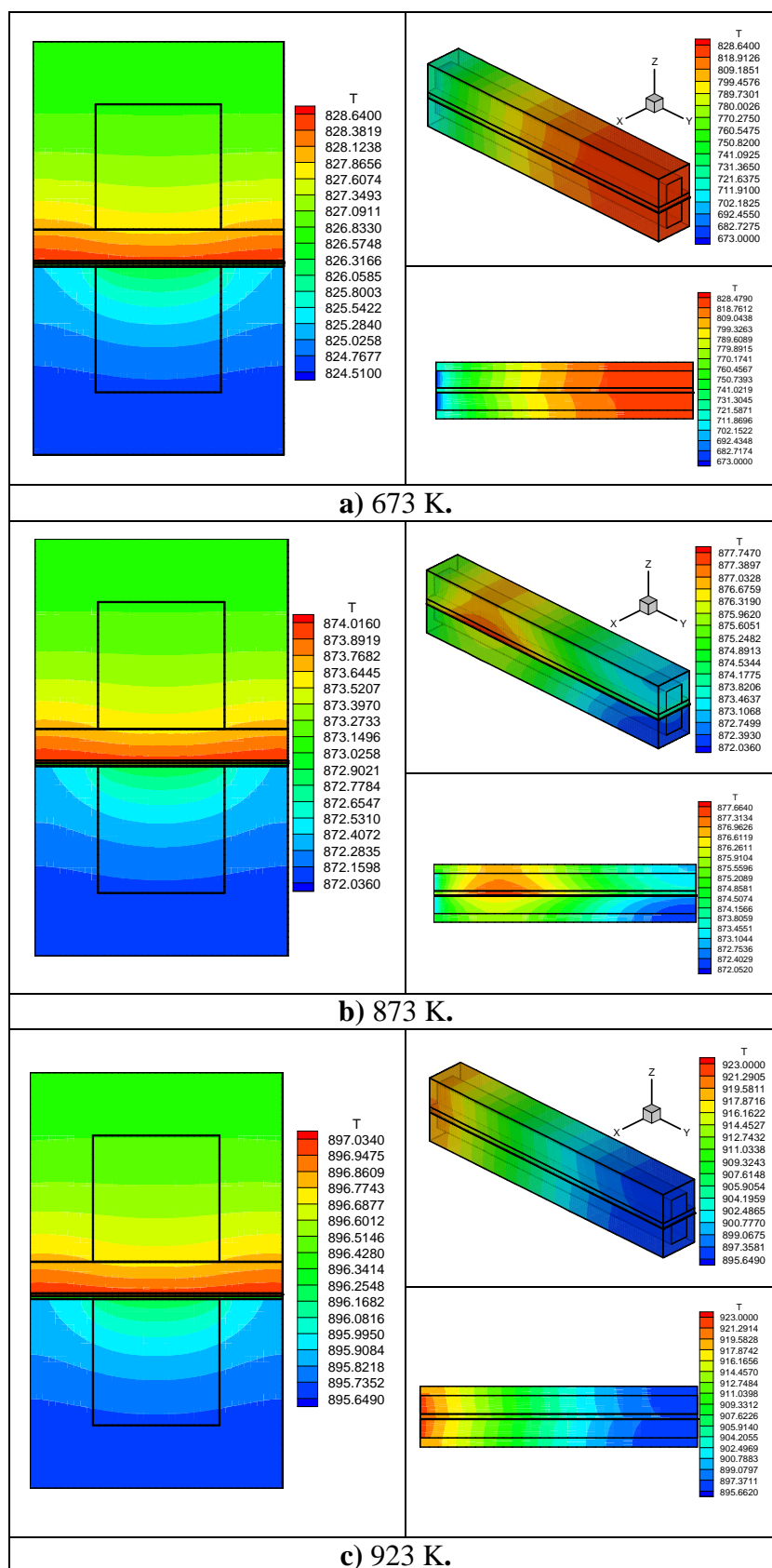


Fig.III.8. Champs de température de la cellule pour la même température d'entrée des gaz selon une configuration symétrique : a) 673 K, b) 873 K et c) 923 K.

La température maximale se localise dans la partie supérieure de l'électrolyte à la sortie de la cellule dans les deux extrémités gauche et droite de la cellule, elle est de l'ordre de 828,64 K. La plus basse température obtenue est celle des gaz à l'entrée de la cellule (673 K). Une augmentation des valeurs de température est clairement remarquable de l'entrée vers la sortie de la cellule, cette 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. **Figure.III.8.a.**

Les plus basses températures sont localisées à la sortie de pile, plus exactement à l'extrémité de l'interconnecteur de la partie cathodique aux endroits les plus éloignés du canal cathodique. La température maximale est localisée dans la partie supérieure de l'électrolyte dans les deux extrémités gauche et droite à une distance presque d'un centimètre de l'entrée des gaz de la cellule, elle est de l'ordre de 877,747 K. Une augmentation des valeurs de température est remarquée 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. L'augmentation des valeurs de température est d'environ de 4,747 K, ce qui représente un cas de légère production de chaleur. Aussi, il y a lieu de remarquer que les valeurs de température dans la partie anodique sont supérieures aux valeurs de température de la partie cathodique. **Figure.III.8.b.**

La température maximale se localise à l'entrée de la cellule, elle est celle des gaz (carburant et comburant). La température minimale est positionnée à l'extrémité de l'interconnecteur de la partie cathodique aux endroits les plus éloignés du canal cathodique de la sortie de la cellule. Elle est de l'ordre de 895,649 K. Une diminution des valeurs de température est clairement remarquable de l'entrée vers la sortie de la cellule, ce qui indique un cas non productif de chaleur. L'écart maximal des valeurs de température est d'environ de 27,351 K. Aussi, les valeurs de température dans la partie anodique sont supérieures aux valeurs de température de la partie cathodique. **Figure.III.8.c.**

III.2.1.1.2. Températures d'entrées des gaz différentes dans les deux canaux

Les champs de température de la pile à combustible SOFC planaire selon la symétrie de cellules pour différentes températures d'entrée des gaz, 873 K, pour l'hydrogène et (673,773 et 823 K) pour l'air, sont présentés par la **Figure.III.9.**

La valeur maximale de la température est celle d'hydrogène à l'entrée du canal anodique (873 K), aussi la température minimale se localise à l'entrée du canal cathodique, elle est celle de l'air (673 K). Une diminution des valeurs de température dans la partie supérieure de la

cellule est remarqué dans le premier centimètre de la direction des écoulements des deux gaz, ensuite une augmentation des valeurs de température est produite dans les trois précédents millimètres, ensuite une stabilité de la valeur de température est enregistrée le reste du long de la cellule. Une augmentation des valeurs de température dans la partie inférieure de la pile de l'entrée à la sortie de la cellule est clairement remarquable, ce qui démontre la non-productivité de chaleur. L'écart maximal des valeurs de température est celui des températures d'entrées des gaz. Aussi, les valeurs de température dans la partie anodique sont supérieures aux valeurs de température de la partie cathodique. **Figure.III.9.a.**

La valeur la plus élevée de température enregistrée dans la pile à combustible à oxyde solide planaire selon une configuration symétrique utilisant des différentes températures d'entrées des gaz (873 K pour l'hydrogène et 773 K pour l'air) est celle d'hydrogène à l'entrée du canal anodique (873 K), aussi la température minimale est localisée à l'entrée du canal cathodique, elle est celle de l'air (773 K). Une stabilité de la valeur de température dans partie anodique est enregistrée le long de la cellule. Une augmentation des valeurs de température dans la partie cathodique de l'entrée à la sortie de la cellule est clairement remarquable, ce qui démontre la non-productivité de chaleur. L'écart maximal des valeurs de température est celui des températures d'entrées des gaz. Aussi, les valeurs de température dans la partie anodique sont supérieures aux celles de la partie cathodique. **Figure.III.9.b.**

La plus grande valeur de température enregistrée dans la cellule planaire symétrique selon différentes températures d'entrées des gaz (873 K pour l'hydrogène et 823 K pour l'air) est de 873,093 K, elle est localisée au milieu de la direction des gaz dans les deux extrémités gauche et droit de la cellule, aussi la température minimale est localisée à l'entrée du canal cathodique, elle est celle de l'air (823 K). Une stabilité de la valeur de température dans partie anodique est enregistrée le long de la cellule est clairement visible sur la figure. Une augmentation des valeurs de température dans la partie cathodique de l'entrée au milieu de la cellule est clairement remarquable, ensuite une diminution de ces valeurs est obtenue dans le reste de la longueur, ce qui présente un cas de légère productivité de chaleur. L'écart maximal des valeurs de température est de 50,093 K. **Figure.III.9.c.**

III.2.1.2.Effet de la densité de courant

Cette partie concerne l'étude de l'influence de la densité de courant sur les valeurs minimales et maximales de la température et leurs champs selon une symétrie des étages de cellules de la pile à combustible SOFC.

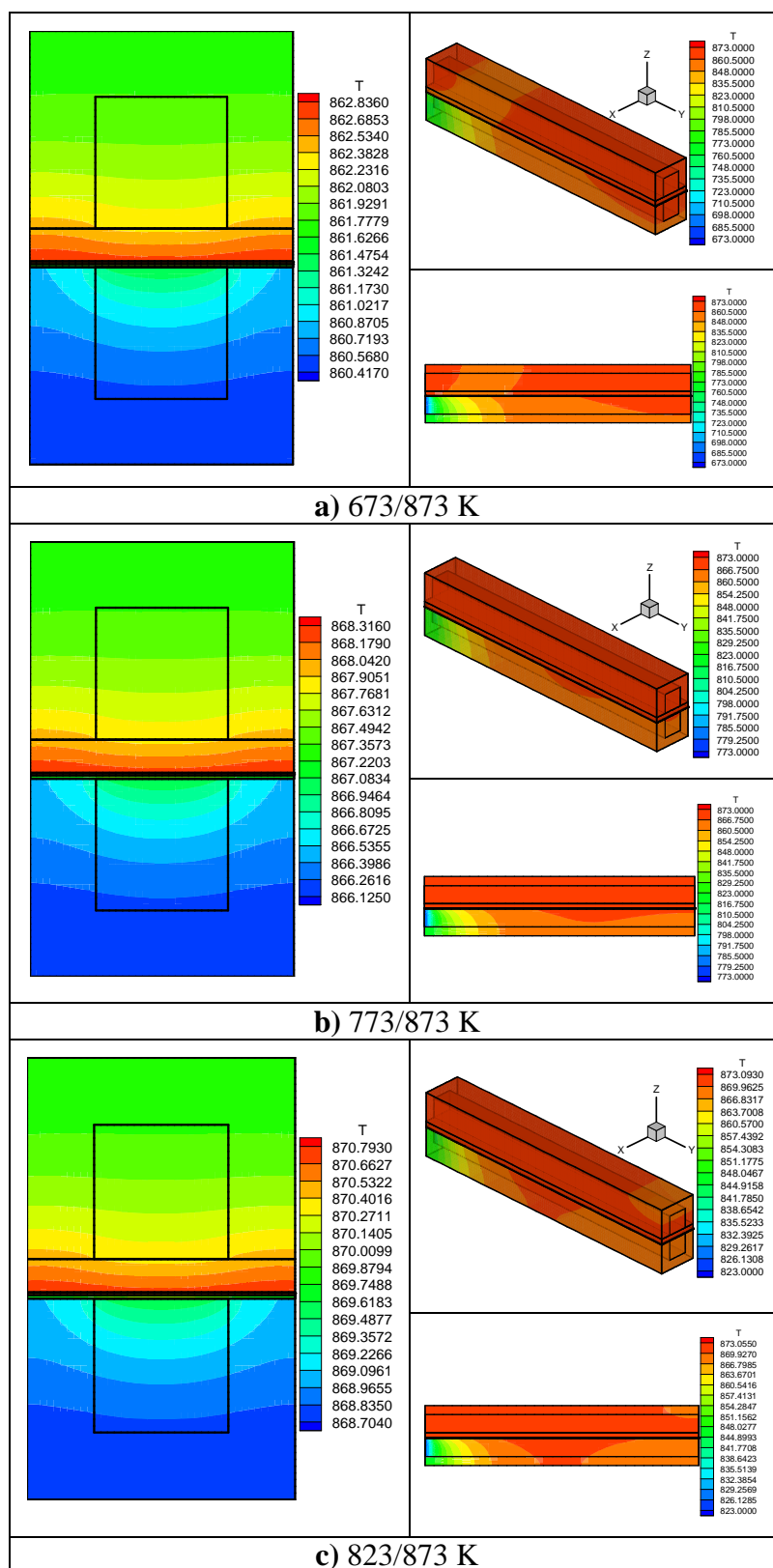


Fig.III.9. Champs de température de la cellule selon une symétrie des étages pour différentes températures d'entrée des gaz (hydrogène/air) : a) 673/873 K, b) 773/873 K et c) 823/873 K.

Les conductivités thermiques et électriques des composants de la cellule (l'anode, l'électrolyte, la cathode et les interconnecteurs) sont identiques à celles des matériaux standards

(NiYSZ), (YSZ), (LSM) et (SS) respectivement, une température d'entrée des deux gaz de 873 K a été utilisée. Les dimensionnements des éléments du cœur de la pile sont données par 500 μm pour l'anode [45], [79], [86], [108] et [109], 40 μm pour l'électrolyte [45], [50], [110], [111] et [112] et 50 μm pour la cathode [44], [45], [48], [85] et [93].

L'impact de la densité de courant sur la distribution et les valeurs de température est discuté dans la présente partie pour une symétrie des étages de cellules. Trois valeurs de densité de courant (15000, 20000 et 25000 A.m^{-2}) sont utilisées pour obtenir les présents résultats.

Les champs de température pour une pile à combustible SOFC planaire selon une symétrie de cellules pour les densités de courant de 15 000, 20 000 et 25 000 A.m^{-2} sont présentés dans la **Figure.III.10**.

La température maximale se localise à l'entrée de la pile et celle des deux gaz. La température minimale se situe à l'extrémité de l'interconnecteur de la partie cathodique aux endroits les plus éloignés du canal cathodique de la sortie de la pile. Elle est de l'ordre de 852,27 K. Un décroissement des valeurs de température est clairement visible de l'entrée vers la sortie de la cellule, ce qui démontre la non-productivité de chaleur sur le long de la cellule. L'écart maximal des valeurs de température est d'environ de 20,73 K. Aussi, les valeurs de la température dans la partie anodique sont plus grandes que celles de la partie cathodique. **Figure.III.10.a.**

Les plus petites valeurs de température se localisent en aval de la pile, exactement à l'extrémité de l'interconnecteur de la partie cathodique aux endroits les plus éloignés du canal cathodique. Les valeurs de température maximale se trouvent dans la partie supérieure de l'électrolyte dans les deux extrémités gauche et droite à une distance presque d'un centimètre de l'amont de la cellule, elle est de l'ordre de 877,747 K. Une augmentation des valeurs de température est remarquée dans le premier centimètre selon la direction des écoulements des gaz, ensuite un décroissement des valeurs de température se produit sur le reste du long de la cellule. L'augmentation des valeurs de température obtenue dans ce cas est d'environ de 4,747 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. **Figure.III.10.b.**

La température maximale se situe dans la partie supérieure de l'électrolyte à la sortie de la cellule dans les deux extrémités gauche et droite de la cellule, elle est de l'ordre de 892,866 K. La plus basse température est celle des gaz à l'entrée des deux canaux de la cellule (873 K). L'augmentation des valeurs de température est clairement visible de l'entrée vers la sortie de la cellule, cette augmentation est d'environ de 19,866 K, ce qui prouve le cas de production de

chaleur. Aussi, les valeurs de température dans la partie anodique sont supérieures aux valeurs de température de la partie cathodique. **Figure.III.10.c.**

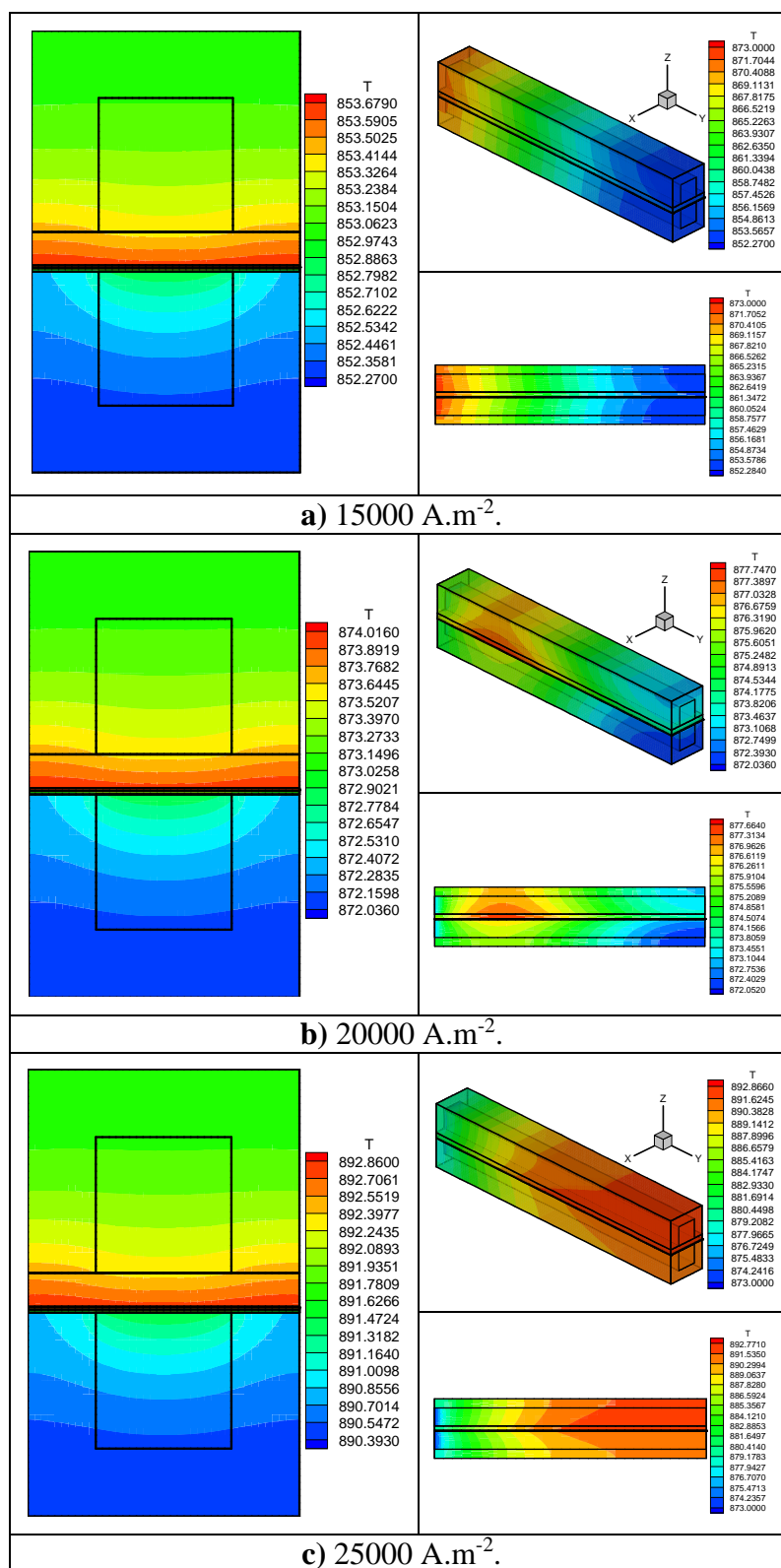


Fig.III.10. Champs de température de la cellule selon une configuration symétrique pour une densité de courant : a) 15000 A.m⁻², b) 20000 A.m⁻² et c) 25000 A.m⁻².

III.2.1.3.Effet de l'épaisseur de l'électrolyte

La présente partie concerne l'étude de l'impact de l'épaisseur de l'électrolyte sur les distributions et les valeurs de température selon une symétrie des étages de cellules. Les dimensionnements des électrodes sont donnés par 500 μm pour l'anode [45], [79], [86], [108] et [109], et 50 μm pour la cathode [44], [45], [48], [85] et [93]. Les conductivités thermiques et électriques de chaque composant ; anode, électrolyte et cathode sont celles des matériaux standards (NiYSZ), (YSZ), (LSM) et (SS) respectivement, la valeur utilisée de la densité de courant imposé est de 20000 A.m^{-2} [15], [45] et [80]. Parmi plusieurs dimensions de l'épaisseur de l'électrolyte trouvées dans la bibliographie, trois valeurs d'épaisseurs d'électrolyte se sont choisis pour la simulation (20, 40 et 60 μm). Les champs de température la cellule SOFC planaire selon une symétrie de cellules pour les épaisseurs d'électrolyte de (20, 40 et 60 μm) sont présentés par la **Figure.III.11**.

La température maximale se trouve à l'entrée de la cellule, elle est celle des deux gaz. La température minimale se localise à l'extrémité de l'interconnecteur de la partie cathodique aux endroits les plus éloignés du canal cathodique de la sortie de la cellule, elle est de l'ordre de 848,081 K. Le décroissement des valeurs de température est clairement visible de l'entrée vers la sortie de la cellule, ce qui représente un cas non productif de chaleur sur le long de la cellule. L'écart maximal des valeurs de température obtenu dans ce cas est d'environ de 24,919 K. Aussi, les valeurs de température dans la partie anodique sont plus grandes que celles de la partie cathodique. **Figure.III.11.a**.

Les plus basses températures sont localisées à la sortie de la pile, plus exactement à l'extrémité de l'interconnecteur de la partie cathodique aux endroits les plus éloignés du canal cathodique. La température maximale est localisée dans la partie supérieure de l'électrolyte dans les deux extrémités gauche et droite à une distance presque d'un centimètre de l'entrée des gaz de la cellule, elle est de l'ordre de 877,747 K. Une augmentation des valeurs de température est remarquée 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. L'augmentation des valeurs de température est d'environ de 4,747 K, ce qui représente un cas d'une légère production de chaleur sur le long de la cellule. Ainsi, les valeurs de température dans la partie anodique sont supérieures aux valeurs de température de la partie cathodique. **Figure.III.11.b**.

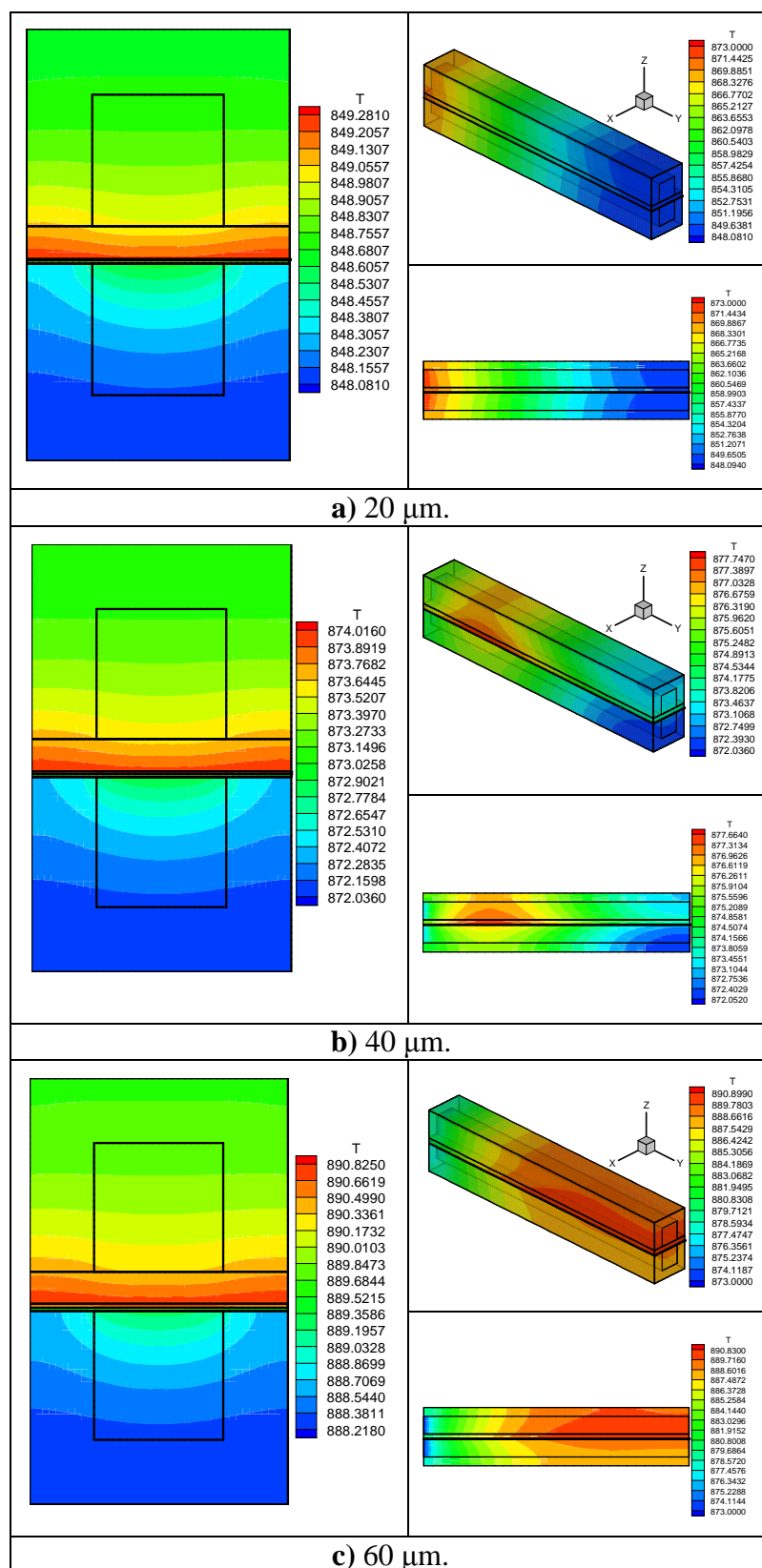


Fig.III.11. Champs de température de la cellule pour une configuration symétrique pour une épaisseur d'électrolyte : a) 20, b) 40 et c) 60 μm .

La température maximale se localise dans la partie supérieure de l'électrolyte à la sortie de la cellule dans les deux extrémités gauche et droite de la cellule elle est de l'ordre de 890,899

K. La plus basse température obtenue est celle des gaz à l'entrée de la cellule (873 K). Une augmentation des valeurs de température est clairement remarquable de l'entrée vers la sortie de la cellule, cette augmentation des valeurs de température est d'environ de 17,899 K, ce qui démontre un cas de production de chaleur. Ainsi, les valeurs de la température dans la partie anodique sont supérieures aux valeurs de la température de la partie cathodique. **Figure.III.11.c.**

III.2.2.Champs de température pour une répétition des étages de cellules

Dans cette partie, l'influence de la température d'entrée des deux gaz, la densité de courant et l'épaisseur de l'électrolyte sur les valeurs maximales de la température et leurs champs est présenté selon une répétition des étages de cellules.

III.2.2.1.Effet de la température d'entrée des gaz

L'impact de la température d'entrée des gaz sur les distributions et les valeurs extrêmes de la température selon une répétition de cellules est présenté pour deux types d'alimentation, une température identique et différentes températures d'entrées des gaz.

III.2.2.1.1.Températures d'entrées des gaz identique dans les deux canaux

Les champs de température de la SOFC planaire obtenus selon une répétition de cellules et des températures d'entrées des gaz identiques sont présentés par la **Figure.III.12.**

La température maximale est localisée dans la partie supérieure de l'électrolyte à la sortie de la cellule dans les deux extrémités gauche et droite de la cellule, elle est de l'ordre de 832,179 K. La plus basse température obtenue est celle des gaz à l'entrée de la cellule (673 K). Une augmentation des valeurs de température est clairement remarquable de l'entrée vers la sortie de la cellule, cette augmentation des valeurs de température est d'environ de 159,179 K, ce qui démontre un cas de production de chaleur. Aussi, les valeurs de température dans la partie anodique sont supérieures aux celles de la partie cathodique. **Figure.III.12.a.**

Les plus basses températures se localisent à l'entrée des canaux de pile, elles sont celles des gaz réactifs (873 K). Les températures maximales sont localisées dans la partie supérieure de l'électrolyte dans les deux extrémités gauche et droite de la pile à une distance presque d'un centimètre de l'entrée des gaz, elles sont de l'ordre de 878,924 K. Une augmentation des valeurs de température est remarquée 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. L'augmentation des valeurs de température est d'environ de 5,924 K, ce qui représente un cas d'une légère production de chaleur. Aussi, les valeurs de température dans la partie anodique sont supérieures aux valeurs de température de la partie cathodique. **Figure.III.12.b.**

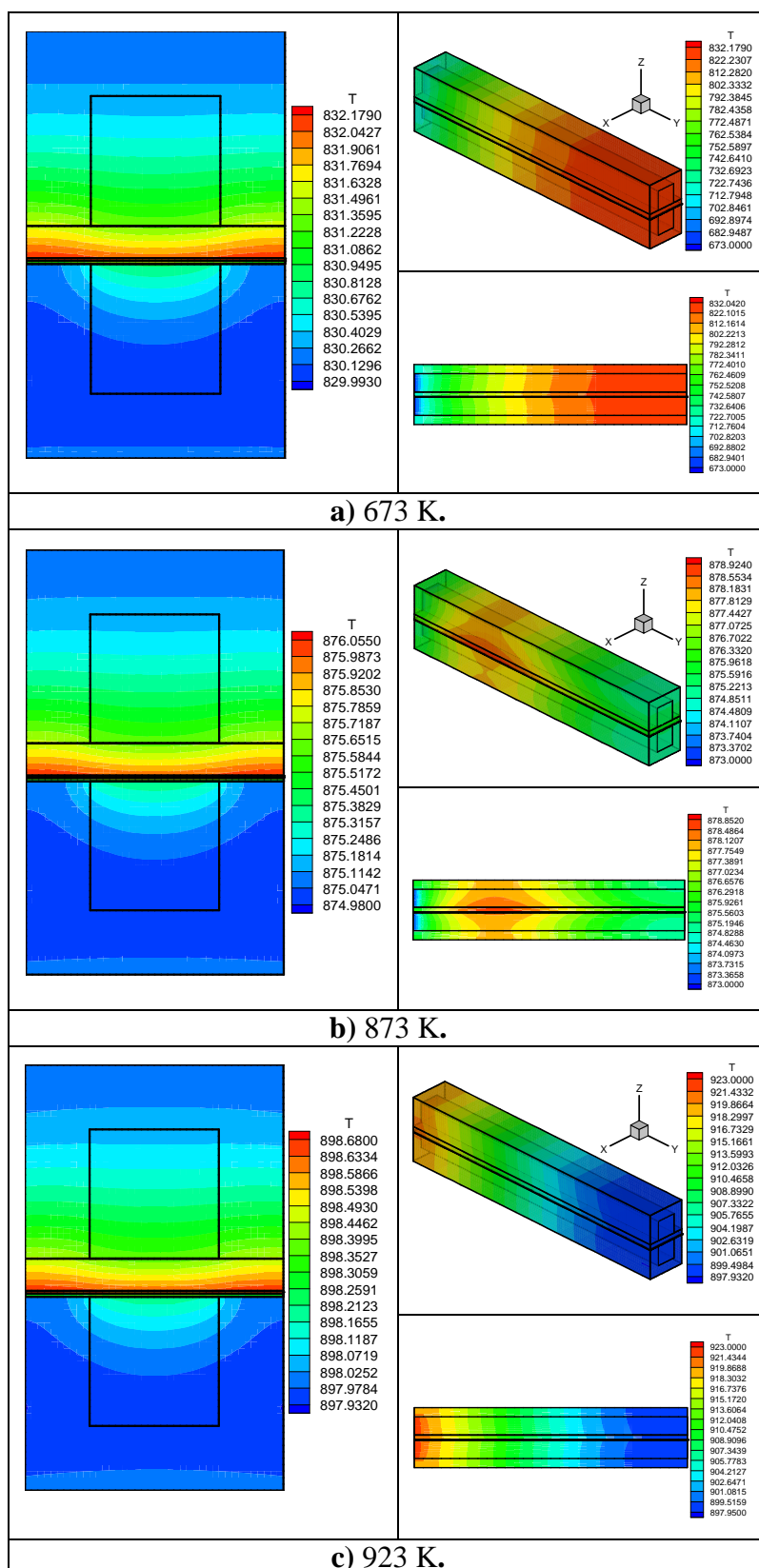


Fig.III.12. Champs de température de la cellule selon une répétition des étages à une température d'entrée des gaz : a) 673 K, b) 873 K et c) 923 K.

La température maximale se positionne à l'entrée de la cellule, elle est celle des gaz (carburant et comburant). La température minimale est positionnée à l'extrémité de

l'interconnecteur de la partie cathodique aux endroits les plus éloignés du canal cathodique de la sortie de la cellule, elle est de l'ordre de 897,932 K. Une diminution des valeurs de température est clairement remarquable de l'entrée vers la sortie de la cellule, ce qui donne un cas non productif de chaleur. L'écart maximal des valeurs de température est d'environ de 25,068 K. Aussi, les valeurs de température dans la partie anodique sont supérieures aux valeurs de température de la partie cathodique. **Figure.III.12.c.**

III.2.2.1.2. Températures d'entrées des gaz différentes dans les deux canaux

Les champs de température de la pile à combustible SOFC planaire selon la répétition des étages de cellules pour différentes températures d'entrée des gaz, 873 K, pour l'hydrogène et 673,773 et 823 K pour l'air, sont présentés par la **Figure.III.13.**

Sur les champs de température présentés par la **Figure.III.13.a**, il est clairement remarquable qu'une légère production de chaleur sur la longueur de la cellule (cas productif de chaleur). La valeur maximale de la température est supérieure de celle d'hydrogène à l'entrée du canal anodique (874,018 K). La température minimale se localise à l'entrée du canal cathodique, elle est celle de l'air. Une augmentation des valeurs de température dans la partie supérieure de la cellule est produite sur la direction des écoulements des deux gaz, ensuite une diminution de ces valeurs est enregistrée sur le reste du long de la cellule. Une augmentation des valeurs de température dans la partie inférieure de la pile de l'entrée à la sortie de la cellule est clairement remarquable. L'écart maximal des valeurs de température est d'environ 201 K. Aussi, les valeurs de température dans la partie anodique sont supérieures aux valeurs de température de la partie cathodique.

La valeur la plus élevée de température enregistrée dans la pile à combustible à oxyde solide planaire selon une configuration de répétition de celles utilisant des différentes températures d'entrées des gaz (873 K pour l'hydrogène et 773 K pour l'air) est 876,056 K et la température minimale est celle de l'air (773 K) à l'entrée du canal cathodique. Une stabilité de la valeur de température dans partie anodique est enregistrée le long de la cellule. Une augmentation des valeurs de température dans les premiers millimètres de la partie cathodique est clairement remarquable, ensuite une stabilité de ces valeurs sur le reste de la longueur de la cellule est enregistrée, ce qui démontre la productivité de chaleur. L'écart maximal des valeurs de température est de 103,056 K. **Figure.III.13.b.**

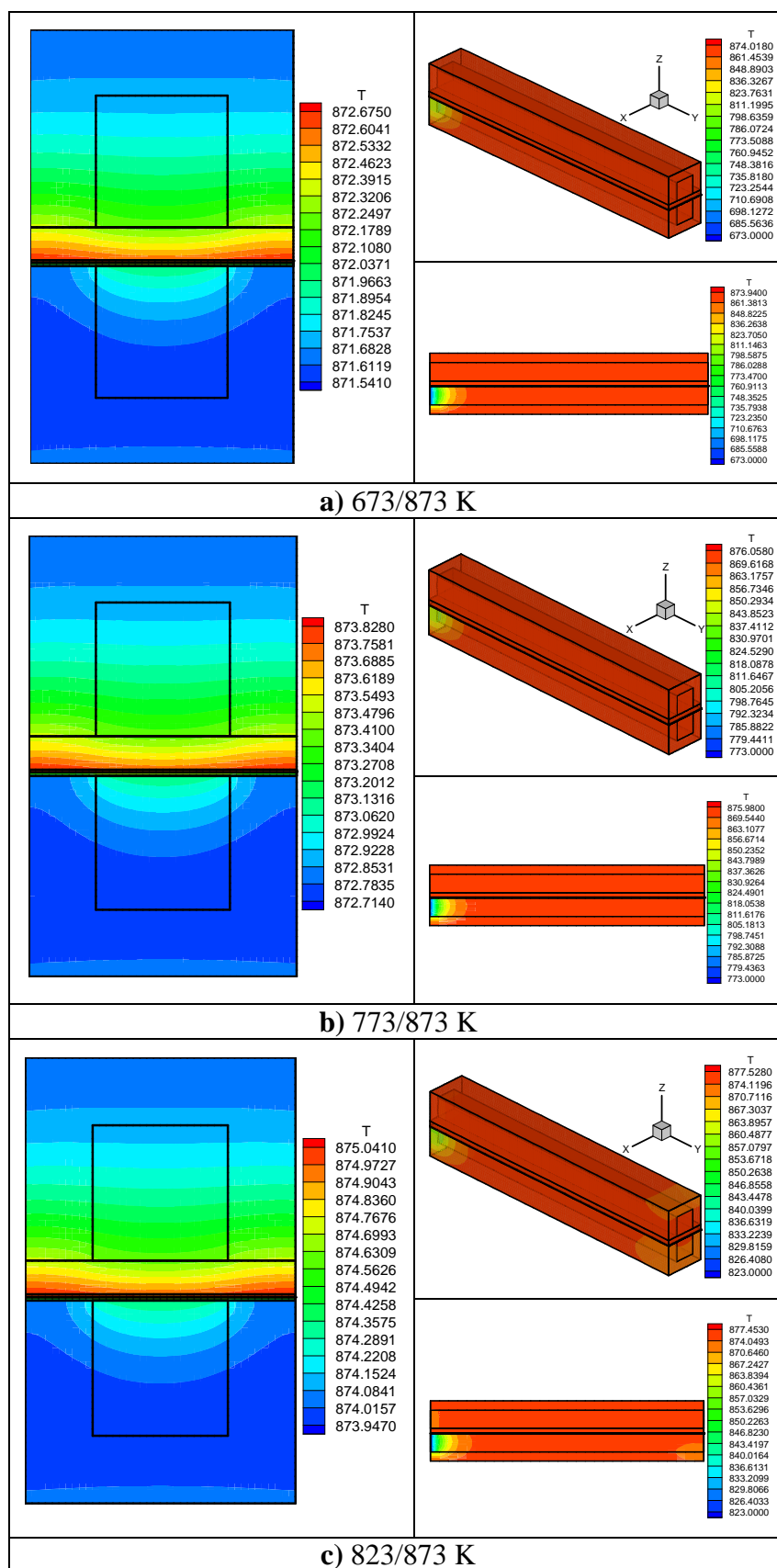


Fig.III.13.Champs de température de la cellule selon une répétition des étages pour différentes températures d'entrée des gaz (hydrogène/air) : a) 673/873 K, b) 773/873 K et c) 823/873 K.

La plus grande valeur de température enregistrée dans la cellule selon les différentes températures d'entrées des gaz (873 K pour l'hydrogène et 823 K pour l'air) est de 877,528 K qui se localise au milieu de la direction des gaz dans les deux extrémités gauche et droite de la cellule, aussi la température minimale est localisée à l'entrée du canal cathodique, elle est celle de l'air (823 K). Une stabilité de la valeur de température dans la partie anodique est enregistrée le long de la cellule est clairement visible sur la figure. Une augmentation des valeurs de températures dans la partie cathodique à l'entrée de la cellule est clairement remarquable, ensuite une stabilité de ces valeurs est obtenue dans le reste de la longueur, ce qui présente un cas de productivité de chaleur. L'écart maximal des valeurs de température est de 54,528 K. **Figure.III.13.c.**

III.2.2.2.Effet de la densité de courant

Dans cette partie, l'effet de la densité de courant sur la répartition et les valeurs de température qui sont discutées pour un cas de symétrie des étages de cellules pour trois densités de courant (15000, 20000 et 25000 A.m⁻²) est présenté. Les champs de température de la pile à combustible SOFC planaire à répétition des étages de cellules selon les densités de courant de (15000, 20000 et 25000 A.m⁻²) sont présentés par la **Figure.III.14.**

La valeur maximale de température se localise à l'entrée de la pile, elle est celle des gaz réactifs (873 K). La température minimale se localise à l'extrémité de l'interconnecteur de la partie cathodique aux endroits les plus éloignés du canal cathodique de la sortie de la pile. Elle est de l'ordre de 853,972 K. Le décroissement des valeurs de température est clairement visible de l'entrée vers la sortie de la cellule (cas non productif de chaleur). L'écart maximal des valeurs de température dans la cellule est d'environ de 19,028 K. Aussi, les valeurs de température dans la partie anodique sont plus grandes que celles de la partie cathodique. **Figure.III.14.a.**

Les températures minimales sont situées à l'amont des deux canaux de la cellule, elles sont celles des deux gaz (873 K). Les températures maximales sont positionnées dans la portion supérieure de l'électrolyte dans les deux ailes gauche et droite de la cellule à une distance presque d'un centimètre de l'amont, elles sont d'environ de 878,924 K. L'augmentation des valeurs de température est clairement remarquable dans le premier centimètre selon la longueur de la cellule, ensuite une diminution de la température est provoquée sur le reste de la longueur. L'augmentation des températures est de l'ordre de 5,924 K, ce qui conduit à un cas d'une légère productivité de chaleur. Aussi, les valeurs de température dans la partie anodique sont supérieures à celles de la partie cathodique. **Figure.III.14.b.**

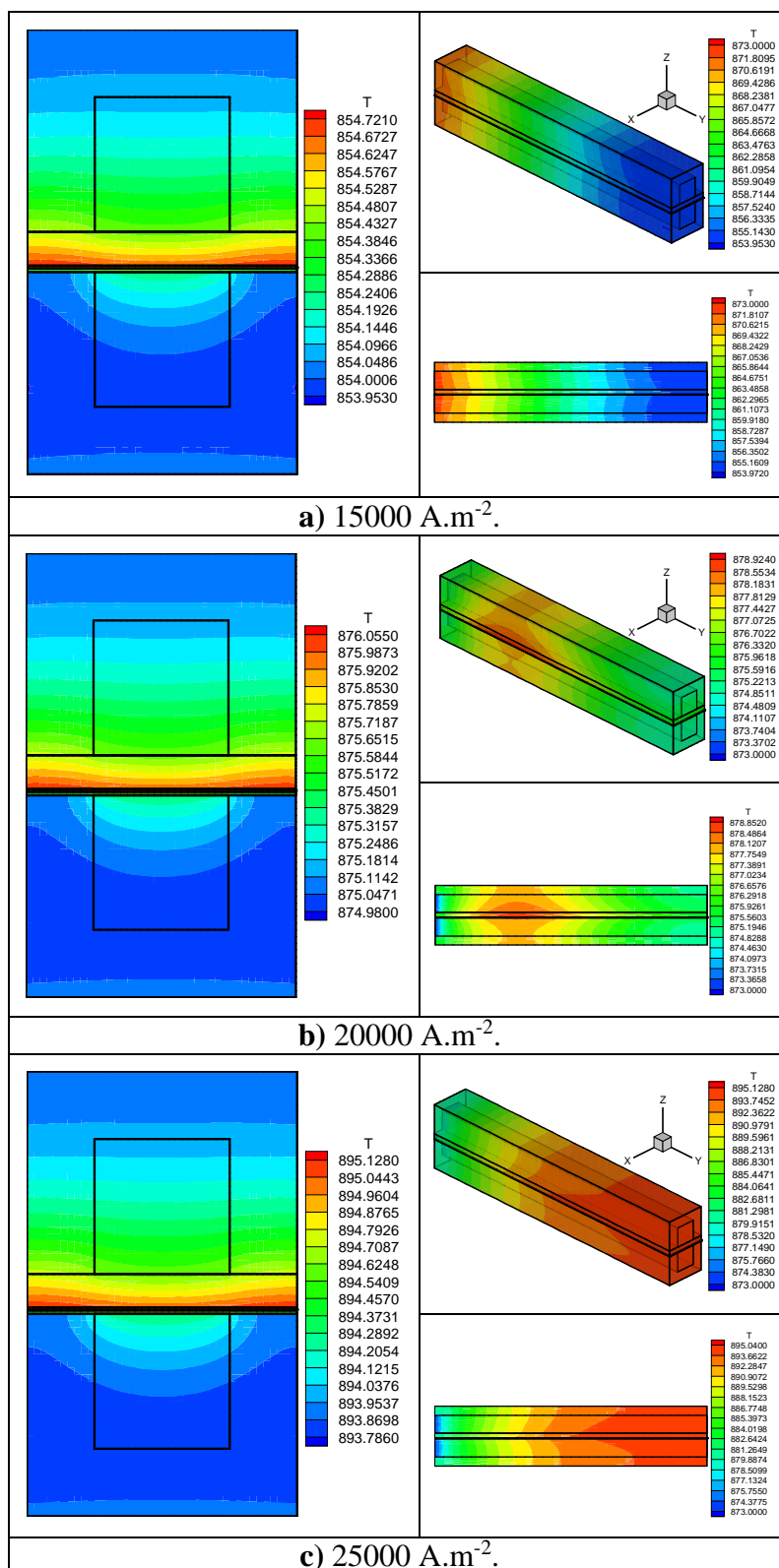


Fig.III.14. Champs de température de la cellule selon une répétition des étages pour une densité de courant : a) 15000, b) 20000 et c) 25000 A.m⁻².

La valeur de la température maximale se localise dans le morceau supérieur de l'électrolyte qui avoisine l'anode à la sortie de la pile, plus exactement dans les deux ailes

gauche et droite, elle est autour de 895,128 K. La température minimale positionne en amont de la cellule, elle est celle des gaz de 873 K. L'accroissement des valeurs de température de l'entrée vers la sortie de la cellule est clair, cet accroissement est autour de 22,128 K, ce qui prouve la productivité de chaleur. Aussi, les valeurs de température dans la moitié haute sont supérieures à celles de la moitié basse. **Figure.III.14.c.**

III.2.2.3.Effet de l'épaisseur de l'électrolyte

L'effet de l'épaisseur de l'électrolyte sur les champs et les valeurs de température qui sont obtenues par une répétition des étages de cellules selon les dimensions de l'épaisseur de l'électrolyte (20, 40 et 60 μm) est présenté par la **Figure.III.15.**

La température maximale se positionne à l'entrée de la cellule elle est celle des gaz (carburant et comburant). La température minimale est localisée à l'extrémité de l'interconnecteur de la partie cathodique aux endroits les plus éloignés du canal cathodique de la sortie de la cellule, elle est de l'ordre de 848,948 K. Une diminution des valeurs de température est clairement remarquable de l'entrée vers la sortie de la cellule, ce qui donne un cas non productif de chaleur. L'écart maximal des valeurs de température est d'environ de 24,052 K. Ainsi, les valeurs de température dans la partie anodique sont supérieures aux valeurs de température de la partie cathodique. **Figure.III.15.a.**

Les champs de température de la pile à combustible SOFC planaire selon une répétition de cellule pour une épaisseur d'électrolyte de 40 μm sont présentés par la **Figure.III.15.b.** Les plus basses températures se sont localisées à l'entrée des deux canaux de la pile, elles sont celles des gaz réactifs (873 K). Les valeurs de température maximales sont localisées dans la partie supérieure de l'électrolyte dans les deux extrémités gauche et droite de la cellule à une distance presque d'un centimètre de l'entrée des gaz, elles sont de l'ordre de 878,924 K. Une augmentation des valeurs de température est remarquée 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. L'augmentation des valeurs de température est d'environ de 5,924 K, ce qui représente un cas d'une légère production de chaleur. Ainsi, les valeurs de température dans la partie anodique sont supérieures aux valeurs de température de la partie cathodique.

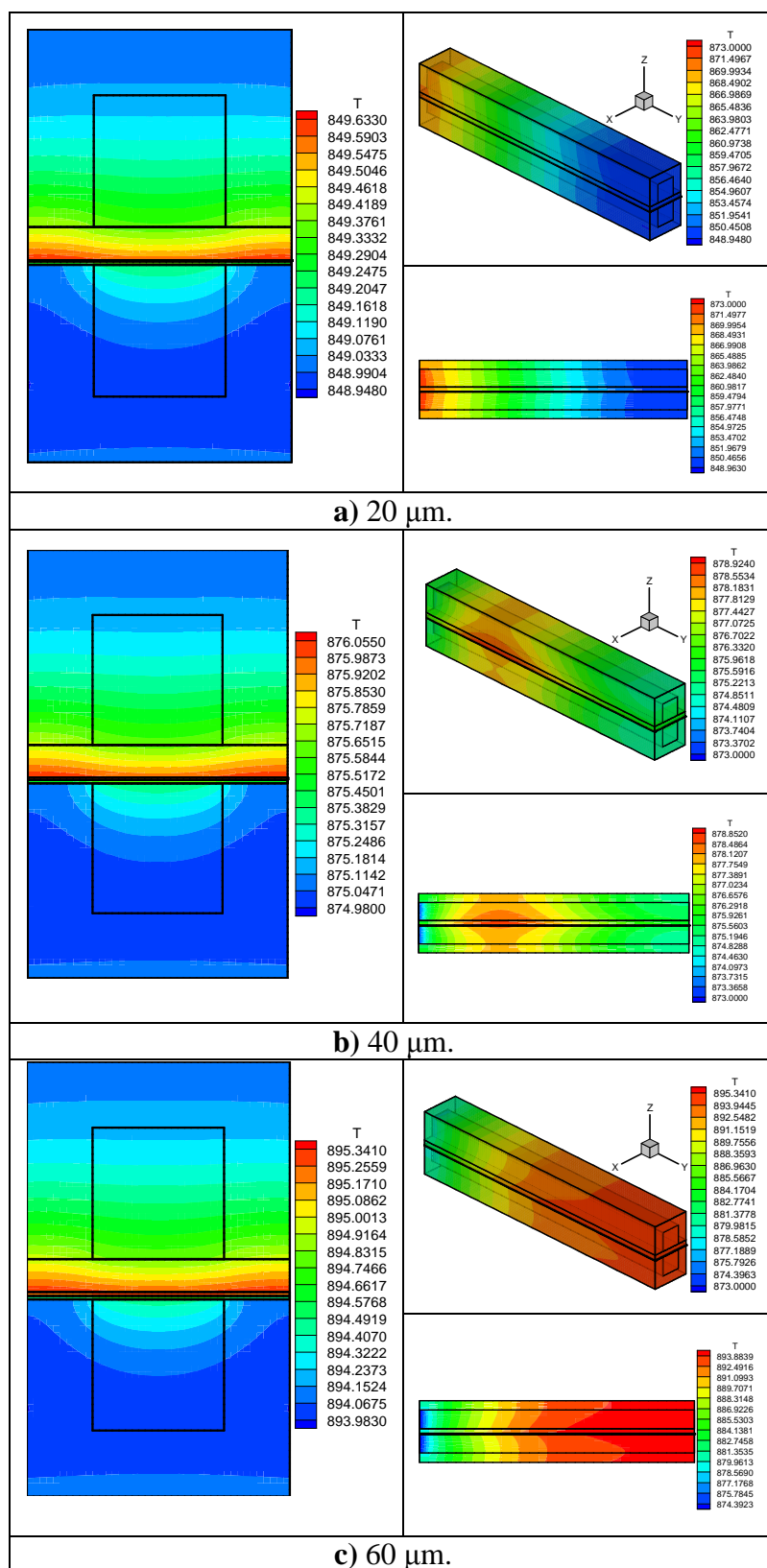


Fig.III.15.Champs de température de la cellule selon une répétition des étages pour les épaisseurs d'électrolyte : a) 20, b) 40 et c) 60 μm .

Les champs de température de la pile à combustible SOFC plane selon une répétition de cellules et une épaisseur d'électrolyte de 60 μm sont présentés par la **Figure.III.15.c**. La

température maximale est localisée dans la partie supérieure de l'électrolyte à la sortie de la cellule dans les deux extrémités gauche et droite de la cellule elle est de l'ordre de 895,341 K. La plus basse température est celle des gaz à l'entrée de la cellule (873 K). Une augmentation des valeurs de température est clairement remarquable de l'entrée vers la sortie de la cellule, cette augmentation des valeurs de température est d'environ de 22,341 K, ce qui démontre un cas de production de chaleur. Ainsi, les valeurs de température dans la partie anodique sont supérieures aux valeurs de température de la partie cathodique.

III.2.3.Comparaison entre la répétition et la symétrie des étages de cellules

La comparaison entre les résultats obtenus par la simulation de la pile qui se base sur une symétrie des étages de cellules et celle qui se base sur une répétition des étages de cellules est présentée selon trois paramètres : température d'entrée des gaz, densité de courant et l'épaisseur de l'électrolyte.

III.2.3.1.Température d'entrée des gaz

La comparaison entre les deux configurations géométriques est présentée selon deux cas. Dans le premier cas, les valeurs de la température des deux gaz sont les mêmes à l'entrée des canaux anodique et cathodique de la cellule. Pour le deuxième cas, deux différentes valeurs de température à l'entrée de chaque canal sont utilisées, c'est-à-dire que la température de l'hydrogène à l'entrée du canal anodique est différente de celle de l'air à l'entrée du canal cathodique.

III.2.3.1.1.Températures d'entrées des gaz identique dans les deux canaux

L'influence des valeurs de la température d'entrée des gaz aux canaux de la pile objets de comparaison dans cette partie pour les deux configurations, répétition et symétrie des étages de cellule, selon la même valeur de température d'entrée des deux gaz (673, 873 et 923 K) est présenté.

Il est clairement remarquable, pour chaque valeur de température d'entrée des gaz (673, 873 et 923 K), que les courbes obtenues par les deux configurations ayant presque la même forme. **Figure.III.16.**

Pour une température d'entrée des gaz équivalant à 673 K, l'élévation des valeurs de la température est très apparente de l'entrée à la sortie de la pile, au début de la cellule, la valeur de la température reste constante presque d'un millimètre, ensuite, l'augmentation des valeurs de températures se fait hyperboliquement. L'écart des valeurs de la température de chaque point entre les deux types de piles (répétition ou symétrie des étages) reste le même tout le long du

premier millimètre, ensuite il se développe proportionnellement suivant la longueur de la cellule SOFC. **Figure.III.16.a.**

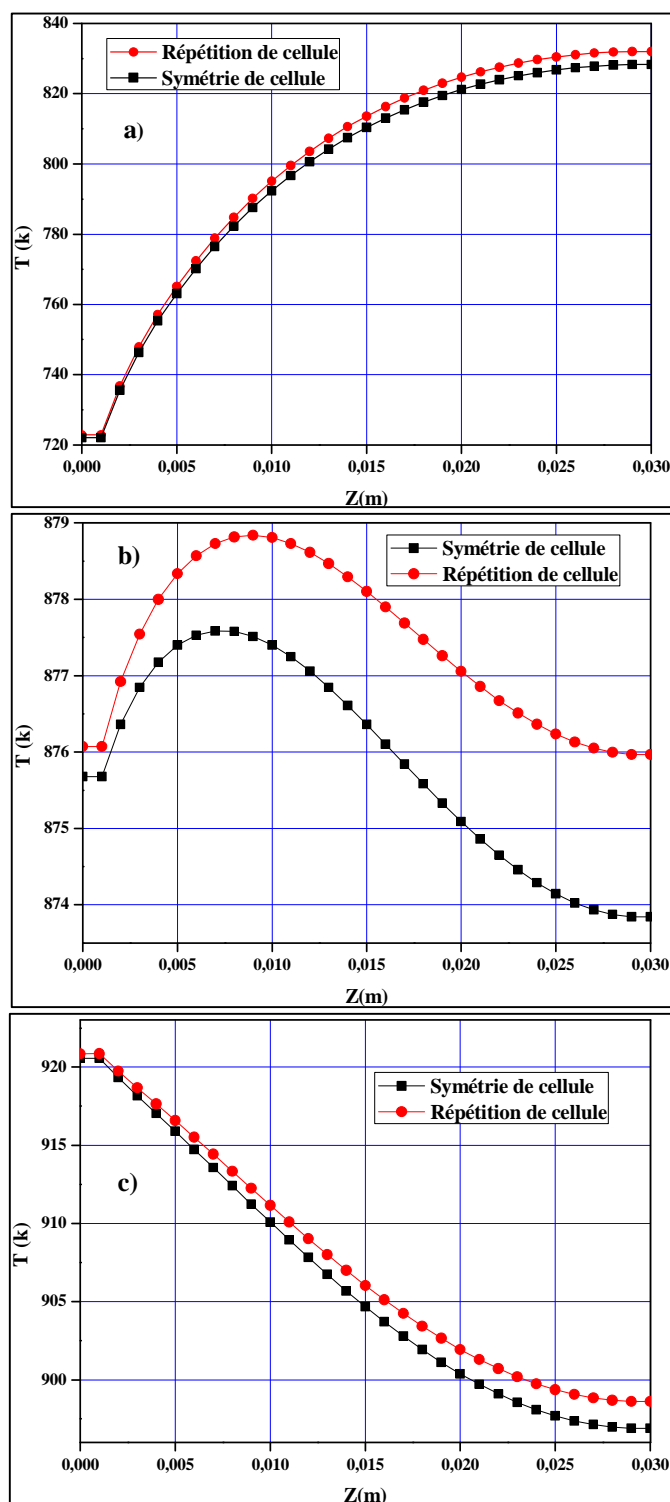


Fig.III.16. Evolution de la température du milieu de l'électrolyte suivant l'axe (OY); pour une même température d'entrée des gaz. a) 673 K, b) 873 K et c) 923 K.

Pour une température d'entrée des gaz équivalant à 873 K, une légère élévation des valeurs de la température est obtenue, à l'entrée de la cellule, la valeur de la température reste constante presque d'un millimètre, ensuite, une augmentation des valeurs de températures se fait hyperboliquement dans les sept premiers millimètres pour le cas de répétition de cellules et de neuf millimètres pour le cas de symétrie de cellules, ensuite un effondrement parabolique des valeurs se fait jusqu'à la fin de la cellule. L'écart des valeurs de la température de chaque point entre les deux types de piles (répétition ou symétrie des étages) reste constant dans le premier millimètre, ensuite il se développe proportionnellement avec la longueur.

Figure.III.16.b.

Pour une température des gaz alimentant la cellule équivalant à 923 K, l'abaissement des valeurs de la température est clairement visible, à l'entrée de la cellule, la valeur de la température reste constante presque d'un millimètre, ensuite, un effondrement parabolique des valeurs se produit sur le reste de la longueur de la cellule. L'écart des valeurs de la température de chaque point entre les deux types de piles (répétition ou symétrie des étages) reste constant dans le premier millimètre, ensuite il se développe proportionnellement avec la longueur.

Figure.III.16.c.

L'évolution de 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 pour les deux configurations étudiées (répétition et symétrie de cellule) est présenté dans la

Figure.III.17.

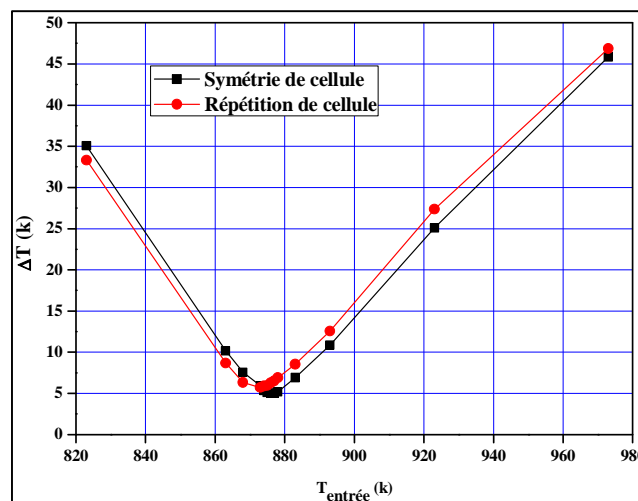


Fig.III.17. Effet de la température d'entrée des gaz sur l'écart maximal des températures dans la cellule SOFC.

Les deux courbes présentées ayant presque la même forme. Au début de la courbe, l'écart maximal des valeurs de la température se décroît quasi-linéairement, d'une entité d'environ 35 K pour le cas de symétrie de cellules et de 34 K pour le cas de répétition de cellules jusqu'à atteindre un écart de température de 5,771 K qui est produit par une température d'entrée de 873 K dans le cas de répétition de cellules et de 5,008 K qui est produit par une température d'entrée de 877 K dans le cas de symétrie de cellules. Ensuite, il se croît quasi-linéairement vers la sortie. **Figure.III.17.**

III.2.3.1.2. Températures d'entrées des gaz différentes dans les deux canaux

Dans cette partie de ce présent chapitre, une comparaison entre les deux configurations (répétition et symétrie des étages de cellules) pour le cas où la température d'entrée de fuel est différente de celle de l'air est présentée. **Figure.III.18.**

Les deux courbes présentées ayant presque la même forme. Pour une symétrie des étages de cellule, l'élévation des valeurs de la température est clairement visible du début à la fin de la pile, à l'entrée, la valeur de la température reste stable dans le premier millimètre, ensuite, l'augmentation se fait hyperboliquement. Pour le cas de répétition des étages de cellule, l'augmentation des valeurs de la température est clairement visible entre l'entrée et la sortie de la pile. Au début de la cellule, la valeur de la température prend une valeur constante dans le premier millimètre, ensuite, l'accroissement de la température se fait hyperboliquement jusqu'à atteindre la valeur de température maximale de 873,924 K à une distance de 13 mm de l'entrée de la pile, ensuite, les valeurs de température se décroissent quasi-linéairement du lieu de la maximale entité (13 mm) à la sortie de la pile. **Figure.III.18.a.**

Il est clairement remarquable, que les courbes obtenues par les deux configurations ayant presque la même forme. Pour des températures d'entrée des gaz de 773 K pour l'air et 873 K pour l'hydrogène, l'élévation des valeurs de la température est très apparente de l'entrée à la sortie de la pile, au début de la cellule, la valeur de la température reste constante presque d'un millimètre, ensuite, l'augmentation des valeurs de températures se fait hyperboliquement jusqu'à atteindre sa valeur maximale, puis elle se décroît paraboliquement de la maximale entité à la sortie de la cellule. La valeur de température maximale obtenue est de 875.98 K. L'écart des valeurs de la température de chaque point entre les deux types de piles (répétition ou symétrie des étages) reste presque le même obtenu pour les températures d'entrée des gaz 673/873 K tout le long de la cellule SOFC. **Figure.III.18.b.**

Pour des températures d'entrée des gaz équivalents à 823 K pour l'air et à 873 K pour l'hydrogène, les mêmes évolutions de température et de l'écart des valeurs de la température

entre les deux types de configurations, en outre, la température maximale obtenue est de l'ordre de 877,453 K. **Figure.III.18.c.** Pour ces trois cas présentés par la **Figure.III.18** la SOFC composée par une répétitions des étages de cellule présente des températures élevées de celle de la SOFC composée par une symétrie des étages de cellule.

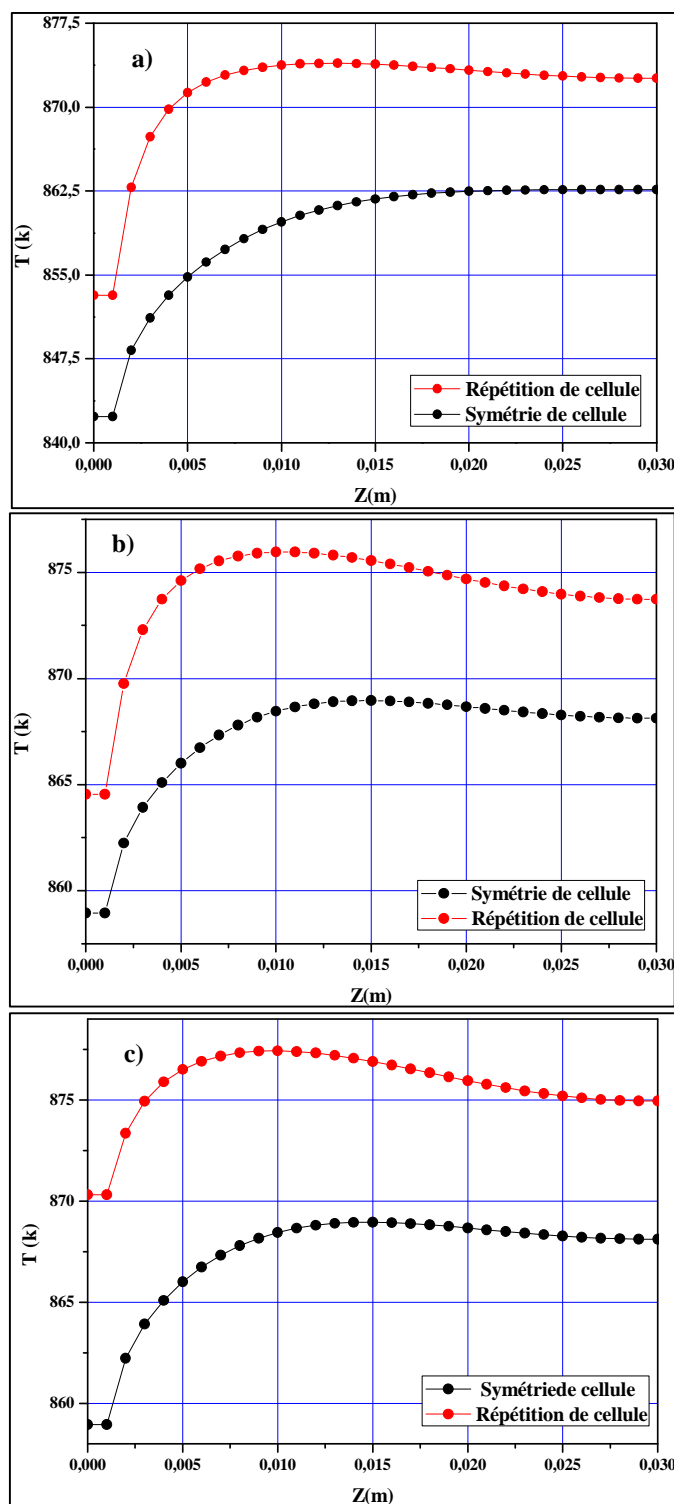


Fig.III.18. Evolution de la température du milieu de l'électrolyte suivant l'axe (OY) ; pour différentes température d'entrée des gaz : a) 673/873 K, b) 773/873 K et c) 823/873 K.

III.2.3.2. Densité de courant

Pour chaque valeur de densité de courant (15000, 20000 et 25000 A.m⁻²), les courbes obtenues par les deux configurations ayant presque la même allure. **Figure.III.19.**

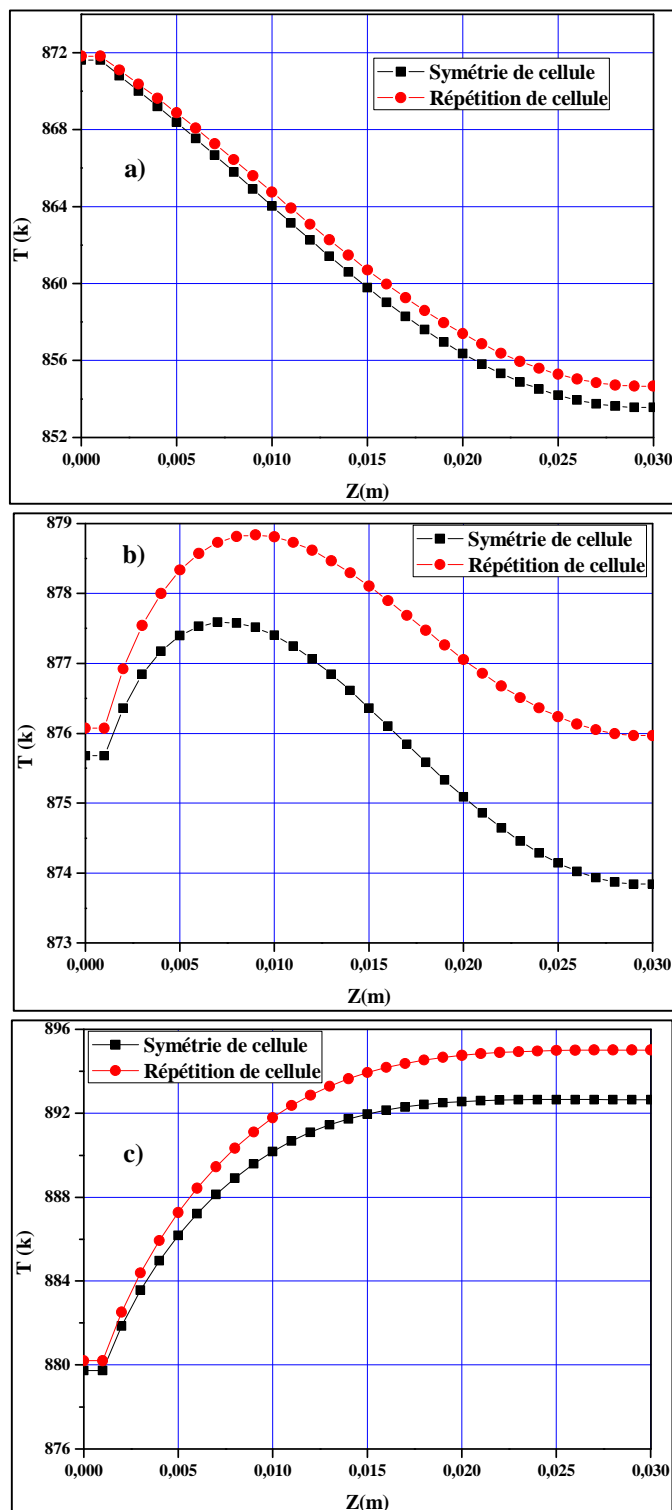


Fig.III.19. Evolution de la température du milieu de l'électrolyte suivant l'axe (OY) selon la densité de courant. a) 15000 A.m⁻², b) 20000 A.m⁻² et c) 25000 A.m⁻².

Pour une densité de courant équivalant de 15000 A.m^{-2} , l'abaissement des valeurs de la température est clairement visible ; à l'entrée de la cellule la valeur de la température reste constante dans une distance presque d'un millimètre, ensuite, un effondrement parabolique des valeurs se développe sur le reste de la longueur de la cellule. L'écart des valeurs de la température de chaque point entre les deux types de piles (répétition ou symétrie des étages) reste le même dans le premier millimètre, ensuite il s'amplifie proportionnellement avec la longueur. **Figure.III.19.**

Pour une densité de courant équivalente de 20000 A.m^{-2} , on obtenait un léger accroissement des valeurs de la température ; à l'entrée de la pile la température reste identique presque d'un millimètre, ensuite, un accroissement se réalise hyperboliquement dans les sept millimètres suivants pour la configuration de répétition des étages de cellules et de neuf millimètres pour la configuration de symétrie des étages de cellules, ensuite un décroissement parabolique des valeurs se réalise dans le reste de la longueur. L'écart des valeurs de la température de chaque point entre les deux types de piles (répétition ou symétrie des étages) est constant dans le premier millimètre, ensuite il se développe proportionnellement avec la longueur de la cellule. **Figure.III.19.**

Dans le cas d'une densité de courant équivalant de 25000 A.m^{-2} , l'élévation des valeurs de la température est très claire de l'entrée à la sortie de la pile ; au début de la cellule la valeur de la température reste constante dans une distance presque d'un millimètre, ensuite, l'accroissement se réalise hyperboliquement sur le reste de longueur de la cellule. La différence entre les valeurs de la température de chaque position des deux configurations (répétition ou symétrie des étages) reste constante dans le premier millimètre, ensuite elle s'accroisse proportionnellement suivant la longueur de la cellule. **Figure.III.19.**

L'évolution de l'écart maximal de la température dans la pile SOFC selon les différentes valeurs de densité de courant pour les deux configurations étudiées (répétition et symétrie des étages de cellules) est présentée par la **Figure.III.20.**

Pour chaque valeur de température d'entrée des gaz, les courbes présentées ayant presque la même forme et des valeurs presque similaires. Au début de chaque courbe, l'écart maximal des valeurs de la température se décroisse quasi-linéairement jusqu'à atteindre l'écart minimal de température, ensuite, il se croisse quasi-linéairement. Aussi, la différence entre les deux écarts se développe proportionnellement en fonction de la densité de courant quel que soit la valeur de la température d'entrée des gaz. L'écart minimal de température est obtenu toujours dans le cas de répétition des étages de cellules. L'écart de température du cas de symétrie des étages de cellules est inférieur à celui de répétition des étages de cellules dans les

cas de faible production et non productif de chaleur, par-contre il est supérieur à l'écart de température généré par la cellule de configuration de répétition des étages de cellules dans les cas productifs de chaleur. **Figure.III.20.**

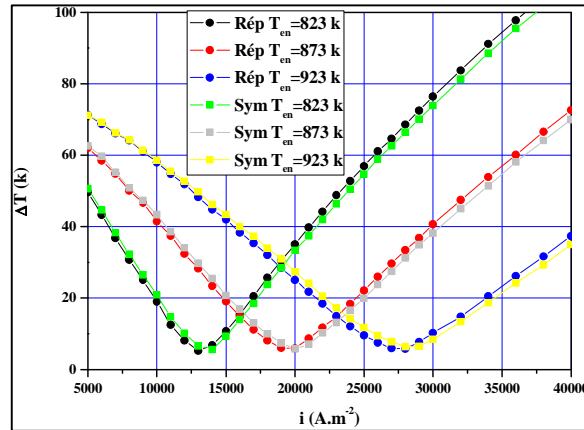


Fig.III.20. Evolution de l'écart maximal des températures dans la cellule SOFC selon la densité de courant.

III.2.3.3.Épaisseur de l'électrolyte

Pour chaque épaisseur d'électrolyte, les courbes ayant presque la même forme. **Figure.III.21.** Pour une épaisseur de 20 μm , l'abaissement des valeurs de la température est clairement visible, à l'entrée de la cellule, la valeur de la température reste constante presque d'un millimètre, ensuite, un effondrement parabolique des valeurs se produit sur le reste de la longueur de la cellule. L'écart des valeurs de la température de chaque point entre les deux types de piles (répétition ou symétrie des étages) reste constant dans le premier millimètre, ensuite il se développe proportionnellement avec la longueur. **Figure.III.21.a.**

Pour une épaisseur d'électrolyte de 40 μm , une légère élévation des valeurs de la température est obtenue, à l'entrée de la cellule la valeur de la température reste constante presque d'un millimètre, ensuite, une augmentation se fait hyperboliquement dans les sept premiers millimètres pour le cas de répétition de cellules et de neuf millimètres pour le cas de symétrie de cellules, ensuite un effondrement parabolique des valeurs se fait jusqu'à la fin de la cellule. L'écart des valeurs de la température de chaque point entre les deux types de piles (répétition ou symétrie des étages) reste constant dans le premier millimètre, ensuite il se développe proportionnellement avec la longueur. **Figure.III.21.b.**

Pour une épaisseur d'électrolyte de 60 μm , l'élévation des valeurs de la température est très apparente de l'entrée à la sortie de la pile, au début de la cellule, la valeur de la température reste constante presque d'un millimètre, ensuite, l'augmentation se fait hyperboliquement. L'écart des valeurs de la température de chaque point entre les deux types de piles (répétition

ou symétrie des étages) reste le même tout le long du premier millimètre, ensuite il se développe hyperboliquement du premier millimètre à la sortie de la cellule. **Figure.III.21.c.**

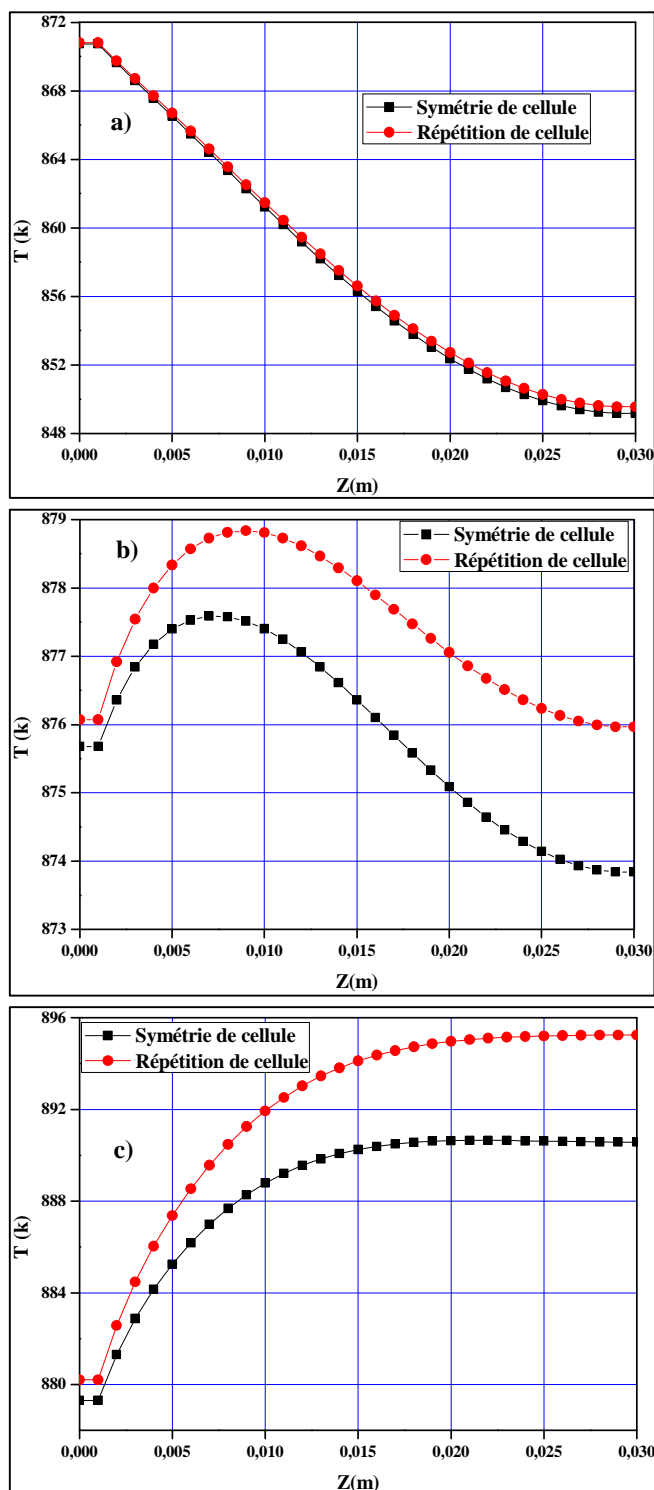


Fig.III.21. Evolution de la température du milieu de l'électrolyte suivant l'axe (OY) selon l'épaisseur de l'électrolyte. a) 20 μm , b) 40 μm et c) 60 μm .

L'évolution de l'écart maximal de la température dans la pile SOFC selon les différentes dimensions de l'épaisseur de l'électrolyte pour les deux configurations (répétition et symétrie de cellule) est présentée par la **Figure.III.22**.

Les six courbes présentées ayant presque la même forme. Au début de chaque courbe, l'écart maximal des valeurs de la température se décroît quasi-linéairement jusqu'à atteindre l'écart de température minimale, ensuite, il se croît quasi-linéairement. Ainsi, la différence entre les deux écarts se développe proportionnellement en fonction de l'épaisseur d'électrolyte quelle que soit la valeur de la température d'entrée des gaz. L'écart minimal de température est obtenu toujours dans le cas de répétition des étages de cellules. L'écart de température du cas de symétrie des étages de cellules est inférieur à celle de répétition des étages de cellules dans les cas de faible production et non productif de chaleur, par-contre il est supérieur à l'écart de température généré par la cellule de configuration de répétition des étages de cellules dans les cas productifs de chaleur. **Figure.III.22**.

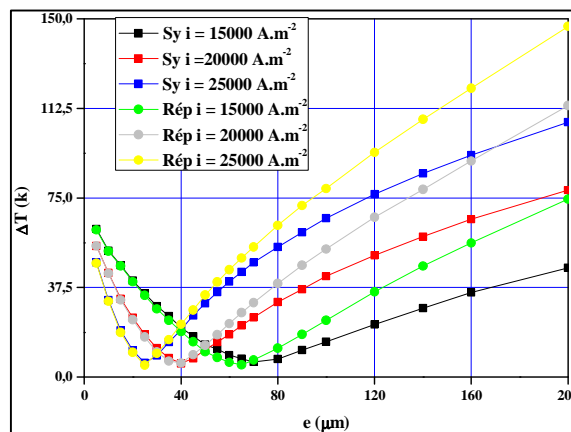


Fig.III.22. Evolution de l'écart maximal des températures dans la cellule SOFC selon l'épaisseur de l'électrolyte.

III.2.4. Influence de différents types de source de chaleur sur les champs 3D de la température

Dans cette partie, l'influence de chaque type de source de chaleur (sans source, ohmique, activation, concentration, électrochimique et totale) sur les valeurs maximales et leurs champs de température d'une pile à combustible SOFC planaire selon une symétrie des étages de cellules est présenté en fonction de la température d'alimentation des gaz, la densité de courant et l'épaisseur de l'électrolyte. Les dimensionnements des électrodes sont données par 500 μm pour l'anode [45], [79], [86], [108] et [109] et 50 μm pour la cathode [44], [45], [48], [85] et [93]. Les conductivités thermiques et électriques de l'anode, l'électrolyte et la cathode sont identiques à celles des matériaux standards (NiYSZ), (YSZ), (LSM) respectivement.

III.2.4.1. Température d'entrée des gaz

L'épaisseur de l'électrolyte utilisé dans cette partie est de 40 μm [45], [50], [110], [111] et [112] et la densité de courant imposée appliquée dans toutes les parties solides et poreuses de la cellule SOFC planaire est identique à vingt mille unités [15], [45] et [80]. Les champs de température de la pile selon les températures d'entrée des gaz de 773, 873 et 943 K sont présentés par les **Figures III.23, III.24 et III.25** pour chaque cas (sans source, source d'activation, source de concentration, source ohmique, source électrochimique et la source totale). Les champs de températures de la SOFC sont présentés sur les plans transversal et longitudinal et pour le volume de la cellule dans les **Figures III.23, III.24 et III.25** respectivement.

Les champs de température de la section transversale à la sortie de la cellule des cas sans source, sources de concentration et activation ont la même distribution et indiquent que la partie cathodique est plus chaude que la partie anodique, les plus grandes températures à la sortie de la cellule se localisent à l'extrémité inférieure de l'interconnecteur cathodique et les plus petites températures se trouvent dans les deux extrémités gauche et droit de l'anode. Contrairement, les champs de température de la section transversale à la sortie de la cellule des cas de sources ohmique, électrochimique et totale ont la même distribution et montrent que la partie cathodique est plus froide que la partie anodique, les plus faibles températures à la sortie de la cellule se localisent à l'extrémité inférieure de l'interconnecteur cathodique et les plus fortes températures se trouvent dans les deux extrémités gauche et droit de l'anode. **Figure III.23.**

Les champs de température de la section longitudinale et les champs volumiques de la cellule correspondent aux cas sans source, concentration, activation et électrochimique ont la même distribution et indiquent que l'entrée de la cellule est plus chaude que la sortie. Les plus grandes valeurs de température sont celles des gaz réactifs à l'entrée de la pile et que la quantité de chaleur produite par les sources de concentration, activation et électrochimique est inférieure à la quantité consommée par la résistance de la pile. Contrairement, les champs de température de la section longitudinale et les champs de volume de la cellule des cas de sources ohmique et totale ont presque la même distribution et montrent une évolution importante des valeurs de température sur le long de la cellule pour une température d'entrée des gaz 773 K. Une faible augmentation des températures de l'entrée à la sortie de la pile pour une température d'alimentation des gaz identique à 873 K et une chute des valeurs des températures entre l'amont et l'aval de la cellule pour une température d'alimentation des gaz réactifs similaire à 943 K. Donc, les quantités de chaleur produite par les sources ohmique et total sont inférieures

à celles consommée par la résistance thermique de la pile pour une température d'alimentation des gaz identique à 873 K et l'énergie thermique produite par ces deux sources est supérieure à celle consommée par la résistance thermique de la cellule pour les cas qui ont une température d'alimentation des gaz inférieur à 873 K. **Figures III.24 et III.25.**

L'augmentation de la température effectuée par la source de concentration par rapport au cas sans source est de (0,217, 0,011 et 0 K) pour les températures d'entrées des gaz (773, 873 et 943 K) respectivement. L'agrandissement de la température accomplie par la source d'activation est de (9,592, 4,507 et 1,964 K) pour les températures d'entrées des gaz (773, 873 et 943 K) respectivement. L'élévation de la température réalisée par la source ohmique est de (136,158, 74,584 et 40,703 K) pour les températures d'entrées des gaz (773, 873 et 943 K) respectivement. L'évolution de la température effectuée par la source électrochimique est de (28,685, 28,117 et 27,101 K) pour les températures d'entrées des gaz (773, 873 et 943 K) respectivement. L'augmentation de la température réalisée par la somme des quatre sources de chaleur est de (147,656, 90,039 et 63,989 K) pour les températures d'entrées des gaz (773, 873 et 943 K) respectivement. **Figure.III.23.**

Donc, les quatre sources de chaleur sont inversement proportionnelles à la température d'entrée des gaz, la plus importante augmentation de température est due à la source ohmique. La plus faible élévation de température est due à la source de concentration qui est négligeable devant les autres types de source et l'élévation des valeurs de température provoquée par la source électrochimique est plus grande de celle produite par la source d'activation quelle que soit la valeur de la température d'entrée des gaz. La distribution des températures de la SOFC planaire du cas de la source totale est presque similaire à seul du cas de source ohmique quelle que soit la valeur de température d'entrée des gaz. **Figures III.23, III.24 et III.25.**

III.2.4.2.Densité de courant

L'influence de chaque type de source de chaleur (sans source, ohmique, activation, concentration, électrochimique et totale) sur les valeurs maximales et les champs de température de la SOFC planaire en fonction de la densité de courant est présentée dans cette partie. L'épaisseur de l'électrolyte utilisé est de 40 μm [45], [50], [110], [111] et [112] et la température d'entrée des deux gaz réactifs est similaire à 873 K [80]. Les champs de température de la pile sont présentés pour les trois densités de courant utilisées (15 000, 18 000 et 21 000 A/m^2). Les champs de températures de la cellule SOFC sont présentés sur les plans transversal et longitudinal et le volume de la cellule dans les **Figures III.26, III.27 et III.28** respectivement.

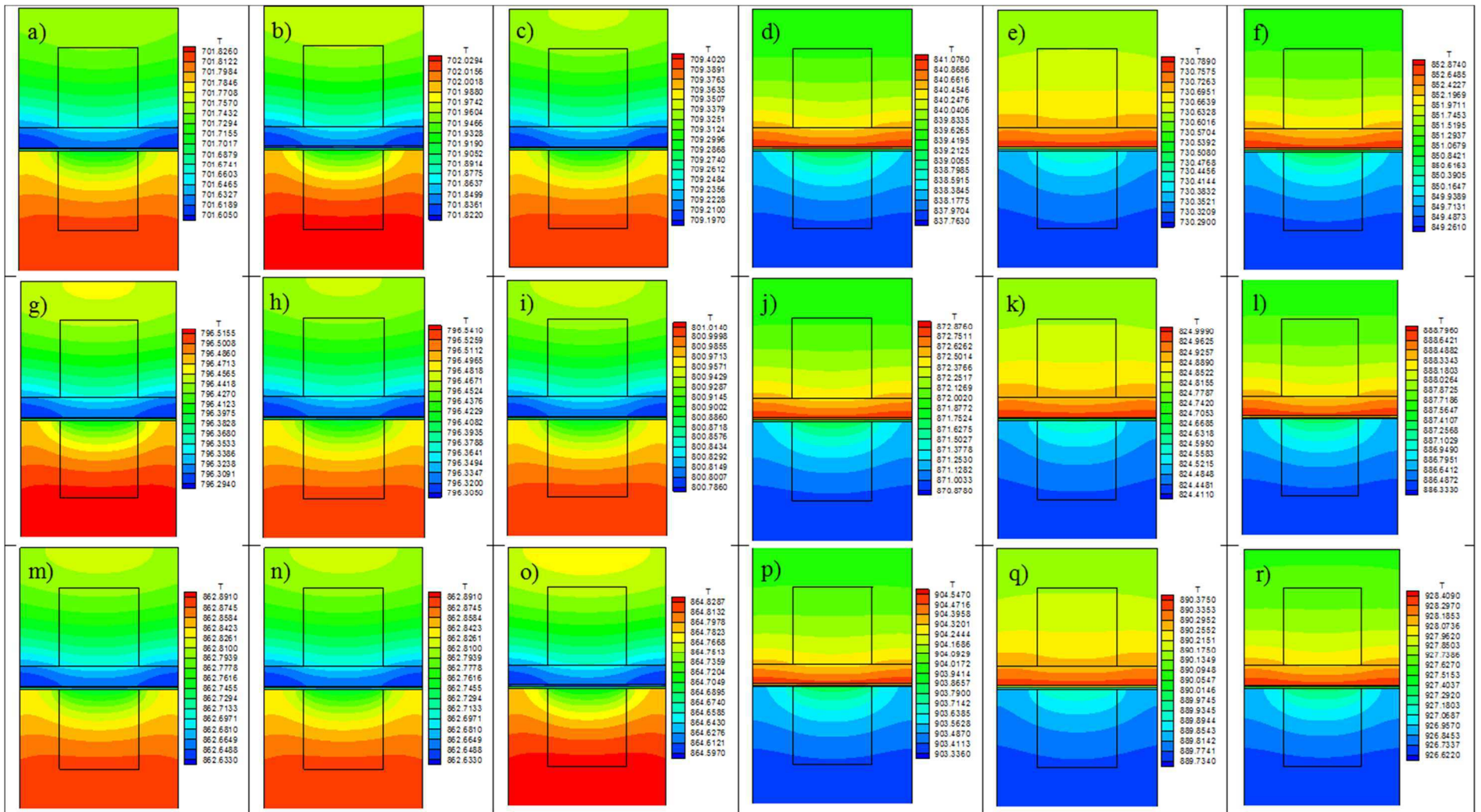


Fig.23. Champs de température de la section transversale à la sortie de la SOFC en présence des différents types de sources de chaleur. a) , g) et m) sans source de chaleur, b), h) et n) source de concentration, c), i) et o) source d'activation, d), j) et p) source ohmique, e), k) et q) source électrochimique, f), l) et r) source totale. A-f) $T=773$ K, g-l) $T=873$ K, m-r) $T=943$ K.

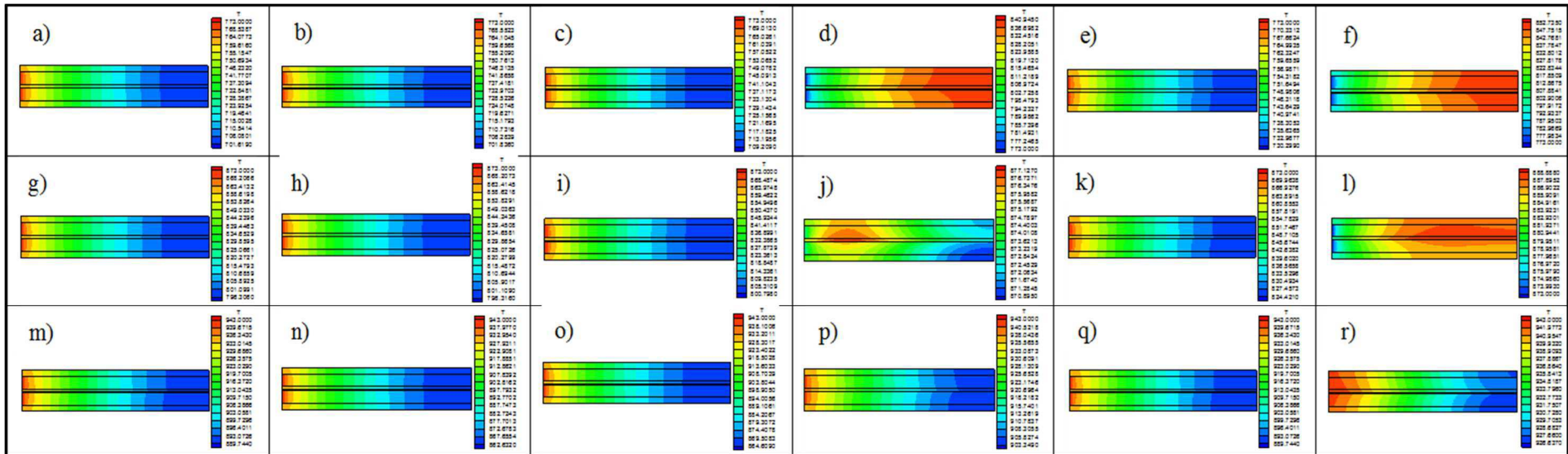


Fig.24. Champs de température de la section longitudinale au milieu de la SOFC en présence des différents types de sources de chaleur. a) , g) et m) sans source de chaleur, b), h) et n) source de concentration, c), i) et o) source d'activation, d), j) et p) source ohmique, e), k) et q) source électrochimique, f), l) et r) source totale. A-f) $T=773$ K, g-l) $T=873$ K, m-r) $T=943$ K.

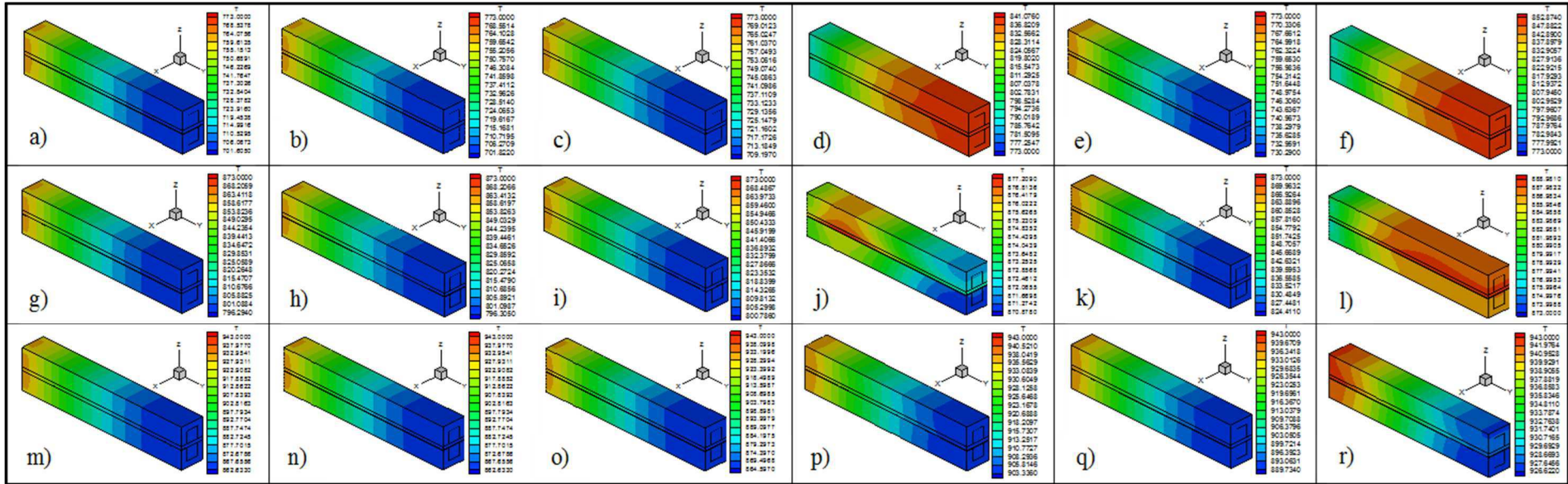


Fig.25. Champs de température volumique de la cellule SOFC en présence des différents types de sources de chaleur. a) , g) et m) sans source de chaleur, b), h) et n) source de concentration, c), i) et o) source d'activation, d), j) et p) source ohmique, e), k) et q) source électrochimique, f), l) et r) source totale. A-f) T=773 K, g-l) T=873 K, m-r) T=943 K.

Les champs de température de la section transversale de la sortie de la cellule des cas sans source, concentration et activation ont la même distribution et indiquent que la partie cathodique est plus chaude que la partie anodique, les plus grandes températures à la sortie de la cellule se localisent à l'extrémité inférieure de l'interconnecteur cathodique et les plus petites températures se trouvent dans les deux extrémités gauche et droit de l'anode. Contrairement, les champs de température de la section transversale à la sortie de la cellule des cas de sources ohmique, électrochimique et totale ont la même distribution et montrent que la partie cathodique est plus froide que la partie anodique, les plus faibles températures à la sortie de la cellule se localisent à l'extrémité inférieure de l'interconnecteur cathodique et les plus fortes températures se trouvent dans les deux extrémités gauche et droit de l'anode. **Figure III.26.**

Les champs de température de la section longitudinale et les champs volumiques de la cellule des cas sans source, concentration, activation et électrochimique ont la même distribution et montrent que les valeurs de température à l'entrée de la cellule sont plus grandes de celles de la sortie de la pile, les plus grandes températures sont celles des gaz à l'entrée de la pile et que la quantité de chaleur produite par les sources de concentration, activation et électrochimique sont inférieure à celle consommée par la résistance thermique de la pile. Contrairement, les champs de température de la section longitudinale et les champs de volume de la cellule des cas de sources ohmique et totale ont presque la même distribution et montrent une évolution des valeurs de température de l'entrée à la sortie de la cellule pour une densité de courant de 21 000 A/m². Une chute des valeurs des températures pour une densité de courant similaire à 15 000 A/m² et une augmentation des valeurs de température dans le cas de la source totale pour une densité de courant de 18 000 A/m², inversement au cas de la source ohmique qui présente une diminution des valeurs de température pour la même densité de courant. **Figures III.27 et III.28.**

Donc, la quantité de chaleur produite par la source ohmique est inférieure à celle consommée par la résistance thermique de la pile pour les densités de courant inférieures ou égale à 18 000 A/m² et l'énergie thermique produite par cette source est supérieure à celle consommée par la résistance thermique de la cellule pour le cas d'une densité de courant de 21 000 A/m². La chaleur produite par la source totale est inférieure à celle consommée par la résistance thermique de la cellule pour une densité de courant de 15 000 A/m² et elle est supérieure à celle consommée par la résistance thermique pour les cas qui ont une densité de courant supérieure à 18 000 A/m². **Figures III.27 et III.28.**

L'augmentation de la température effectuée par la source de concentration par-rapport au cas sans source est de (0, 0,001, 003 et 0,009 K) pour les densités de courant (15000, 18000

et 21000 A/m²) respectivement. L'agrandissement des températures effectué par la source d'activation est de (4,489, 4,562 et 4,648 K) pour les densités de courant (15000, 18000 et 21000 A/m²) respectivement. L'élévation de la température effectuée par la source ohmique est de (53,091, 66,151 et 78,372 K) pour les densités de courant (15000, 18000 et 21000 A/m²) respectivement. L'évolution de la température effectuée par la source électrochimique est de (22.417, 25.303 et 29.188 K) pour les densités de courant (15000, 18000 et 21000 A/m²) respectivement. L'augmentation de la température effectuée par la somme des quatre sources de chaleur est de (67,077, 81,336 et 94,516 K) pour les densités de courant (15000, 18000 et 21000 A/m²) respectivement. **Figure III.26.**

Donc, les quatre sources de chaleur (concentration, activation, ohmique et électrochimique) sont proportionnelles à la densité de courant, la plus importante augmentation de température est due à la source ohmique, la plus faible augmentation de température est due à la source de concentration qui est négligeable devant les autres types de source et l'élévation des valeurs de température provoquée par la source électrochimique est plus grande de celle produite par la source d'activation quelle que soit la valeur de la densité de courant. La distribution et les valeurs de la température de la cellule SOFC du cas sans source sont les mêmes quelle que soit la valeur de la densité de courant. **Figures III.26, III.27 et III.28.**

III.2.4.3. Épaisseur de l'électrolyte

L'influence de chaque type de source de chaleur (sans source, ohmique, activation, concentration, électrochimique et totale) sur les valeurs maximales et les champs de température de la SOFC planaire en fonction de l'épaisseur de l'électrolyte est présentée dans cette partie. La température des deux gaz réactifs à l'entrée de la cellule est similaire à 873 K [80] et la densité de courant imposée appliquée dans toutes les parties solides et poreuses de la cellule SOFC planaire est identique à vingt mille unités [15], [45] et [80]. Les champs de température de la SOFC sont exposés sur les plans transversal et longitudinal et pour le volume de la cellule selon les épaisseurs de l'électrolyte de (20, 40 et 60 μm) sont présentés par les **Figures III.29, III.30 et III.31** respectivement pour chaque cas (sans source, source d'activation, source de concentration, source ohmique, source électrochimique et la source totale).

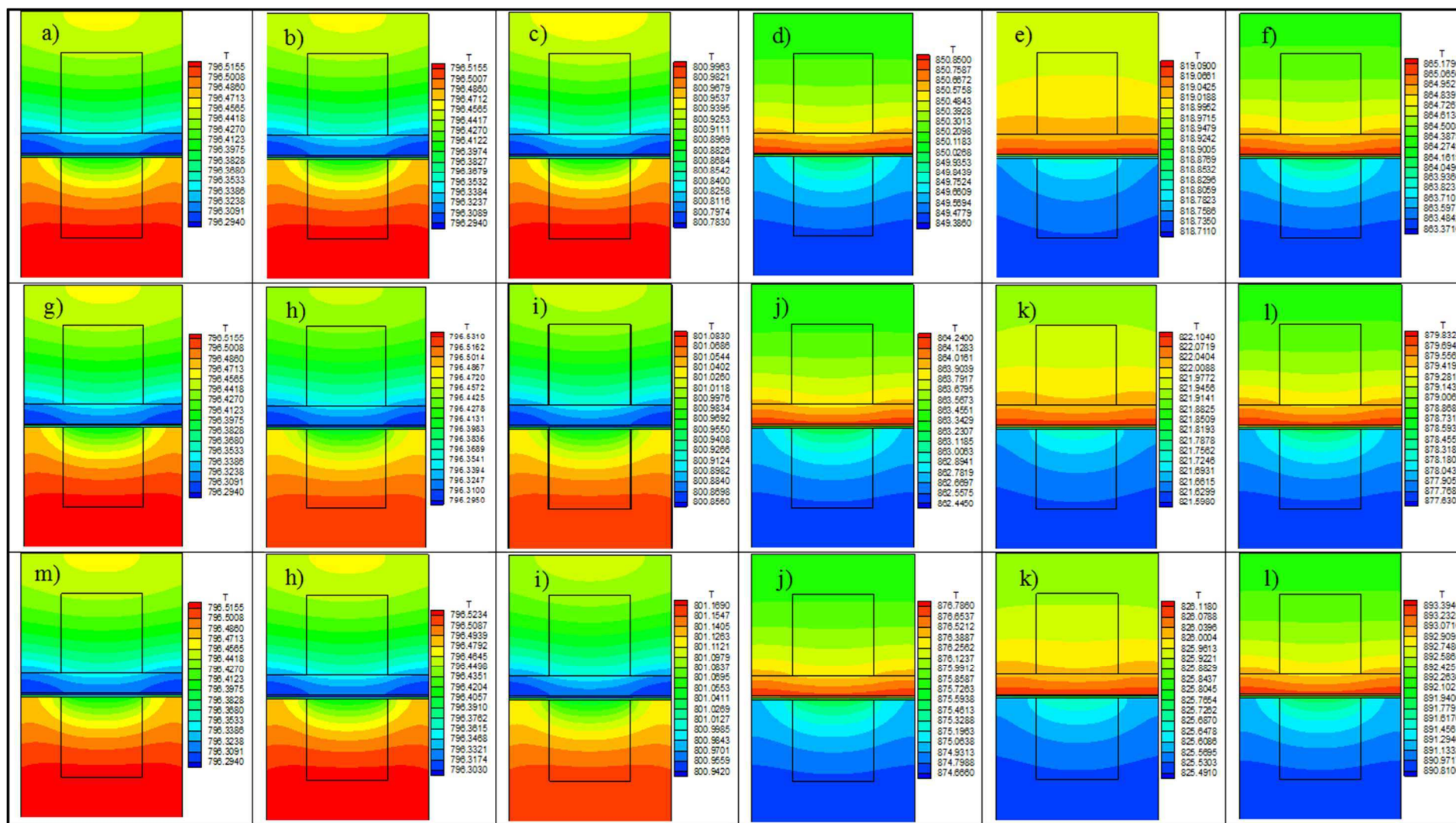


Fig.26. Champs de température de la section transversale à la sortie de la SOFC en présence des différents types de sources de chaleur. a) , g) et m) sans source de chaleur, b), h) et n) source de concentration, c), i) et o) source d'activation, d), j) et p) source ohmique, e), k) et q) source électrochimique, f), l) et r) source totale. A-f) $i=15000 \text{ A/m}^2$, g-l) $i=18000 \text{ A/m}^2$, m-r) $i=21000 \text{ A/m}^2$.

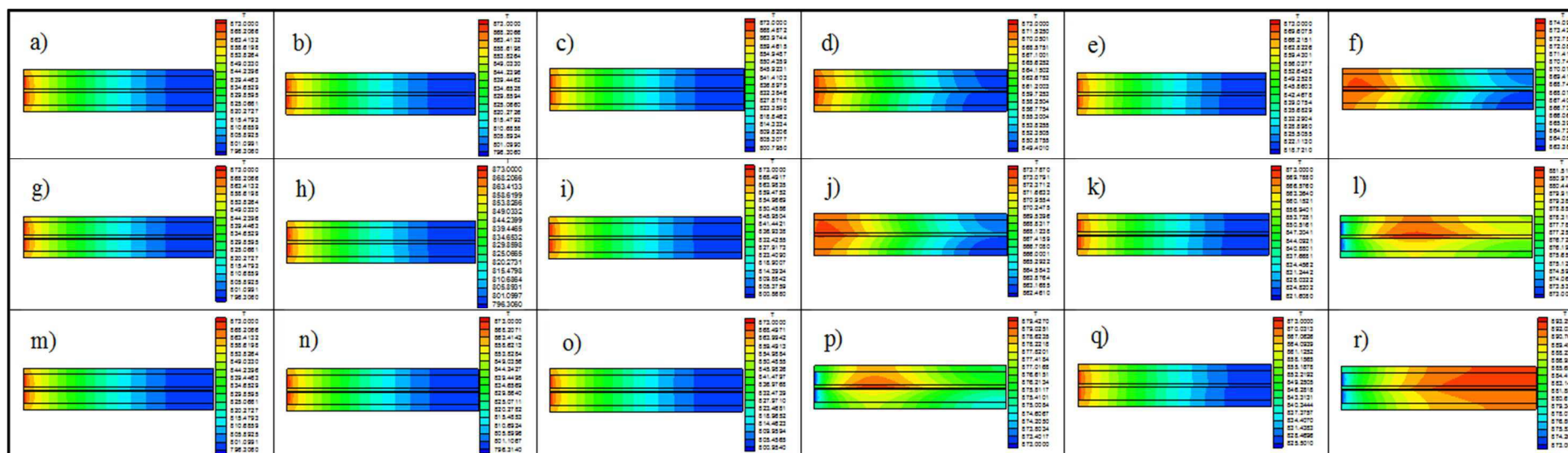


Fig.27. Champs de température de la section longitudinale au milieu de la SOFC en présence des différents types de sources de chaleur. a) , g) et m) sans source de chaleur, b), h) et n) source de concentration, c), i) et o) source d'activation, d), j) et p) source ohmique, e), k) et q) source électrochimique, f), l) et r) source totale. A-f) $i=15000 \text{ A/m}^2$, g-l) $i=18000 \text{ A/m}^2$, m-r) $i=21000 \text{ A/m}^2$.

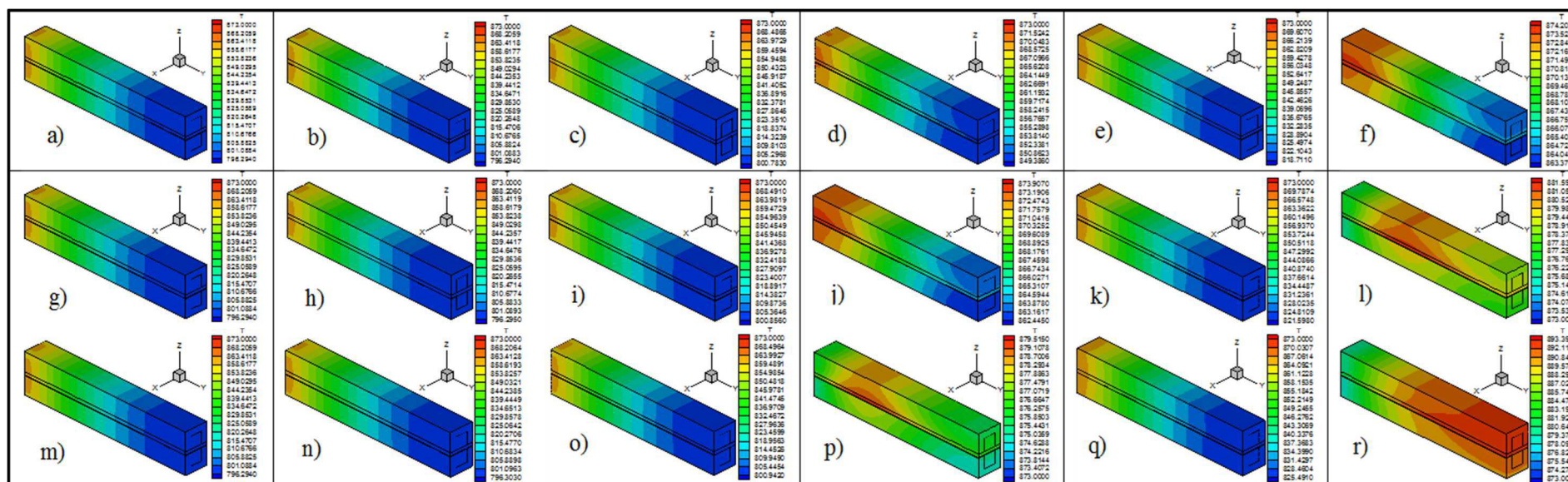


Fig.28. Champs de température volumique de la cellule SOFC en présence des différents types de sources de chaleur. a) , g) et m) sans source de chaleur, b), h) et n) source de concentration, c), i) et o) source d'activation, d), j) et p) source ohmique, e), k) et q) source électrochimique, f), l) et r) source totale. A-f) $i=15000 \text{ A/m}^2$, g-l) $i=18000 \text{ A/m}^2$, m-r) $i=21000 \text{ A/m}^2$.

Les champs de température de la section transversale à la sortie de la cellule pour les cas sans source, concentration et activation ont la même distribution et indiquent que la partie cathodique est plus chaude que la partie anodique, les plus grandes températures à la sortie de la cellule se localisent à l'extrémité inférieure de l'interconnecteur cathodique et les plus petites températures se localisent dans les deux extrémités gauche et droit de l'anode. Contrairement, les champs de température de la section transversale à la sortie de la cellule des cas de sources ohmique, électrochimique et totale ont la même distribution et montrent que la partie cathodique est plus froide que la partie anodique, les plus faibles températures à la sortie de la cellule se localisent à l'extrémité inférieure de l'interconnecteur cathodique et les plus fortes températures se trouvent dans les deux extrémités gauche et droit de l'anode. **Figure III.29.**

Les champs de température de la section longitudinale et les champs volumiques de la cellule des cas sans source, concentration, activation et électrochimique ont la même distribution et indiquent que l'entrée de la cellule est plus chaude que la sortie, les plus grandes températures sont celles des gaz à l'entrée de la pile et les quantités de chaleur produites par les sources de concentration, activation et électrochimique sont inférieures à celles consommées par la résistance de la pile. Contrairement, les champs de température de la section longitudinale et les champs de volume de la cellule des cas de sources ohmique et totale ont presque la même distribution et montrent une évolution importante des valeurs de température de l'entrée à la sortie de la cellule pour une épaisseur d'électrolyte de 60 μm . Une chute des valeurs de température de l'amont à l'aval de la SOFC pour une épaisseur d'électrolyte similaire à 20 μm et une augmentation des valeurs de température dans le cas de la source totale pour une épaisseur d'électrolyte de 40 μm , inversement au cas de la source ohmique qui présente une diminution des valeurs de température pour la même épaisseur d'électrolyte. Donc, les quantités de chaleur produite par les sources ohmique et totale sont inférieures à celle consommée par la résistance thermique de la pile pour une épaisseur d'électrolyte identique à 20 μm et l'énergie thermique produite par ces deux sources est supérieure à celle consommée par la résistance thermique de la cellule pour une épaisseur d'électrolyte de 60 μm . **Figures III.29, III.30 et III.31.**

L'augmentation de la température effectuée par la source de concentration par-rapport au cas sans source est de (0,001, 0,011 et 0,016 K) pour les épaisseurs d'électrolyte (20, 40 et 60 μm) respectivement. L'augmentation de la température effectuée par la source d'activation est de (4,071, 4,492 et 5,234 K) pour les épaisseurs d'électrolyte (20, 40 et 60 μm) respectivement. L'élévation de la température effectuée par la source ohmique est de (48,231, 74,584 et 89,503 K) pour les épaisseurs d'électrolyte (20, 40 et 60 μm) respectivement.

L'évolution de la température effectuée par la source électrochimique est de (16,932, 28,117 et 36,287 K) pour les épaisseurs d'électrolyte (20, 40 et 60 μm) respectivement. L'augmentation de la température effectuée par la somme des quatre sources de chaleur par-rapport au cas sans source est de (60,478, 90,039 et 110,926 K) pour les épaisseurs d'électrolyte (20, 40 et 60 μm) respectivement. **Figure III.29.**

Donc, les quatre sources de chaleur (concentration, activation, ohmique et électrochimique) sont proportionnelles à la température d'entrée des gaz, la plus importante augmentation de température est due à la source ohmique. La plus faible augmentation de température est due à la source de concentration qui est négligeable devant les autres types de source et l'élévation des valeurs de température provoquée par la source électrochimique est plus grande de celle produite par la source d'activation quelle que soit l'épaisseur de l'électrolyte. Les valeurs de la température à la sortie de la cellule SOFC de la totalité des cas (sans source, source concentration, source activation, source ohmique et source électrochimique) sont proportionnelles à l'épaisseur de l'électrolyte, cela est dû à la diminution de la résistance thermique moyenne de la SOFC. **Figures III.29, III.30 et III.31.**

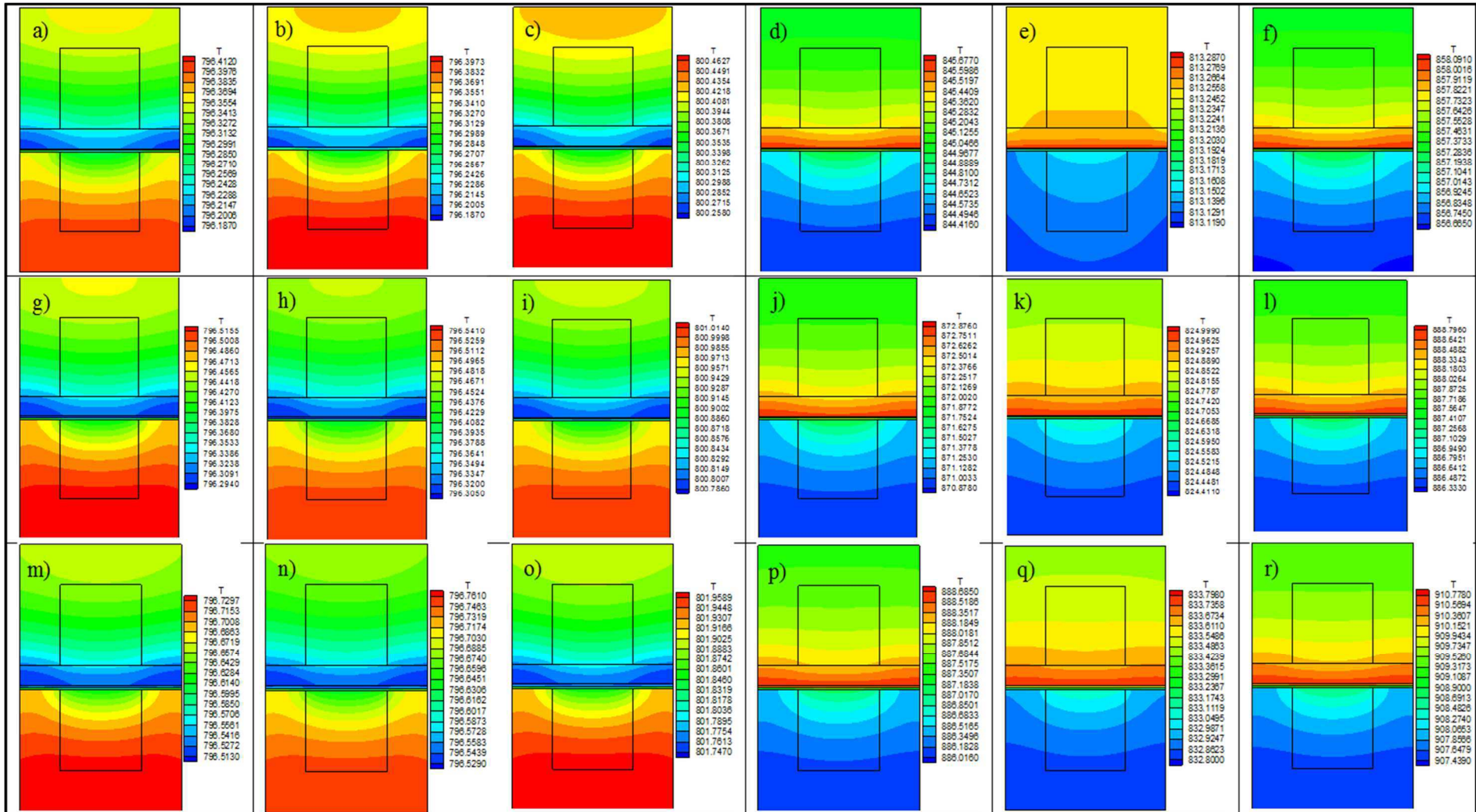


Fig.29. Champs de température de la section transversale à la sortie de la SOFC en présence des différents types de sources de chaleur. a) , g) et m) sans source de chaleur, b), h) et n) source de concentration, c), i) et o) source d'activation, d), j) et p) source ohmique, e), k) et q) source électrochimique, f), l) et r) source totale. A-f) $e_{elec}=20 \mu m$, g-l) $e_{elec}=40 \mu m$, m-r) $e_{elec}=60 \mu m$.

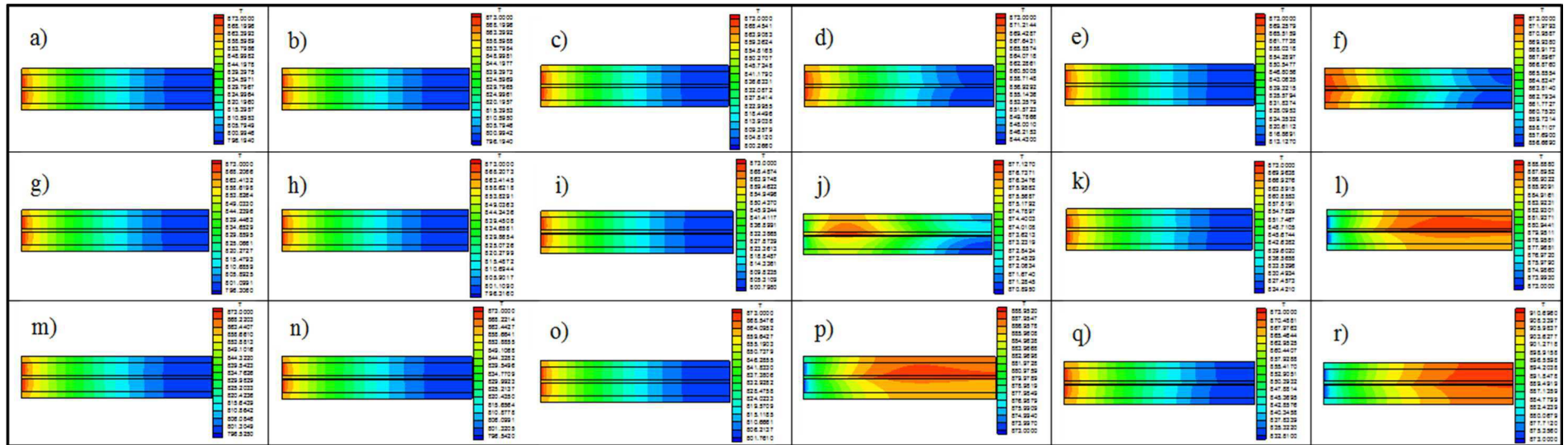


Fig.30. Champs de température de la section longitudinale au milieu de la SOFC en présence des différents types de sources de chaleur. a) , g) et m) sans source de chaleur, b), h) et n) source de concentration, c), i) et o) source d'activation, d), j) et p) source ohmique, e), k) et q) source électrochimique, f), l) et r) source totale. A-f) $e_{elec}=20 \mu m$, g-l) $e_{elec}=40 \mu m$, m-r) $e_{elec}=60 \mu m$.

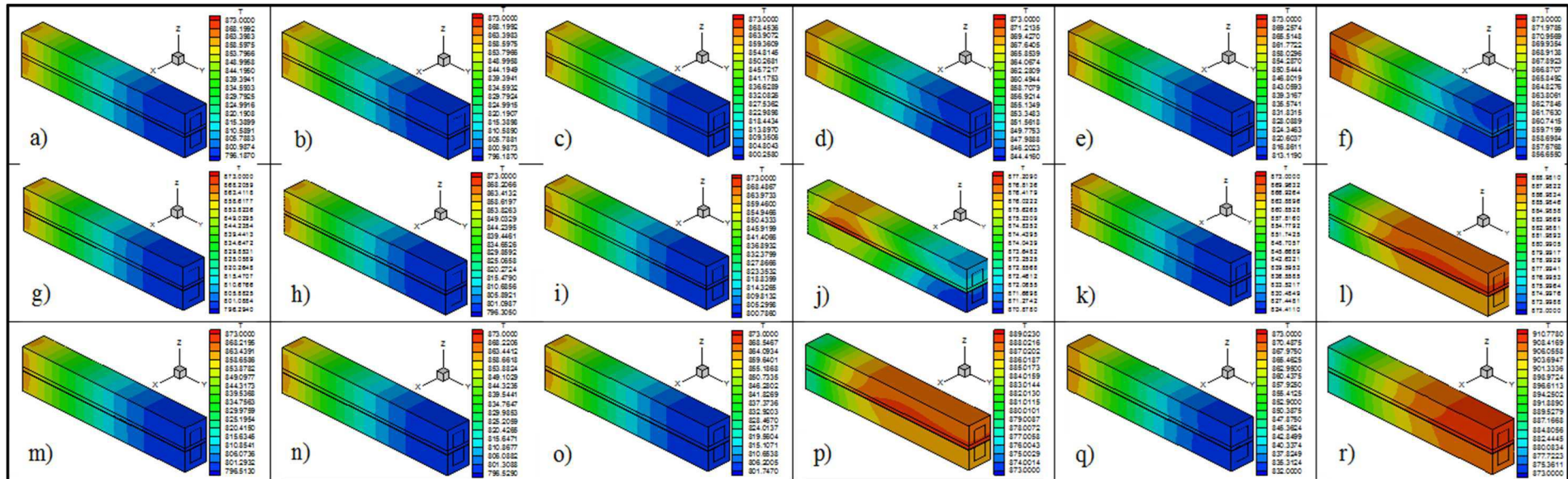


Fig.31. Champs de température volumique de la cellule SOFC en présence des différents types de sources de chaleur. a) , g) et m) sans source de chaleur, b), h) et n) source de concentration, c), i) et o) source d'activation, d), j) et p) source ohmique, e), k) et q) source électrochimique, f), l) et r) source totale. A-f) $e_{elec}=20 \mu m$, g-l) $e_{elec}=40 \mu m$, m-r) $e_{elec}=60 \mu m$.

Conclusion générale

Notre travail dont le thème ;"**Contribution à l'étude numérique tridimensionnelle des phénomènes de transfert de chaleur dans la pile à combustible SOFC plane**", a pour objet d'étudier le comportement thermodynamique et thermique des piles à combustible SOFC. En premier lieu, notre objectif est d'étudier tout impact thermodynamique et de savoir tout comportement thermodynamique de ces piles. En deuxième lieu, notre but est d'étudier le phénomène de transfert thermique, évaluer et localiser les températures maximale et minimale dans une cellule élémentaire d'une pile à combustible du type SOFC par un modèle tridimensionnel et stationnaire qui comptabilise la production de chaleur due aux pertes ohmique et d'activation des réactions chimiques.

Les résultats obtenus par le modèle thermodynamique sont discutés à travers sept parties. La première partie expose l'impact de chaque surtension (ohmique, activation et concentration) sur le potentiel réel et la densité de courant de la pile à combustible SOFC. Dans la deuxième partie, l'influence de la température de fonctionnement de la pile sur le potentiel réel et la densité de courant est analysée. La troisième partie illustre l'effet de la pression de fonctionnement de la pile sur le potentiel réel et la densité de courant. Dans la quatrième partie, l'impact des concentrations de l'eau dans le comburant et de l'oxygène dans le carburant sur le potentiel réel et la densité de courant de la pile est présenté. Dans les trois dernières parties (cinquième, sixième et septième), l'effet de l'épaisseur de chaque élément du cœur de la pile (électrolyte, anode et cathode) sur le potentiel réel et la densité de courant est analysé.

Les résultats obtenus par le modèle thermique tridimensionnel sont discutés selon quatre cas. En premier lieu, on montre l'effet de la température d'entrée des gaz réactifs sur la répartition et les valeurs maximales et minimales de la température pour les deux types de configurations géométriques (répétition ou symétrie des étages de cellules). Pour chacun de ces deux types de configuration géométrique, l'analyse des champs se fait selon deux cas ; pour le premier cas, les valeurs des températures des gaz (hydrogène et air) sont les mêmes à l'entrée des deux canaux de la cellule, pour le second cas, ces valeurs sont différentes.

En deuxième lieu, on présente une analyse de l'influence de la densité du courant sur la répartition et les valeurs extrêmes de la température selon deux types de configurations géométriques (répétition ou symétrie des étages de cellules). En troisième lieu, la distribution et les valeurs maximales de la température résultante sont présentées en fonction de l'épaisseur d'électrolyte selon deux types de configurations géométriques (répétition ou symétrie des étages de cellules). Enfin, on démontre l'impact de chaque type de source de

chaleur (ohmique, activation, concentration et électrochimique) sur la distribution et les valeurs extrêmes de température.

Les principaux résultats obtenus selon l'étude thermodynamique (0D) sont:

- La densité de puissance de la pile est proportionnelle à la température de fonctionnement.
- La densité de puissance de la pile est inversement proportionnelle à l'humidification du fuel.
- La densité de puissance de la pile est proportionnelle à la concentration de l'oxygène dans le comburant.
- La densité de puissance de la pile est inversement proportionnelle à l'épaisseur de l'électrolyte.
- La densité de puissance de la pile est inversement de l'épaisseur de l'anode.
- La densité de puissance de la pile est inversement de l'épaisseur de la cathode.

Les principaux résultats obtenus selon l'étude thermique (3D) sont :

- Les valeurs maximales de la température sont localisées dans la partie supérieure de l'électrolyte aux ailes de la cellule dans tous les cas productifs de chaleur, ce qui signifie que cette zone reçoit une contrainte thermique plus grande par-rapport aux autres zones de la cellule.
- L'écart maximal de température enregistré sur les trois axes est celui de l'axe OZ.
- La partie supérieure de la pile (interconnecteur partie anodique, anode et la partie supérieure de l'électrolyte) est plus chaude que la partie inférieure de la cellule (interconnecteur partie cathodique, cathode et la partie inférieure de l'électrolyte) dans tous les cas étudiés.
- Les valeurs de température obtenues dans le cas d'une SOFC ayant une répétition des étages de cellules sont supérieures à celles obtenues par la pile composée d'une symétrie des étages de cellules dans tous les cas productifs et non productifs de chaleur.
- L'écart minimal de température dans la cellule est presque le même dans tous les cas étudiés, il est d'environ de 5 K.
- Les résultats obtenus pour les cas qui considèrent la production de chaleur par les sources ohmique, électrochimique et totale montrent que les hautes températures sont localisées dans les emplacements de l'électrolyte les plus loin

des canaux qui avoisinent la cathode à la sortie de la cellule et les basses températures se positionnent à l'entrée des deux canaux anodique et cathodique.

- Les basses températures sont localisées à la sortie de la cellule dans les endroits de l'électrolyte les plus loin des canaux qui avoisinent la cathode et les hautes températures se positionnent à l'entrée des deux canaux de la SOFC pour les cas qui considèrent la production de chaleur par les sources de concentration, d'activation et électrochimique.
- La plus grande production de chaleur est celle produite par la source Ohmique.
- La plus petite production de chaleur est celle produite par la source de concentration qui est vraiment négligeable par-rapport aux autres sources.
- La chaleur produite par la source électrochimique est plus grande que celle produite par la source d'activation.

D'après l'analyse des résultats obtenus, il est apparu que les deux modèles étudiés (0D et 3D) ont permis de comprendre les effets des différents paramètres sur les performances de la SOFC pour le modèle 0D, et l'impact de chaque type de source de chaleur sur la distribution et l'élévation des températures pour le modèle 3D.

Sur la base des études thermodynamique et thermique effectuées, la meilleure densité de puissance de la SOFC est obtenue par la plus haute température et la plus grande concentration d'oxygène dans le comburant, les plus minces composants (électrolyte, anode et cathode) et la plus faible humidification du fuel pour une configuration de symétrie des étages de cellules.

REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES

- [1] Jaroslaw Milewski, Giulio Guandalini, Stefano Campanari. Modeling an alkaline electrolysis cell through reduced-order and lossestimate Approaches. *Journal of Power Sources* 269 (2014) 203-211.
- [2] M. Hammoudi, C. Henao, K. Agbossou, Y. Dube', M.L. Doumbia. New multi-physics approach for modelling and design of alkaline electrolyzers, *International Journal of Hydrogen Energy* 37 (2012) 13895-13913.
- [3] Dustin McLarty, Jack Brouwer. Poly-generating closed cathode fuel cell with carbon capture. *Applied Energy* 131 (2014) 108-116.
- [4] Mu Li, Jacob Brouwer, Ashok D. Rao, G. Scott Samuelsen. Application of a detailed dimensional solid oxide fuel cell model in integrated gasification fuel cell system design and analysis. *Journal of Power Sources* 196 (2011) 5903-5912.
- [5] Lingjun Tan, Chen Yang, Nana Zhou. Synthesis/design optimization of SOFC-PEM hybrid system under uncertainty. *Chinese Journal of Chemical Engineering* 23 (2015) 128-137.
- [6] Bong Hwan Choi, Hyung Jin Sung. Effect of a shielded slot on a planar solid oxide fuel cell. *International Journal of Hydrogen Energy* 39 (2014) 12913-12923.
- [7] Sung Ho Park, Young Duk Lee, Kook Young Ahn. Performance analysis of an SOFC/HCCI engine hybrid system: System simulation and thermoeconomic comparison. *International Journal of Hydrogen Energy* 39 (2014) 1799-1810.
- [8] Yan Ji, Kun Yuan, J.N. Chunga, Yen-Cho Chen. Effects of transport scale on heat/mass transfer and performance optimization for solid oxide fuel cells. *Journal of Power Sources* 161 (2006) 380-391.
- [9] Yutong Qi, Biao Huang., Karl T. Chuang. Dynamic modeling of solid oxide fuel cell: The effect of diffusion and inherent impedance. *Journal of Power Sources* 150 (2005) 32-47.
- [10] Ying-Wei Kang, Jun Li, Guang-Yi Cao, Heng-Yong Tu, Jian Li, Jie Yang. Dynamic temperature modeling of an SOFC using least squares support vector machines. *Journal of Power Sources* 179 (2008) 683-692.
- [11] Ping Yuan, Syu-Fang Liu. Numerical analysis of temperature and current density distribution of a planar solid oxide fuel cell unit with nonuniform inlet flow. *Numerical Heat Transfer, Part A* 51 (2007) 941-957.

- [12] H. Mounir, A. El Gharad, M. Belaiche, M. Boukalouch. Thermo-fluid and electrochemical modeling of a multi-bundle IP-SOFC Technology for second generation hybrid application. *Energy Conversion and Management* 50 (2009) 2685-2692.
- [13] Shuangqiao Yang, Tao Chen, Ying Wang, Zhenbo Peng, Wei Guo Wang. Electrochemical Analysis of an Anode-Supported SOFC. *International Journal Electrochemical Science* 8 (2013) 2330-2344.
- [14] Keegan C. Wincewicz, Joyce S. Cooper. Taxonomies of SOFC material and manufacturing alternatives. *Journal of Power Sources* 140 (2005) 280-296.
- [15] Meng Ni, Michael K.H. Leung, Dennis Y.C. Leung, Parametr. Parametric study of solid oxide fuel cell performance. *Energy Conversion and Management* 48 (2007) 1525-1535.
- [16] Yaneeporn Patcharavorachot, Amornchai Arpornwichanop, Anon Chuachuensuk. Electrochemical study of a planar solid oxide fuel cell: Role of support structures. *Journal of Power Sources* 177 (2008) 254-261.
- [17] Dang Saebea, Suthida Authayanun, Yaneeporn Patcharavorachot, Woranee Paengjuntuek, Amornchai Arpornwichanop. Use of different renewable fuels in a steam reformer integrated into a solid oxide fuel cell: Theoretical analysis and performance comparison. *Energy* 51 (2013) 305-313.
- [18] Dang Saebea, Yaneeporn Patcharavorachot, Suttichai Assabumrungrat, Amornchai Arpornwichanop. Analysis of a pressurized solid oxide fuel cell-gas turbine hybrid power system with cathode gas recirculation. *International Journal of Hydrogen Energy* 38 (2013) 4748-4759.
- [19] AKM M. Murshed, Biao Huang, K. Nandakumar. Control relevant modeling of planer solid oxide fuel cell system. *Journal of Power Sources* 163 (2007) 830-845.
- [20] D. Sànchez, R. Chacartegui, A. Munoz, T. Sànchez. Thermal and electrochemical model of internal reforming solid oxide fuel cells with tubular geometry. *Journal of Power Sources* 160 (2006) 1074-1087.
- [21] Pavan Kumar Naraharisetti, S. Lakshminarayanan, I.A. Karimi. Design of biomass and natural gas based IGFC using multi-objective optimization. *Energy* 73 (2014) 635-652.
- [22] Meng Ni. An electrochemical model for syngas production by co-electrolysis of H₂O and CO₂. *Journal of Power Sources* 202 (2012) 209-216.

- [23] Yaneeporn Patcharavorachot, N.P. Brandon, Woranee Paengjuntuek, Suttichai Assabumrungrat, Amornchai Arpornwichanop. Analysis of planar solid oxide fuel cells based on proton-conducting electrolyte. *Solid State Ionics* 181 (2010) 1568-1576.
- [24] Amornchai Arpornwichanop, Yaneeporn Patcharavorachot, Suttichai Assabumrungrat. Analysis of a proton-conducting SOFC with direct internal reforming. *Chemical Engineering Science* 65 (2010) 581-589.
- [25] M. Saidi, F. Siavashi, M.R. Rahimpour. Application of solid oxide fuel cell for flare gas recovery as a new approach; a case study for Asalouyeh gas processing plant, Iran. *Journal of Natural Gas Science and Engineering* 17 (2014) 13-25.
- [26] Martin Andersson, Hironori Nakajima, Tatsumi Kitahara, Akira Shimizu, Takahiro Koshiyama, Hedvig Paradis, Jinliang Yuan, Bengt 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* 77 (2014) 1008-1022.
- [27] Keqing Zheng, Li Li, Meng Ni. Investigation of the electrochemical active thickness of solid oxide fuel cell anode. *International Journal of Hydrogen Energy* 39 (2014) 12904-12912.
- [28] R.K. Akikur, R. Saidur, H.W. Ping, K.R. Ullah. Performance analysis of a co-generation system using solar energy and SOFC technology. *Energy Conversion and Management* 79 (2014) 415-430.
- [29] Supawat Vivanpatarakij, Farid Aiouache, Suttichai Assabumrungrat. Performance of an improved combination unit of Pd-membrane methane steam reformer and intermediate temperature solid oxide fuel cell (C-Pd-ITSOFC). *International Journal of Hydrogen Energy* 40 (2015) 1894-1901.
- [30] M. Minutillo, A. Perna, E. Jannelli. SOFC and MCFC system level modeling for hybrid plants performance prediction. *International Journal of Hydrogen Energy* 39 (2014) 21688-21699.
- [31] Eduardo Hernández-Pacheco, Devinder Singh, Phillip N. Hutton, Nikhil Patel, Michael D. Mann. A macro-level model for determining the performance characteristics of solid oxide fuel cells. *Journal of Power Sources* 138 (2004) 174-186.
- [32] Sadik Kakaç, Anchasa Pramuanjaroenkijb, Xiang Yang Zhou. A review of numerical modeling of solid oxide fuel cells. *International Journal of Hydrogen Energy* 32 (2007) 761-786.

- [33] Thameur Aloui, Kamel Halouani. Analytical modeling of polarizations in a solid oxide fuel cell using biomass syngas product as fuel. *Applied Thermal Engineering* 27 (2007) 731-737.
- [34] Sossina M. Haile. Fuel cell materials and components. *Acta Materialia* 51 (2003) 5981-6000.
- [35] A.C. Burt, I.B. Celik, R.S. Gemmen, A.V. Smirnov. A numerical study of cell-to-cell variations in a SOFC stack. *Journal of Power Sources* 126 (2004) 76-87.
- [36] Mousa Meratizaman, SinaMonadizadeh, Majid Amidpour. Introduction of an efficient small-scale freshwater-power generation cycle (SOFC–GT–MED), simulation, parametric study and economic assessment. *Desalination* 351 (2014) 43-58.
- [37] Tanvir Tanim, David J. Bayless, Jason P. Trembly. Modeling a 5 kWe planar solid oxide fuel cell based system operating on JP-8 fuel and a comparison with tubular cell based system for auxiliary and mobile power applications. *Journal of Power Sources* 245 (2014) 986-997.
- [38] Mithila N. Manage, Eva Sorensen, Stefaan Simons, Dan J.L. Brett. A modelling approach to assessing the feasibility of the integration of power stations with steam electrolyzers. *Chemical engineering research and design* 92 (2014) 1988-2005.
- [39] Xiuqin Zhang, Yuan Wang, Juncheng Guo, Tien-Mo Shih, Jincan Chen. A unified model of high-temperature fuel-cell heatengine hybrid systems and analyses of its optimum performances. *International Journal of Hydrogen Energy* 39 (2014) 1811-1825.
- [40] Timothy Anderson, Periasamy Vijay, Moses O. Tade. An adaptable steady state Aspen Hysys model for the methane fuelled solid oxide fuel cell. *Chemical Engineering Research and Design* 92 (2014) 295-307.
- [41] J. M. Smith, H. C. Van Ness, M. M. Abbott. *Introduction to chemical engineering thermodynamics Sixth Edition in SI Units*. Singapore. 2001. ISBN 007-008304-5.
- [42] Wenyuan Yang, Yingru Zhao, Vincenzo Liso, Nigel Brandon. Optimal design and operation of a syngas-fuelled SOFC micro-CHP system for residential applications in different climate zones in China. *Energy and Buildings* 80 (2014) 613-622.
- [43] J.K. Verma, A. Verma, A.K. Ghoshal. Performance analysis of solid oxide fuel cell using reformed fuel. *International Journal of Hydrogen Energy* 38 (2013) 9511-9518.
- [44] J.R. Ferguson, J.M. Fiard, R. Herbin. Three-dimensional numerical simulation for various geometries of solid oxide fuel cells. *Journal of Power Sources* 58 (1996) 109-222.

- [45] P. Aguiar, C.S. Adjiman, N.P. Brandon. Anode-supported intermediate temperature direct internal reforming solid oxide fuel cell. I: model-based steady-state performance. *Journal of Power Sources* 138 (2004) 120-136.
- [46] M.M. Hussain, X. Li, I. Dincer. Mathematical modeling of planar solid oxide fuel cells. *Journal of Power Sources* 161 (2006) 1012-1022.
- [47] Luca Andreassi, Giampiero Rubeo, Stefano Ubertini, Piero Lunghi, Roberto Bove. Experimental and numerical analysis of a radial flow solid oxide fuel cell. *International Journal of Hydrogen Energy* 32 (2007) 4559-4574.
- [48] Xiongwen Zhang, Guojun Li, Jun Li, Zhenping Feng, Numerical study on electric characteristics of solid oxide fuel cells, *Energy Conversion and Management* 48 (2007) 977-989.
- [49] Igor Zinovik, Dimos Poulidakos. Modeling the temperature field in the reforming anode of a button-shaped solid oxide fuel cell. *Electrochimica Acta* 54 (2009) 6234-6243.
- [50] Cheng Bao, Ningsheng Cai, Eric Croiset. A multi-level simulation platform of natural gas internal reforming solid oxide fuel cell-gas turbine hybrid generation system-Part II. Balancing units model library and system simulation. *Journal of Power Sources* 196 (2011) 8424-8434.
- [51] Martin Andersson, Jinliang Yuan, Bengt Sundén. SOFC modeling considering hydrogen and carbon monoxide as electrochemical reactants. *Journal of Power Sources* 232 (2013) 42-54.
- [52] Martin Andersson, Hedvig Paradis, Jinliang Yuan, Bengt Sundén. Three dimensional modeling of an solid oxide fuel cell coupling charge transfer phenomena with transport processes and heat generation. *Electrochimica Acta* 109 (2013) 881-893.
- [53] Kafia Oulmi, Bariza Zitouni, Hocine Ben Moussa, Hafsia Abdenebi, G.M. Andreadis. Total polarization effect on the location of maximum temperature value in planar SOFC. *International Journal of Hydrogen Energy* 36 (2011) 4236-4243.
- [54] Yaneeporn Patcharavorachot, Woranee Paengjuntuek, Suttichai Assabumrungrat, Amornchai Arpornwichanop. Performance evaluation of combined solid oxide fuel cells with different electrolytes. *International Journal of Hydrogen Energy* 35 (2010) 4301-4310.
- [55] Phanicha Tippawan, Amornchai Arpornwichanop. Energy and exergy analysis of an ethanol reforming process for solid oxide fuel cell applications. *Bioresource Technology* 157 (2014) 231-239.

- [56] S.H. Chan, K.A. Khor, Z.T. Xia. A complete polarization model of a solid oxide fuel cell and its sensitivity to the change of cell component thickness. *Journal of Power Sources* 93 (2001) 130-140.
- [57] Stefano Cordiner, Massimo Feola, Vincenzo Mulone, Fabio Romanelli. Analysis of a SOFC energy generation system fuelled with biomass reformat. *Applied Thermal Engineering* 27 (2007) 738-747.
- [58] M.M. Hussain, X. Li, I. Dincer. Mathematical modeling of transport phenomena in porous SOFC anodes. *International Journal of Thermal Sciences* 46 (2007) 48-56.
- [59] D. Larrain, J. Van herle, F. Marechal, D. Favrat. Thermal modeling of a small anode supported solid oxide fuel cell. *Journal of Power Sources* 118 (2003) 367-374.
- [60] Dayadeep S. Monder, K. Nandakumar., Karl T. Chuang. Model development for a SOFC button cell using H₂S as fuel. *Journal of Power Sources* 162 (2006) 400-414.
- [61] D.A. Noren, M.A. Hoffman. Clarifying the Butler–Volmer equation and related approximations for calculating activation losses in solid oxide fuel cell models. *Journal of Power Sources* 152 (2005) 175-181.
- [62] Hui-Chung Liu, Chien-Hsiung Lee, Yao-Hua Shiu, Ryey-Yi Lee, Wei-Mon Yan. Performance simulation for an anode-supported SOFC using Star-CD code. *Journal of Power Sources* 167 (2007) 406-412.
- [63] Carlos Boigues-Munoz, Giulio Santori, Stephen McPhail, Fabio Polonara. Thermochemical model and experimental validation of a tubular SOFC cell comprised in a 1 kW_{el} stack designed for mCHP applications. *International Journal of Hydrogen Energy* 39 (2014) 21714-21723.
- [64] Abdullah AlZahrani, I. Dincer, Xianguo Li. A performance assessment study on solid oxide fuel cells for reduced operating temperatures. *International Journal of Hydrogen Energy* 40 (2015) 7791-7797.
- [65] Masoud Rokni. Biomass gasification integrated with a solid oxide fuel cell and Stirling engine. *Energy* 77 (2014) 6-18.
- [66] Masoud Rokni. Thermodynamic analyses of municipal solid waste gasification plant integrated with solid oxide fuel cell and Stirling hybrid system. *International Journal of Hydrogen Energy* 40 (2015) 7855-7869.
- [67] Wei Jiang, Ruixian Fang, Jamil A. Khana, Roger A. Dougal. Parameter setting and analysis of a dynamic tubular SOFC model. *Journal of Power Sources* 162 (2006) 316-326.

- [68] Francisco Jurado. A method for the identification of solid oxide fuel cells using a Hammerstein model. *Journal of Power Sources* 154 (2006) 145-152.
- [69] Feng Zhao, Anil V. Virkar. Dependence of polarization in anode-supported solid oxide fuel cells on various cell parameters. *Journal of Power Sources* 141(2005)79-95.
- [70] Anchasa Pramuanjaroenkij, Sadik Kakac, Xiang Yang Zhou. Mathematical analysis of planar solid oxide fuel cells. *International Journal Of Hydrogen Energy* 33 (2008) 2547-2565.
- [71] Xiongwen Zhang, Jun Li, Guojun Li, Zhenping Feng. Numerical study on the thermal characteristics in a tubular solid oxide fuel cell with indirect internal reformer. *International Journal of Thermal Sciences* 48 (2009) 805-814.
- [72] Yingru Zhao, Congjie Ou, Jincan Chen. A new analytical approach to model and evaluate the performance of a class of irreversible fuel cells. *International journal of hydrogen energy* 33 (2008) 4161-4170.
- [73] Eduardo Hernandez-Pacheco. Electro-thermal model for a solid oxide fuel cell. PHD. University of North Dakota. Grand Forks, North Dakota 2004.
- [74] A. Sorce, A. Greco, L. Magistri, P. Costamagna. FDI oriented modeling of an experimental SOFC system, model validation and simulation of faulty states. *Applied Energy* 136 (2014) 894-908.
- [75] Xiuqin Zhang, Shanhe Su, Jincan Chen, Yingru Zhao, Nigel Brandon. A new analytical approach to evaluate and optimize the performance of an irreversible solid oxide fuel cell-gas turbine hybrid system. *International Journal of Hydrogen Energy* 36 (2011) 15304-15312.
- [76] Mahshid Fardadi, Fabian Mueller, Faryar Jabbari. Feedback control of solid oxide fuel cell spatial temperature variation. *Journal of Power Sources* 195 (2010) 4222-4233.
- [77] Ying-Wei Kang, Jun Li, Guang-Yi Cao, Heng-Yong Tu, Jian Li, Jie Yang. A reduced 1D dynamic model of a planar direct internal reforming solid oxide fuel cell for system research. *Journal of Power Sources* 188 (2009) 170-176.
- [78] Hongliang Cao, Xi Li, Zhonghua Deng, Jian Li, Yi Qin. Thermal management oriented steady state analysis and optimization of a kW scale solid oxide fuel cell stand-alone system for maximum system efficiency. *International Journal of Hydrogen Energy* 38 (2013) 12404-12417.
- [79] Lijin Wang, Huisheng Zhang, Shilie Weng. Modeling and simulation of solid oxide fuel cell based on the volume-resistance characteristic modeling technique. *Journal of Power Sources* 177 (2008) 579-589.

- [80] Suranat Wongchanapai, Hiroshi Iwai, Motohiro Saito, Hideo Yoshida. Selection of suitable operating conditions for Planar Anode-supported Direct-internal-reforming Solid-Oxide Fuel Cell. *Journal of Power Sources* 204 (2012) 14-24.
- [81] Y. Inui, N. Ito, T. Nakajima, A. Urata. Analytical investigation on cell temperature control method of planar solid oxide fuel cell. *Energy Conversion and Management* 47 (2006) 2319-2328.
- [82] C. Ozgur Colpan, Feridun Hamdullahpur, Ibrahim Dincer. Heat-up and start-up modeling of direct internal reforming solid oxide fuel cells. *Journal of Power Sources* 195 (2010) 3579-3589.
- [83] Yau-Pin Chyou, Tsang-Dong Chung, Jong-Sheng Chen, Ri-Fong Shie. Integrated thermal engineering analyses with heat transfer at periphery of planar solid oxide fuel cell. *Journal of Power Sources* 139 (2005) 126-140.
- [84] Y. Inui, A. Urata, N. Ito, T. Nakajima, T. Tanaka. Performance simulation of planar SOFC using mixed hydrogen and carbon monoxide gases as fuel. *Energy Conversion and Management* 47 (2006) 1738-1747.
- [85] A. Chaisantikulwat, C. Diaz-Goano, E.S. Meadows. Dynamic modelling and control of planaranode-supported solid oxide fuel cell. *Computers and Chemical Engineering* 32 (2008) 2365-2381.
- [86] Yunzhen Yang, Guilan Wang, Haiou Zhang, Weisheng Xia. Computational analysis of thermo-fluid and electrochemical characteristics of MOLB-type SOFC stacks. *Journal of Power Sources* 173 (2007) 233-239.
- [87] Think X. Ho, Pawel Kosinski, Alex C. Hoffmann, Arild Vik. Numerical analysis of a planar anode-supported SOFC with composite electrodes. *International Journal of Hydrogen Energy* 34 (2009) 3488-3499.
- [88] M.A. Khaleel , Z. Lin, P. Singh, W. Surdoval, D. Collin. A finite element analysis modeling tool for solid oxide fuel cell development: coupled electrochemistry, thermal and flow analysis in MARC. *Journal of Power Sources* 130 (2004) 136-148.
- [89] Guilan Wang, Yunzhen Yang, Haiou Zhang, Weisheng Xia ; 3-D model of thermo-fluid and electrochemical for planar SOFC. *Journal of Power Sources* 167 (2007) 398-405.
- [90] Chen-li Sun, Hsien-Chih Ou. Numerical characterization of a microscale solid-oxide fuel cell. *Journal of Power Sources* 185 (2008) 363-373.

- [91] Yuzhang Wang, Fumihiko Yoshida, Takao Watanabe, Shilie Weng. Numerical analysis of electrochemical characteristics and heat/species transport for planar porous-electrodesupported SOFC. *Journal of Power Sources* 170 (2007) 101-110.
- [92] Valery A. Danilov, Moses O. Tade. A CFD-based model of a planar SOFC for anode flow field design. *International Journal of Hydrogen Energy* 34 (2009) 8998-9006.
- [93] Tsung Leo Jiang, Ming-Hong Chen. Thermal-stress analyses of an operating planar solid oxide fuel cell with the bonded compliant seal design. *International Journal of Hydrogen Energy* 34 (2009) 8223-8234.
- [94] Grant Hawkes, James O'Brien, Carl Stoots, Brian Hawkes. 3D CFD model of a multi-cell high-temperature electrolysis stack. *International Journal of Hydrogen Energy* 34(2009) 4189-4197.
- [95] Joonguen Park, Joongmyeon Bae, Jae-Yuk Kim. The current density and temperature distributions of anode-supported flat-tube solid oxide fuel cells affected by various channel designs. *International Journal of Hydrogen Energy* 36 (2011) 9936-9944.
- [96] Zuopeng Qu, P.V. Aravind, S.Z. Boksteen, N.J.J. Dekker, A.H.H. Janssen, N. Woudstra, A.H.M. Verkooijen. Three-dimensional computational fluid dynamics modeling of anode-supported planar SOFC. *International Journal of Hydrogen Energy* 36 (2011) 10209-10220.
- [97] A. Mauro, F. Arpino, N. Massarotti. Three-dimensional simulation of heat and mass transport phenomena in planar SOFCs. *International Journal of Hydrogen Energy* 36 (2011) 10288-10301.
- [98] Arata Nakajo, Fabian Mueller, Jacob Brouwer, Jan Van herle, Daniel Favrat. Mechanical reliability and durability of SOFC stacks. Part I: Modelling of the effect of operating conditions and design alternatives on the reliability. *International Journal of Hydrogen Energy* 37 (2012) 9249-9268.
- [99] Arata Nakajo, Fabian Mueller, Jacob Brouwer, Jan Van herle, Daniel Favrat. Mechanical reliability and durability of SOFC stacks. Part II: Modelling of mechanical failures during ageing and cycling. *International Journal of Hydrogen Energy* 37 (2012) 9269-9286.
- [100] Joonguen Park, Joongmyeon Bae. Characterization of electrochemical reaction and thermo-fluid flow in metal-supported solid oxide fuel cell stacks with various manifold designs. *International Journal of Hydrogen Energy* 37 (2012) 1717-1730.

- [101] Jiayu Li, Zijing Lin. Effects of electrode composition on the electrochemical performance and mechanical property of micro-tubular solid oxide fuel cell. *International Journal of Hydrogen Energy* 37 (2012) 12925-12940.
- [102] M. Peksen, A. Al-Masri, L. Blum, D. Stolten. 3D transient thermomechanical behaviour of a full scale SOFC short stack. *International Journal of Hydrogen Energy* 38 (2013) 4099-4107.
- [103] Dong Yan, Zhu Bin, Dawei Fang, Jun Luo, Xiaopeng Wang, Jian Pu, Bo Chi, Li Jian, Yisheng Zhang. Feasibility study of an external manifold for planar intermediate-temperature solid oxide fuel cells stack. *International Journal of Hydrogen Energy* 38 (2013) 660-666.
- [104] M. Peksen. 3D thermomechanical behaviour of solid oxide fuel cells operating in different environments. *International Journal of Hydrogen Energy* 38 (2013) 13408-13418.
- [105] Francisco Elizalde-Blancas, Ismail B. Celik, Victor Rangel-Hernandez, Abel Hernandez-Guerrero, Jose M. Riesco-Avila. Numerical modeling of SOFCs operating on biogas from biodigesters. *International Journal of Hydrogen Energy* 38 (2013) 377-384.
- [106] L. Fan, E. Dimitriou, M.J.B.M. Pourquie, M. Liu, A.H.M. Verkooijen, P.V. Aravind. Prediction of the performance of a solid oxide fuel cell fuelled with biosyngas: Influence of different steam-reforming reaction kinetic parameters. *International Journal of Hydrogen Energy* 38 (2013) 510-524.
- [107] Omid Razbani, Mohsen Assadi, Martin Andersson. Three dimensional CFD modeling and experimental validation of an electrolyte supported solid oxide fuel cell fed with methane-free biogas. *International Journal of Hydrogen Energy* 38 (2013) 10068-10080.
- [108] David L. Damm, Andrei G. Fedorov. Reduced-order transient thermal modeling for SOFC heating and cooling. *Journal of Power Sources* 159 (2006) 956-967.
- [109] Meng Ni, Michael K.H. Leung, Dennis Y.C. Leung. Micro-scale modelling of solid oxide fuel cells with micro-structurally graded electrodes. *Journal of Power Sources* 168 (2007) 369-378.
- [110] F. Calise, M. Dentice d' Accadia, L. Vanoli, M.R. von Spakovsky. Single-level optimization of a hybrid SOFC-GT power plant. *Journal of Power Sources* 159 (2006) 1169-1185.

- [111] S.H. Chan, H.K. Ho, Y. Tian. Modelling of simple hybrid solid oxide fuel cell and gas turbine power plant. *Journal of Power Sources* 109 (2002) 111-120.
- [112] S. Campanari, P. Iora. Definition and sensitivity analysis of a finite volume SOFC model for a tubular cell geometry. *Journal of Power Sources* 132 (2004) 113-126.
- [113] Y. Sahli, B. Zitouni, H. Ben Moussa, H. Abdenebi, Three-Dimensional Numerical Study of the Heat Transfer on the Planar Solid Oxide Fuel Cell: Joule's Effect, In I. Dincer, C. Ozgur Colpan, O. Kizilkan and M. Akif Ezan (eds), *Progress in clean energy volume I: Analysis and Modeling*, Switzerland: Springer, 449-461 (2015).
- [114] Y. Sahli, B. Zitouni, H. Ben-Moussa. Solid Oxide Fuel Cell Thermodynamic Study. *Çankaya University Journal of Science and Engineering* 14 (2017) 134–151.
- [115] Yixin Lu, Laura Schaefer, Peiwen Li. Numerical study of a flat-tube high power density solid oxide fuel cell Part I. Heat/mass transfer and fluid flow. *Journal of Power Sources* 140 (2005) 331-339.
- [116] ABDENEBI Hafsia. Étude numérique bidimensionnelle des champs thermiques dans une pile à combustible du type SOFC planaire : Etude bidimensionnelle du champ de température. Mémoire de Magistère. Faculté de technologie. Département de mécanique. Université Batna 2. 2009.
- [117] Youcef Sahli, Hocine Ben-Moussa, Bariza Zitouni. Optimization Study of the Produced Electric Power by SOFCs. *International Journal of Hydrogen Energy*, xx (2018) xxx-xxx. <http://dx.doi.org/10.1016/j.ijhydene.2018.08.162>
- [118] Youcef Sahli, Bariza Zitouni, Hocine Ben-Moussa. Thermodynamic optimization of the solid oxide fuel cell electric power. *University Politehnica of Bucharest Scientific Bulletin Series B-Chemistry and Materials Science*, issue 2, 80 (2018) 159-170.
- [119] SAHLI Youcef, ZITOUNI Bariza, BEN MOUSSA Hocine. 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. *Revue des Energies Renouvelables* 21 (2018) 173-180.
- [120] ABDENEBI Hafsia, ZITOUNI Bariza, BEN MOUSSA Hocine, HADDAD Djamel, ZITOUNI Hadda, and SAHLI Youcef. Inlet Methane Temperature Effect at a Planar SOFC Thermal Field Under Direct Internal Reforming Condition. Springer International Publishing Switzerland 2015. *Progress in Clean Energy*, volume 2, I. Dincer et al. (eds.) / DOI 10.1007/978-3-319-17031-2_41.
- [121] TAMERABET Monsaf, BEN MOUSSA Hocine, SAHLI Youcef, MOHAMMEDI Abdallah. Unsteady three-dimensional numerical study of mass transfer in PEM fuel

cell with spiral flow field. *International Journal of Hydrogen Energy* 42 (2017) 1237-1251. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2016.12.084>.

- [122] SAHLI Youcef. Etude numérique tridimensionnelle des phénomènes de transfert de chaleur dans la pile à combustible SOFC planaire. Mémoire de Magistère. Faculté de technologie. Département de mécanique. Université Batna 2. 2013.

Annexes

Chapter 32

Three-Dimensional Numerical Study of the Heat Transfer on The Planar Solid Oxide Fuel Cell: Joules Effect

Youcef Sahli, Bariza Zitouni, Hocine Ben Moussa, and Hafsia Abdenebi

Abstract The aim of this work is to analyze the three-dimensional temperature fields in a planar solid oxide fuel cell (SOFC) single cell with different geometric configurations: supported anode, electrolyte, or cathode (SA, SE, and SC). The temperature distribution is determined by taking into account only the largest heat source due to ohmic overpotential loss resulting from the Joule effect. The temperature values are obtained using a program in FORTRAN language which is based on the method of three-dimensional finite difference. The three-dimensional numerical study result analysis shows the localization of the highest temperature value at the SOFC component's specific area: cathode (C), electrolyte (E), anode (A), and interconnector.

Keywords SOFC • Temperature • Heat source • Three-dimensional • FORTRAN

Nomenclature

Roman Letters

- i Current density, A/m^2
 L_x Width of the cell along the axis (X), μm
 L_y Thickness of the cell along the axis (Y), μm

Y. Sahli (✉)

Unité de Recherche en Energies Renouvelables en Milieu Saharien, URERMS,
Centre de Développement des Energies Renouvelables, CDER 01000, Adrar, Algeria

Department of Mechanical, Faculty of Technology, University Hadj Lakhder, Batna, Algeria
e-mail: sahli.sofc@gmail.com; H2SOFC@gmail.com

B. Zitouni

Department of Food Technology, Institute of Veterinary Sciences and Agricultural Sciences,
University Hadj Lakhder, Batna, Algeria

Department of Mechanical, Faculty of Technology, University Hadj Lakhder, Batna, Algeria

H. Ben Moussa • H. Abdenebi

Department of Mechanical, Faculty of Technology, University Hadj Lakhder, Batna, Algeria

L_z	Length of the cell along the axis (Z), μm
S	Heat source, W/m^3
T	Temperature, K

Greek Letters

λ	Thermal conductivity, W/m K
σ	Electric conductivity, $1/\Omega \text{ m}$

Subscripts

an	Anode
cat	Cathode
elec	Electrolyte
in	Interconnector
max	Maximum
ohm	Ohmic

Abbreviations

SA	Supported anode
SC	Supported cathode
SE	Supported electrolyte

32.1 Introduction

Several previous works were done about this subject. Kakaça et al. [1] publish a large literature review about planar or tubular SOFC physical models. They used 120 references. It contains electrochemical models, gas dynamics, and mass and heat transfer. The literature review conducted by the authors includes all heat transfer modes.

Inui et al. [2] have examined in detail the influence of the hydrogen and carbon monoxide ratio at the planar SOFC performance using three-dimensional numerical simulation code. Chaisantikulwat et al. [3] studied also presented a three-dimensional model of planar SOFC-SA. It provides the polarization curve (potential/current density), mole fractions fields, velocity, temperature, species concentrations, and the current distribution at the cell. The model is based on a conductive heat transfer in the solid part (electrolyte and interconnector) and a heat transfer by convection and conduction at the porous part (electrodes). They use an effective thermal conductivity. The documents authors [3, 4], are indicated that the studies are carried out by unsteady-state models.

Concerning the heat source type, Yang et al. [4] described a three-dimensional steady simulation tool, which neglect the radiative transfer for the planar SOFC-SA. The heat source is a three-source sum: the source due to electrochemical reactions, activation overvoltage, and ohmic source. The described tool is intended to simulate more parameters. The temperature distributions, species changes, and current densities are calculated under different conditions. Ho et al. [5] studied a planar SOFC with supported anode (SA) with an unsteady three-dimensional numerical model. It contains the equations describing the mass, species, and energy transport of the chemical and electrochemical processes. The model ignores also the radiation heat transfer. The heat source is similar except the chemical heat source. Equation solving is made by the STAR-CD software. The authors Khaleel et al. [6] proposed a three-dimensional tool simulation for the planar SOFC-SA. The tool combines a finite element analysis code with a robust electrochemical module internally developed. It is based on the characteristics obtained experimentally. It calculates the current density distribution, heat production, and the species (fuel and oxidant) concentrations.

Sun and Ou [7] studied and evaluated the channel design influence on a planar SOFC (ES) single cell at a three-dimensional and unsteady model that neglected the radiation transfer. They have compared the results of three different oxidant compositions: 100 % O₂, 50 % N₂, and 50 % air O₂. Also, a comparison was made between the temperature conditions, adiabatic or isothermal, applied to the outer limit of the SOFC.

Wang et al. [8] presented a three-dimensional mathematical model to simulate the electrochemical characteristics and the multispecies heat transfer in (SOFC) planar steady state. The equations governing continuity, mass, energy, and the electric charge conservation are solved simultaneously by the finite volume method. Polarization activation, Joules effect, and concentration overpotential are considered the main heat sources.

At the present work which is based on our previous works [9–13], our interest is focused on the collection and analysis of distributions and temperature profiles in the case of a three-dimensional geometry which recognizes only the Joule effect, the heat source present in all the SOFC components, cathode, electrolyte, anode, channels, and interconnectors.

32.2 Mathematical Modeling

32.2.1 Area Calculation

The computational domain is limited to a SOFC single cell that consists of two gas flow channels, anode and cathode, the electrolyte, and the interconnectors, Fig. 32.1.

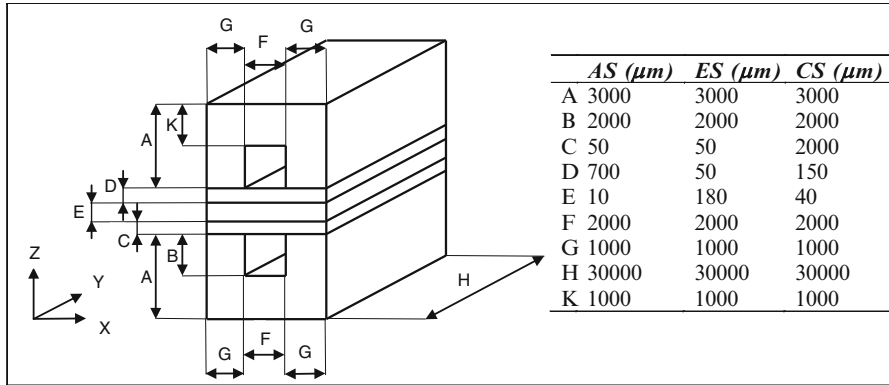


Fig. 32.1 SOFC single-cell dimension

32.2.2 Simplifying Assumptions

It is clear that the assumption’s introduction is necessary to simplify the three-dimensional equation system and make the problem less difficult. In this work, the following assumptions quote:

- A three-dimensional model and stationary computing.
- A continuous medium.
- Components are homogeneous and isotropic.
- The channel entrance fluid temperature is constant.
- The gas electrical conductivity is negligible.
- The channel flow velocity is assumed very low.
- Heat transfer by radiation is neglected.
- A constant current density for all the SOFC components.

32.2.3 Heat Transfer Equations

Energy is transported by conduction in the cell, the effects of the Joule effect losses are taken into account by an additional term in the source of the energy balance equation, the three-dimensional equation of energy transport is given by:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left\{ \lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right\} + \frac{\partial}{\partial y} \left\{ \lambda \frac{\partial T}{\partial y} \right\} + \frac{\partial}{\partial z} \left\{ \lambda \frac{\partial T}{\partial z} \right\} + S = 0 \quad (32.1)$$

Table 32.1 Electrical conductivity of the SOFC components

Components	σ [$\Omega^{-1} \text{ cm}^{-1}$]	References
Electrolyte	$\sigma_{\text{ele}} = 3.34 \times 10^4 \exp(-10,300/T)$	[3, 5, 10, 12–19]
Cathode	$\sigma_{\text{cat}} = \frac{4.2 \times 10^7}{T} \exp(-1,200/T)$	[10, 12, 13, 15]
Anode	$\sigma_{\text{an}} = \frac{9.5 \times 10^7}{T} \exp(-1,150/T)$	[3, 10, 12–16, 18, 19]
Interconnector	$\sigma_{\text{in}} = \frac{9.3 \times 10^5}{T} \exp(-1,100/T)$	[13, 15]

32.2.4 The Heat Source Term

The heat source that exists in the solid parts of the SOFC is due to ohmic losses and is expressed as follows:

$$S = S_{\text{Ohm, in}} = S_{\text{Ohm, elec}} = S_{\text{Ohm, an}} = S_{\text{Ohm, ca}} = \frac{i^2}{\sigma} \quad (32.2)$$

The heat source due to the Joule effect (ohmic losses) depends on the ratio of the current divided by the square of the electrical conductivity of each point of the solid cell. The electric conductivity varies from a material to another (Table 32.1).

Energy is transported by convection and conduction at the anode and the cathode. The gas velocities in the SOFC channels are very small. Therefore, the convective term is neglected, and then we consider the conduction mode transfer at gas channels, which gives the following equation of energy conservation:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left\{ \lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right\} + \frac{\partial}{\partial y} \left\{ \lambda \frac{\partial T}{\partial y} \right\} + \frac{\partial}{\partial z} \left\{ \lambda \frac{\partial T}{\partial z} \right\} = 0 \quad (32.3)$$

32.2.5 Boundary Conditions

On all external surfaces and all directions, the boundary conditions are of Neumann type, except at the entrance channel where we take a constant temperature with the Dirichlet conditions that are as shown in Fig. 32.2 and Table 32.2.

32.2.6 Computation Program

The equations are partial second-order differential type (parabolic) with constant coefficients. They have nonlinear source terms. Due to the complexity of these equations, they cannot be solved analytically. However, they can be solved numerically. The finite difference method is used. The various data used are listed in Tables 32.2 and 32.3.

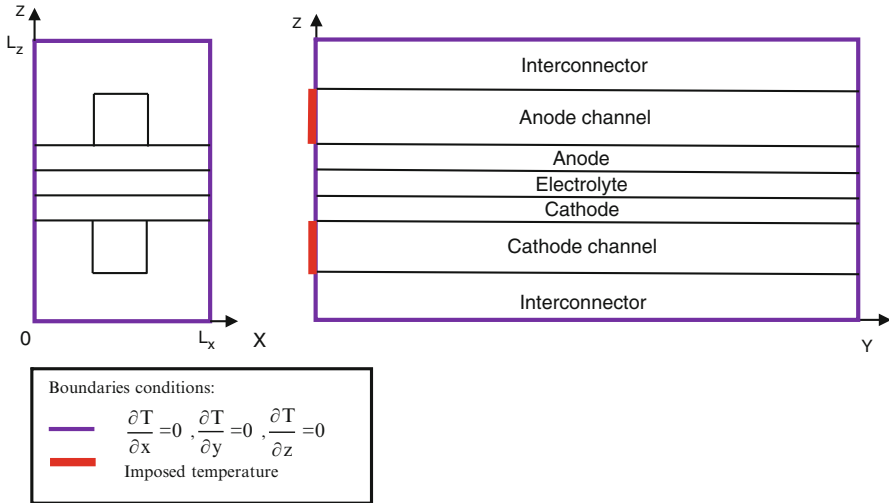


Fig. 32.2 Boundary conditions of a SOFC elementary cell

Table 32.2 Boundary conditions

Components	Axis OX		Axis OY		Axis OZ	
	(0, y, z)	(Lx, y, z)	(x, 0, z)	(x, Ly, z)	(x, y, 0)	(x, y, Lz)
Electrolyte	$\frac{\partial \phi}{\partial x} = 0$	$\frac{\partial \phi}{\partial x} = 0$	$\frac{\partial \phi}{\partial y} = 0$	$\frac{\partial \phi}{\partial y} = 0$	$\frac{\partial \phi}{\partial z} = 0$	$\frac{\partial \phi}{\partial z} = 0$
Cathode	$\frac{\partial \phi}{\partial x} = 0$	$\frac{\partial \phi}{\partial x} = 0$	$\frac{\partial \phi}{\partial y} = 0$	$\frac{\partial \phi}{\partial y} = 0$	$\frac{\partial \phi}{\partial z} = 0$	$\frac{\partial \phi}{\partial z} = 0$
Anode	$\frac{\partial \phi}{\partial x} = 0$	$\frac{\partial \phi}{\partial x} = 0$	$\frac{\partial \phi}{\partial y} = 0$	$\frac{\partial \phi}{\partial y} = 0$	$\frac{\partial \phi}{\partial z} = 0$	$\frac{\partial \phi}{\partial z} = 0$
Interconnector	$\frac{\partial \phi}{\partial x} = 0$	$\frac{\partial \phi}{\partial x} = 0$	$\frac{\partial \phi}{\partial y} = 0$	$\frac{\partial \phi}{\partial y} = 0$	$\frac{\partial \phi}{\partial z} = 0$	$\frac{\partial \phi}{\partial z} = 0$
Anode channel	$\frac{\partial \phi}{\partial x} = 0$	$\frac{\partial \phi}{\partial x} = 0$	$T = T_{H_2} = C^{ste}$	$\frac{\partial \phi}{\partial y} = 0$	$\frac{\partial \phi}{\partial z} = 0$	$\frac{\partial \phi}{\partial z} = 0$
Cathode channel	$\frac{\partial \phi}{\partial x} = 0$	$\frac{\partial \phi}{\partial x} = 0$	$T = T_{air} = C^{ste}$	$\frac{\partial \phi}{\partial y} = 0$	$\frac{\partial \phi}{\partial z} = 0$	$\frac{\partial \phi}{\partial z} = 0$

Table 32.3 Thermal conductivity values

Components	Thermal conductivity λ (W m ⁻¹ K ⁻¹)	Material	References
Anode	5.84	Ni-YSZ	[2, 20–22]
Cathode	4	La _{1-x} Sr _x MnO ₃	[5, 9, 13, 21, 23–26]
Electrolyte	2.16	YSZ	[2, 20–22]
Interconnector	6	LaCrO ₃	[1, 27]

32.3 Results and Discussion

The temperature values obtained at a three-dimensional SOFC are obtained by inlet gas channel temperature values equal to 1,023 K [3, 5, 14, 17] and an imposed current density equal to 20,000 A/m² [5, 12, 17, 28, 29]. The sizes are taken from

[14], for a cell having a supported anode (SA). The case with a supported electrolyte (SE) is referred to [27]. Finally, [5, 17, 30, 31] are as a reference for a SOFC with supported cathode (SC).

As first results, the cells having an anode supported or electrolyte supported or cathode supported exhibit almost the same shape of the field, that is to say, the maximum value of the temperature is the output of the SOFC cell regardless of its geometric configuration (case of heat production).

From the results obtained, it is noted that the elevation of the temperature values is important in case of a cell having an SC relative to the other geometric configurations; it is greater than 1,220 K (Fig. 32.5).

Based on the inlet temperature value of the two gases, it is noted that the increasing maximum values of the cell temperature that have SC are displayed by a temperature difference of about 180 ten units (Fig. 32.5). The temperature value evolution compared with the inlet temperature is almost for 180 K for SE cell configuration (Fig. 32.4). The low temperature elevation value is noted at the SOFC SA. It is in order of 18 K (Fig. 32.3). The maximum values of the temperature are situated in different locations in the input of the stack. According to each geometric configuration, the temperature maximum values and their locations are shown in Table 32.4.

Moreover, it is noted that the upper portion of the interconnector (anode portion) is hotter relative to the lower portion of the interconnector (cathode portion) for the SA and SE (Figs. 32.3 and 32.4); besides in the cell by SC (Fig. 32.5), is the totally opposed to cases presented by (Figs. 32.3 and 32.4). It means that the cathode portion is hotter than the anode portion (Fig. 32.5). The temperature increase for each configuration in the direction (OY) and positions along the axis (OX) ($x = 0$ and $x = 0.5x_{\max}$) to the output of the stack is indicated in Fig. 32.6.

Note that the temperature variation value range according to the (OY) direction at positions ($x = 0$ and $x = 0.5x_{\max}$) located at the outlet of the cell is nearly of the order of five units for every SOFC geometric configuration (Fig. 32.6).

At the SA configuration, the cell middle is totally hotter than the terminals (left and right). Also, it is observed that the anode middle part is hotter than the terminals (left and right) situated in the same part of the cell. The contrary is presented in the other cases (Fig. 32.6).

As for the case of an SE geometric configuration, Fig. 32.3 shows that the cell lower part (cathode, cathode and interconnector channel) situated at the stack middle is hotter than the terminals (left and right) situated in the cell same part.

Finally, in the case of a cell with SC, Fig. 32.6 shows that the lower stack part (cathode, cathode and interconnector channel) is hotter than the upper part (anode, anode and interconnector channel). Contrary, in other cases, the lower stack part (cathode, interconnector and cathode channel) is cooler than the upper stack part (anode, anode and interconnector channel). It has to be observed that the middle of that cell is fully colder than its terminals (left and right), while the middle of the lower part of the cell is cooler than the wings (left and right) situated in the same stack portion which gives us perfectly the opposite in the other cases (Fig. 32.6).

According to the curves shown in Fig. 32.6, cells which possess a SE or an SA, show clearly that the maximum difference of the temperature values on the axis

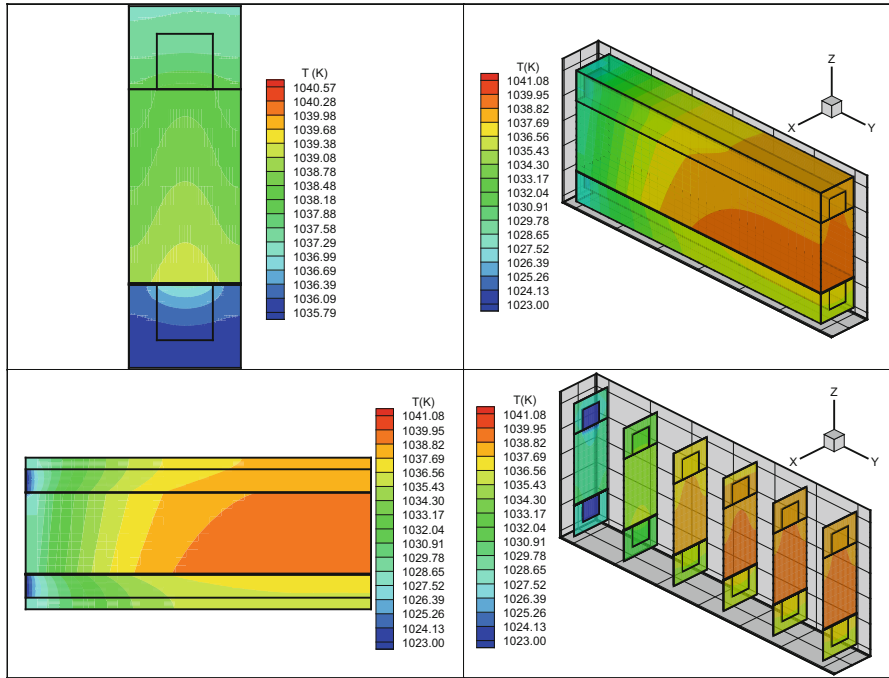


Fig. 32.3 Temperature field in a cell with SA

Table 32.4 Maximum temperature at the cell output according to each geometric configuration

Cell type	T_{max} (K)	Location of T_{max}
SA	1,041.08	The electrolyte and the anode
SE	1,199.10	The upper part of the electrolyte and the lower part of the anode
SC	1,220.47	The electrolyte and the upper part of the cathode

(OY) to the cell output, is situated in the cell middle, the opposite case is logically shown in the case of a cell with cathode supported, that is to say, in the case of SOFC-SC, the maximum difference of the temperature values on the axis (OY) to the cell output, is situated on both sides, left and right, of the cell.

Figure 32.7 shows the temperature evolution for each configuration according to the axis (OZ) from the input to the output of the stack for the position ($y = 0.5y_{max}$ and $x = 0.5x_{max}$).

The temperature increase is remarkable at the cell beginning in all cell configuration types which is related to the gas inlet temperature value. At the cell entrance, in the case of an SA, a cell with the value of the temperature remains almost constant.

Then, starting from the last values of the temperature, the increase is hyperbolic. According to an SA configuration as shown in Fig. 32.7, at the distance from 17 mm from the entrance, the temperature reaches almost its final value at the output of the cell (no temperature increase values in the direction (OZ), after all

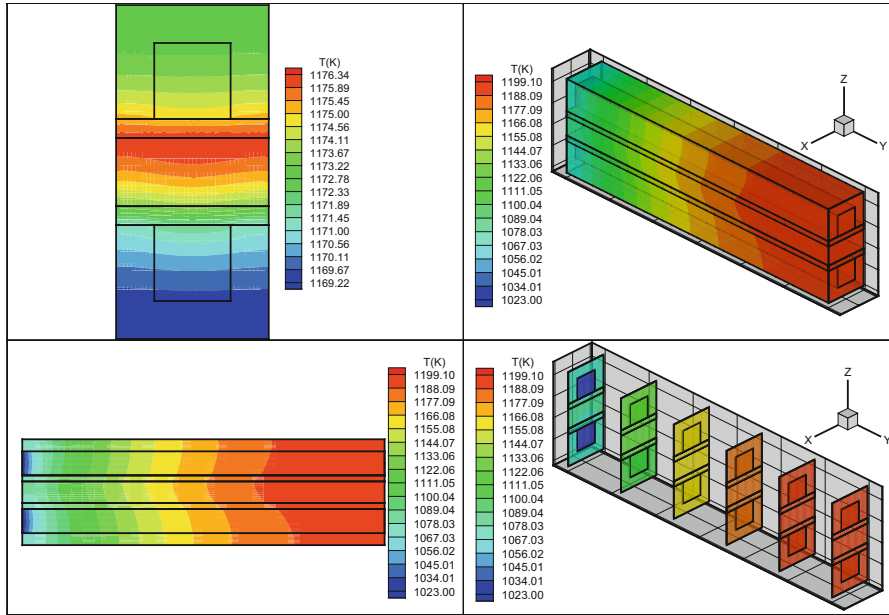


Fig. 32.4 Temperature field in a cell with SE

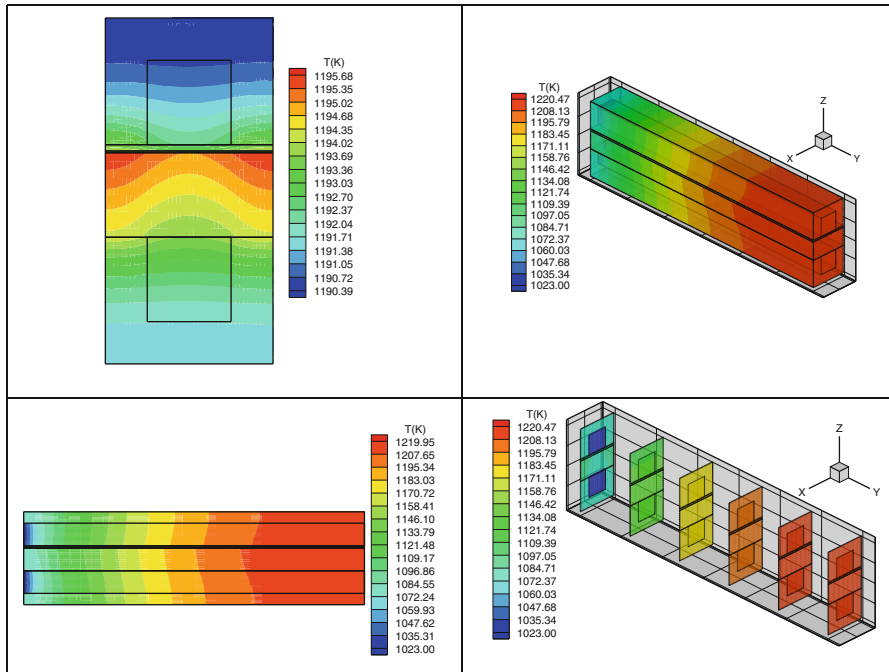


Fig. 32.5 Temperature field in a cell with SC

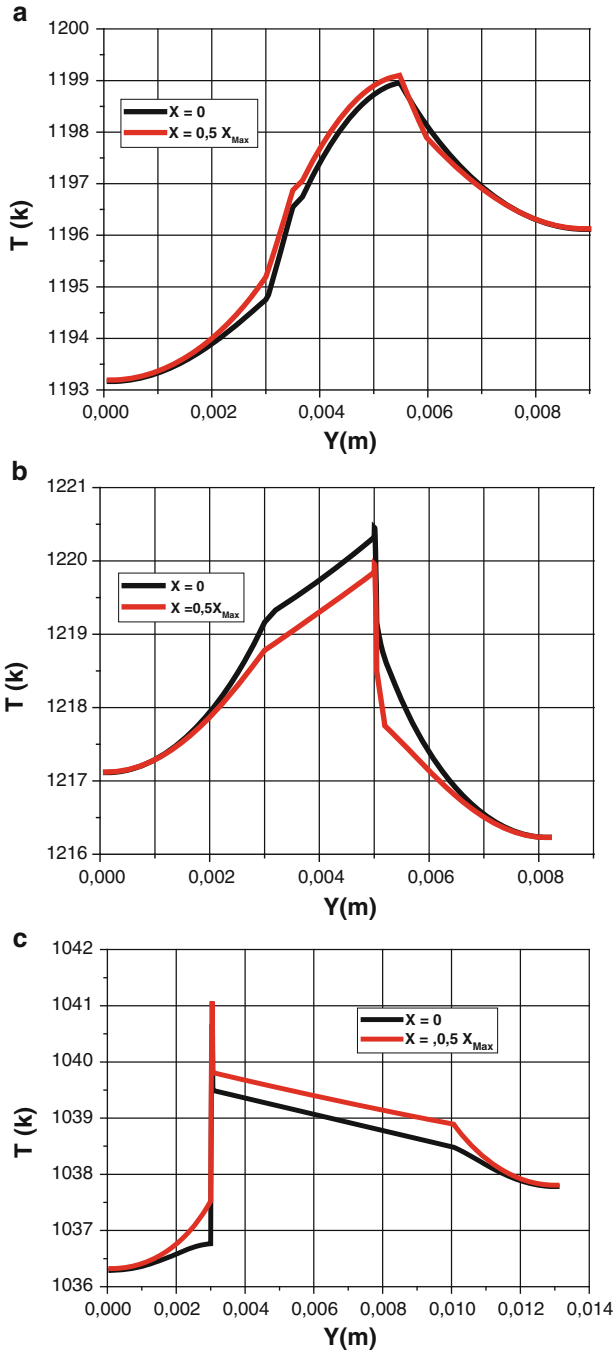


Fig. 32.6 Temperature evolution along the axis (OY) at ($x = 0, x = 0.5x_{max}$) to the stack output and for several configurations. SE, SC, SA

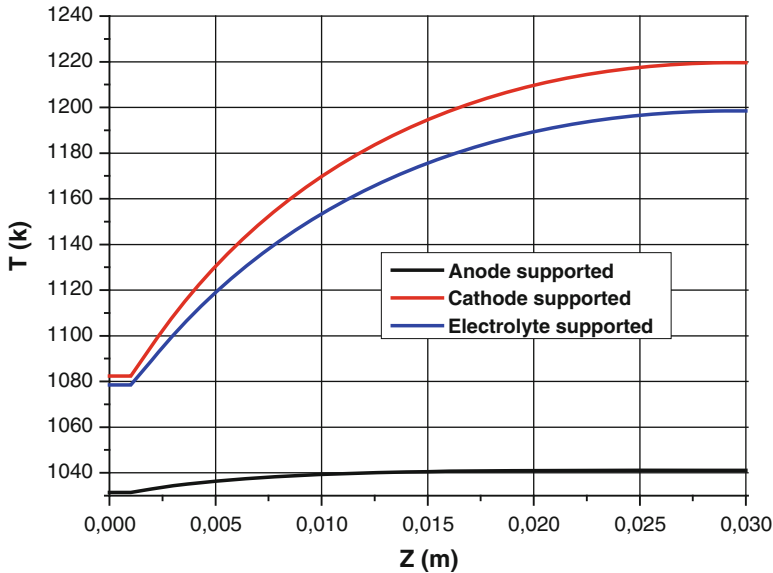


Fig. 32.7 Temperature evolution along the axis (OZ) at $(y = 0.5y_{\max}, x = 0.5x_{\max})$ to the stack output and for several configurations

superior distances of 17 mm). For the other geometric configurations, the temperature approaches its final value beyond a length of 3 in.

32.4 Conclusions

This heat transfer study evaluates and locates the values of maximum and minimum temperatures in an elementary SOFC by a three-dimensional and stationary model that recognizes only the Joule effect as a heat source.

The results show that the temperature elevation values are the largest in the case of a cell having a SC relative to other geometries. The low values are that of the cell having an SA. The highest temperature values are located in the electrolyte and at the upper part of the wings to the cathode of the cell in case of a cell having an SC. Contrarily, their localizations are at the electrolyte and at the anode lower part at the cell middle in the other case.

Based on the obtained result analysis, it appeared that the model studied for the SOFC stack, planar type, allowed us to understand the geometric configuration effect at fields and profile temperature values in all the elementary planar cell SOFC parts.

References

1. Kakaça S, Pramuanjaroenkijb A, Zhou XY (2007) A review of numerical modeling of solid oxide fuel cells. *Int J Hydrogen Energy* 32:761–786
2. Inui Y, Urata A, Ito N, Nakajima T, Tanaka T (2006) Performance simulation of planar SOFC using mixed hydrogen and carbon monoxide gases as fuel. *Energy Convers Manag* 47:1738–1747
3. Chaisantikulwat A, Diaz-Goano C, Meadows ES (2008) Dynamic modelling and control of planar anode-supported solid oxide fuel cell. *Comput Chem Eng* 32:2365–2381
4. Yang Y, Wang G, Zhang H, Xia W (2007) Computational analysis of thermo-fluid and electrochemical characteristics of MOLB-type SOFC stacks. *J Power Sources* 173:233–239
5. Ho TX, Kosinski P, Hoffmann AC, Vik A (2009) Numerical analysis of a planar anode-supported SOFC with composite electrodes. *Int J Hydrogen Energy* 34:3488–3499
6. Khaleel MA, Lin Z, Singh P, Surdoval W, Collin D (2004) A finite element analysis modeling tool for solid oxide fuel cell development: coupled electrochemistry, thermal and flow analysis in MARC. *J Power Sources* 130:136–148
7. Sun CL, Ou HC (2008) Numerical characterization of a microscale solid-oxide fuel cell. *J Power Sources* 185:363–373
8. Wang G, Yang Y, Zhang H, Xia W (2007) 3-D model of thermo-fluid and electrochemical for planar SOFC. *J Power Sources* 167:398–405
9. Zitouni B, Ben-Moussa H, Oulmi K, Saighi S, Chetehouna K (2009) Temperature field, H₂ and H₂O mass transfer in SOFC single cell: electrode and electrolyte thickness effects. *J Hydrogen Energy* 34:5032–5039
10. Abdenebi H, Zitouni B, Haddad D, Ben-Moussa H, George MA, Abdessemed S (2011) SOFC fuel cell heat production: analysis. *Energy Procedia* 6:643–650
11. Ben-Moussa H, Zitouni B, Oulmi K, Mahmah B, Belhamel M, Mandin P (2009) Hydrogen consumption and power density in a co-flow planar SOFC. *J Hydrogen Energy* 34:5022–5031
12. Haddad D, Abdenebi H, Zitouni B, Ben-Moussa H, Oulmi K (2013) Thermal field in SOFC fed by hydrogen: inlet gases temperature effect. *J Hydrogen Energy* 38:8575–8583
13. Oulmi K, Zitouni B, Ben-Moussa H, Abdenebi H, Andreadi GM (2011) Total polarization effect on the location of maximum temperature value in planar SOFC. *J Hydrogen Energy* 36:4236–4243
14. Chan SH, Ho HK, Tian Y (2002) Modelling of simple hybrid solid oxide fuel cell and gas turbine power plant. *J Power Sources* 109:111–120
15. Ni M, Leung MKH, Leung DYC (2007) Parametric study of solid oxide fuel cell performance. *Energy Convers Manag* 48:1525–1535
16. Chung TD, Hong WT, Chyou YP, Yu DD, Lin KF, Lee CH (2008) Efficiency analyses of solid oxide fuel cell power plant systems. *Appl Therm Eng* 28:933–941
17. Aguiar P, Adjiman CS, Brandon NP (2004) Anode-supported intermediate temperature direct internal reforming solid oxide fuel cell. I: Model-based steady-state performance. *J Power Sources* 138:120–136
18. Zhang X, Li G, Li J, Feng Z (2007) Numerical study on electric characteristics of solid oxide fuel cells. *Energy Convers Manag* 48:977–989
19. Zinovik I, Poulidakos D (2009) Modeling the temperature field in the reforming anode of a button-shaped solid oxide fuel cell. *Electrochim Acta* 54:6234–6243
20. Chyou YP, Chung TD, Chen JS, Shie RF (2005) Integrated thermal engineering analyses with heat transfer at periphery of planar solid oxide fuel cell. *J Power Sources* 139:126–140
21. Ramakrishna PA, Yang S, Sohn CH (2006) Innovative design to improve the power density of a solid oxide fuel cell. *J Power Sources* 158:378–384
22. Damm DL, Fedorov AG (2006) Reduced-order transient thermal modeling for SOFC heating and cooling. *J Power Sources* 159:956–967

23. Mahcene H, Ben-Moussa H, Bouguettaia H, Bechki D, Babay S, Meftah MS (2011) Study of species, temperature distributions and the solid oxide fuel cells performance in a 2-D model. *J Hydrogen Energy* 36:4244–4252
24. Otaa T, Koyama M, Wena C, Yamadab K, Takahashia H (2003) Object-based modeling of SOFC system: dynamic behavior of micro-tube SOFC. *J Power Sources* 118:430–439
25. Petruzzi L, Cocchi S, Fineschi F (2003) A global thermo-electrochemical model for SOFC systems design and engineering. *J Power Sources* 118:96–107
26. Suwanwarangkul R, Croiset E, Pritzker MD, Fowler MW, Douglas PL, Entchev E (2006) Mechanistic modelling of a cathode-supported tubular solid oxide fuel cell. *J Power Sources* 154:74–85
27. Sangtongkitcharoen W, Vivanpatarakij S, Laosiripojana N, Arpornwichanop A, Assabumrungrat S (2008) Performance analysis of methanol-fueled solid oxide fuel cell system incorporated with palladium membrane reactor. *Chem Eng J* 138:436–441
28. Wongchanapai S, Iwai H, Saito M, Yoshida H (2012) Selection of suitable operating conditions for planar anode-supported direct-internal-reforming solid-oxide fuel cell. *J Power Sources* 204:14–24
29. Wang Y, Yoshiba F, Watanabe T, Weng S (2007) Numerical analysis of electrochemical characteristics and heat/species transport for planar porous-electrode-supported SOFC. *J Power Sources* 170:101–110
30. Zhou L, Cheng M, Yi B, Dong Y, Cong Y, Yang W (2008) Performance of an anode-supported tubular solid oxide fuel cell (SOFC) under pressurized conditions. *Electrochim Acta* 53:5195–5198
31. Wang L, Zhang H, Weng S (2008) Modeling and simulation of solid oxide fuel cell based on the volume–resistance characteristic modeling technique. *J Power Sources* 177:579–589

Solid Oxide Fuel Cell Thermodynamic Study

Youcef Sahli^{1,2,*}, Bariza Zitouni³, Hocine Ben-Moussa¹

¹*Department of Mechanical Engineering, Faculty of Technology. University of Batna 2, Algeria.*

²*Unité de Recherche en Energies Renouvelables en Milieu Saharien, URERMS, Centre de Développement des Energies Renouvelables, CDER 01000, Adrar, Algérie,*

³*Department of Food Technology. Institute of Veterinary Sciences and Agricultural Sciences. University of Batna 1, Algeria.*

e-mail: sahli.sofc@mail.com/y.sahli@urerms.dz, zitounibariza@yahoo.fr, h2sofc@gmail.com

Abstract: The aim of this work is the solid oxide fuel cell (SOFC) thermodynamic study. Particular attention is given to the electric power optimization. The Nernst potential and the over-potentials that are due to the concentration polarization, activation polarization and to the Ohm polarization represent the fuel cell potential. A FORTRAN language program was developed locally for the cell model simulation.

From the result analysis, it appears that the developed model allowed understanding the operating condition effects on both potential and power density values. The obtained results show that the cell potential and the power density are proportional to the operating temperature changes and to the oxygen concentration in the oxidant, by cons, they are inversely related to the supply pressure changes, fuel moisture and to the electrolyte thickness.

Keywords: SOFC, power density, over-potential, thermodynamic.

1. Introduction

Among the fuel cell types, solid electrolyte cell (SOFC) delivers a large electric power. It is considered as a promising technology for its great global performance and its operating ability by several fuels.

The electrochemical behavior remains the main research focus for the fuel cell development. The complexity and the multitude of phenomena involved in the fuel cell operation make its experimental study difficult. Thus, researchers incite to develop numerical simulation programs in order to predict better the phenomena behavior that intervenes and minimizes the costly experimental experiences. In this context, several studies have been addressed previously. Yang et al. [1] have developed an electrochemical model for solid oxide fuel cells to a supported anode (SOFC-AS) to analyze and improve the cell design. The presented model takes into

account three over-potential types: activation, Ohm and concentration. They showed that the activation and Ohm over-potentials are the main responsible cause for the tension loss. Al Zahrani et al. [2] have presented and used a model for predicting the conventional SOFC performance under various operating conditions and design for low operating temperatures.

Verma et al. [3] have studied the possibility of supplying the solid oxide fuel cells with reformed fuels. This can be beneficial because they are cheap compared to pure hydrogen. A biomass fuel can be easily modeled as a reformed fuel because it can be converted into H_2 and CO using the gasification or the bio-degradation. This produced composition is mainly made in a gas reformer situated before the cell. Saebea et al. [4] have performed a study to evaluate the theoretical performance of a single cell of an SOFC integrated with a steam reforming process using three different renewable fuels: ethanol, glycerol and biogas. They studied the main operating parameter effects on the hydrogen production. Tippawan et al. [5] have applied a thermodynamic concept to identify a reforming process suitable for an SOFC supplied with ethanol. Three different reforming technologies are considered, specifically, steam reforming, partial and direct oxidation reforming. They showed the effects of the main operating parameters on the distribution of reforming products, such as (H_2 , CO, CO_2 and CH_4) in order to identify the best process for reforming ethanol for SOFC applications.

This study is a continuation of our previous ones [6-15]. In [6], the thermoelectric performance of an intermediate temperature SOFC has been presented by a one-dimensional model for the parallel direction to the gas flow using the finite volume method. The heat is generated by the Joule's effect and the loss due to the internal chemical reaction. In the reference [11], the power density and the hydrogen consumption of a planar SOFC are studied according to input parameters; such as the operating temperature, the operating pressure, the flow rates and the mass fractions by a one-dimensional electro-dynamic model using the finite difference method.

In the reference [7], the hydrogen and water distribution depending on the anode thickness in the SOFC heart has been realized by a two-dimensional model based on the finite difference method in the perpendicular plane to the reactive gas flow directions. Reference [8] shows a two-dimensional numerical study of the temperature fields in the perpendicular plane to the gas flow of a planar SOFC heart at a supported anode under the chemical reactions effect.

The reference [9] represents a study of the location and determination of the maximum temperature values in all solid and porous parts (electrolyte, interconnectors, anode and cathode) of the planar SOFC at a supported anode or a supported electrolyte, in a perpendicular plane to the gas flow under the polarization effects: Ohmic, activation and concentration. Reference [10] shows an analysis of the heat production and distribution in all solid and porous

parts of the planar SOFC at a supported anode under the effect of various over-potentials (Ohmic, activation, concentration and chemical), in the perpendicular plane to the gas flow direction in order to describe the thermal behavior during the operation. The reference [12] represents a comparative study of the heat distribution depending on the gas supply temperature between two planar SOFC configuration types. The first has a supported anode and the second has a supported electrolyte for the cases with and without the total heat source (Ohmic, concentration, activation and chemical), in all solid and porous parts (electrolyte, interconnectors, anode and cathode) of the planar SOFC. In [13], the molar fractions effect of the fuel constitutive chemical species (CH_4 , H_2O , CO , CO_2 and H_2) on the heat distribution is studied in a planar SOFC at the supported anode in a two-dimensional environment and perpendicular to the gas flow direction. Heat generation/absorption due to the direct internal reforming in all solid and porous parts of the cell are discussed. The reference [14] presents a study of the produced heat behavior by the direct internal reforming depending on the temperature and pressure of the supply fuel in all parts of the planar SOFC at a supported anode in the perpendicular plane to the gas flow.

In the reference [15], a comparative study of the heat generation in the three geometric configuration types of the planar SOFC (supported anode, supported cathode and supported electrolyte) in a three-dimensional environment is realized. The heat production is caused by the Joule's effect.

In this paper, an SOFC thermodynamic study is presented, while paying particular attention to optimize the produced power density by the fuel cell. Studied parameters are the operating temperature, the operating pressure, the water and oxygen concentrations and the electrolyte thickness.

2. Thermodynamic Modeling

2.1. Fuel Cell Performance

SOFC tension is defined by the difference between the theoretical Nernst potential and the sum of different generated tension losses by several phenomena:

$$E = E_{Nernst} - Tension\ losses \quad (1)$$

' E ' (V) is the SOFC tension, ' E_{Nernst} ' (V) is the Nernst potential that is given by the following equation:

$$E_{Nernst} = E_0 + \frac{R.T}{n.F} \cdot \left[\ln \left(\frac{P_{H_2} \cdot P_{O_2}^{0.5}}{P_{H_2O}} \right) \right] \quad (2)$$

Where ' R ' ($\text{Kg.m}^{-1}.\text{s}^{-1}$) is the gas constant, ' T ' (K) is the operating temperature, ' n ' is the transfer electron number, ' F ' (C.mol^{-1}) is the Faraday number, ' P ' (bar) is the partial pressure of each species (hydrogen, oxygen and water steam) and ' E_0 ' (V) is the ideal potential. It is defined by a first order polynomial as a temperature function given in Equation (3). [16-24]:

$$E_0 = a + b.T \tag{3}$$

Where ' a ' (V) and ' b ' (V.K^{-1}) are constant, they are defined by the Table 1:

TABLE 1. Ideal potential coefficients; ' a ' and ' b '.

a [V]	b [V.K ⁻¹]	References
1,253	-2,4516.10 ⁻⁴	[16-24]

The tension losses that are defined by equation (1) include three loss types; Ohmic, activation and concentration.

2.2. Ohm Losses

The Ohmic losses are due to the encountered resistance by the ionic current passing through the electrolyte and due to the encountered resistance by the electrons that traversed the electrodes and the electric circuit. They are mainly due to the electrolyte. They can be reduced by decreasing the electrolyte thickness and improving the ionic conductivity. However, the electrolyte and electrodes obey the Ohm's law. The Ohmic losses are defined by the Equation (4) [3,9,25-31]:

$$\eta_{ohm} = i.r_j \tag{4}$$

Where ' i ' (A.m^{-2}) is the current density and ' r ' is the electrical resistance of each component ' j ' (anode, cathode and electrolyte), which is defined for each component by the ratio of the element thickness ' e ' (m) and his electrical conductivity ' σ ' ($\Omega^{-1}.\text{cm}^{-1}$) in equation (5). The electrical conductivity of each element is given by the standard materials ((YSZ) for the electrolyte, (LSM) for the cathode and (Ni-YSZ) for the anode)n as shown in Table 2.

$$r = \frac{e}{\sigma} \tag{5}$$

TABLE 2. The electrical conductivity of each component of the cell.

Components	σ [$\Omega^{-1} \cdot \text{cm}^{-1}$]	References
Electrolyte	$\sigma_{ele} = 3,34 \cdot 10^4 \cdot e^{\left(\frac{-10300}{T}\right)}$	[3,9,15,25-31]
Cathode	$\sigma_{cat} = \frac{4,2 \cdot 10^7}{T} \cdot e^{\left(\frac{-1200}{T}\right)}$	[3,9,15,25-31]
Anode	$\sigma_{an} = \frac{9,5 \cdot 10^7}{T} \cdot e^{\left(\frac{-1150}{T}\right)}$	[3,9,15,25-31]

2.3. Activation Losses

The activation losses are present when the electrochemical reaction rate at the electrode surface is controlled by the deceleration kinetics for this electrode. In other words, the activation polarizations are directly related to the electrochemical reaction rate. In order that a chemical or electrochemical reaction can start in both cases, the reactants must exceed an activation barrier. In the electrochemical reaction case where the activation losses ' η_{act} ' (V) exceed (50-100 mV), they are described by Equation (6). [5,17,18,21,23,32]:

$$\eta_{Act,j} = \frac{R.T}{\alpha.n.F} \cdot \sinh^{-1} \left(\frac{i}{2.i_{0,j}} \right) \quad (6)$$

Where ' α ' is the electronic transfer coefficient or the charge transfer coefficient and ' i_0 ' ($\text{A} \cdot \text{m}^{-2}$) is the exchange current density for each electrode ' j ' (anode or cathode), it is usually given by Equation (7) [5,17,18,21,23,32]:

$$i_{0,j} = k_j \cdot \exp \left(-\frac{E_j}{R.T} \right) \quad (7)$$

Where ' E_j ' ($\text{J} \cdot \text{mol}^{-1}$) and ' k_j ' ($\text{A} \cdot \text{m}^{-2}$) are the pre-exponential factor and the activation energy of each electrode ' j ' (anode and cathode), they are represented respectively by a first order polynomial as a temperature function and a constant (see Table 3).

TABLE 3. Values and expressions of the pre-exponential factor and the activation energy.

Anode		Cathode		References
$k_{an} [A.m^{-2}]$	$E_{an} [J.mol^{-1}]$	$k_{cat} [A.m^{-2}]$	$E_{cat} [J.mol^{-1}]$	
$6,54. 10^{11} \cdot \frac{R.T}{2.F}$	$1,4. 10^5$	$2,35. 10^{11} \cdot \frac{R.T}{2.F}$	$1,37. 10^5$	[5,17,18,21,23,32]

2.4. Concentration Losses

At the electrodes, the concentration losses are the potential losses due to the system inability to maintain the initial reactant concentrations. Many factors can contribute: the low gas diffusion through the porous electrodes, the reactant or product dissolution in the electrodes and the reactant or product diffusions in the reaction site. These losses may be expressed by the following simplified equation [33,34]:

$$\eta_{Conc,j} = -\frac{R.T}{n.F} \cdot \ln\left(1 - \frac{i}{i_{l,j}}\right) \quad (8)$$

Where ' i_l ' ($A.m^{-2}$) is the limiting current density of each electrode ' j ' (anode and cathode) that are represented by constants (see Table 4).

TABLE 4. Limiting current density values for each electrode.

Anode [$A.m^{-2}$]	Cathode [$A.m^{-2}$]	References
$2,99. 10^4$	$2,16. 10^4$	[33,34]

2.5. Code Structure

After collecting the equations that represent the physical model, realization procedure of a calculator code in FORTRAN will begin. This code consists of four steps; the first step represents the data reading which consists of the following parameters: the ideal potential coefficients ' a ' and ' b ', the operating temperature ' T ' and the supply pressure ' P ', the concentrations of the three species ' X_{H_2} ', ' X_{H_2O} ' and ' X_{O_2} ', the limiting current density of each electrode ' $i_{l,an}$ ' and ' $i_{l,cat}$ ', the transfer electron number ' n ', the Faraday number ' F ' and the thickness of each cell heart component ' e_{an} ', ' e_{cat} ' and ' e_{ele} '. The second step concerns the variable calculations that are not current density functions: the ideal and Nernst potentials ' E_0 ' and ' E_{Nernst} ', the electrical conductivities of the anode ' σ_{an} ', the cathode ' σ_{cat} ' and the electrolyte

' σ_{ele} ', the electrical resistances of the electrolyte ' r_{ele} ' and the electrodes ' r_{an} ' and ' r_{cat} ', the pre-exponential factors of the anode ' K_{an} ' and the cathode ' K_{cat} ' and the anode and cathode exchange current densities ' $i_{0,an}$ ' and ' $i_{0,cat}$ '. The third step concerns the variable calculations that are current density functions which are: the activation, the concentration and the Ohmic losses of each component ' $\eta_{act,an}$ ', ' $\eta_{act,cat}$ ', ' $\eta_{conc,an}$ ', ' $\eta_{conc,cat}$ ', ' $\eta_{Ohm,an}$ ', ' $\eta_{Ohm,cat}$ ' and ' $\eta_{Ohm,ele}$ ', the cell tension ' E ' and the cell power density ' P_d ' for each current density value. Finally, the fourth step is the result display. The calculator code chart is given by the Figure 1.

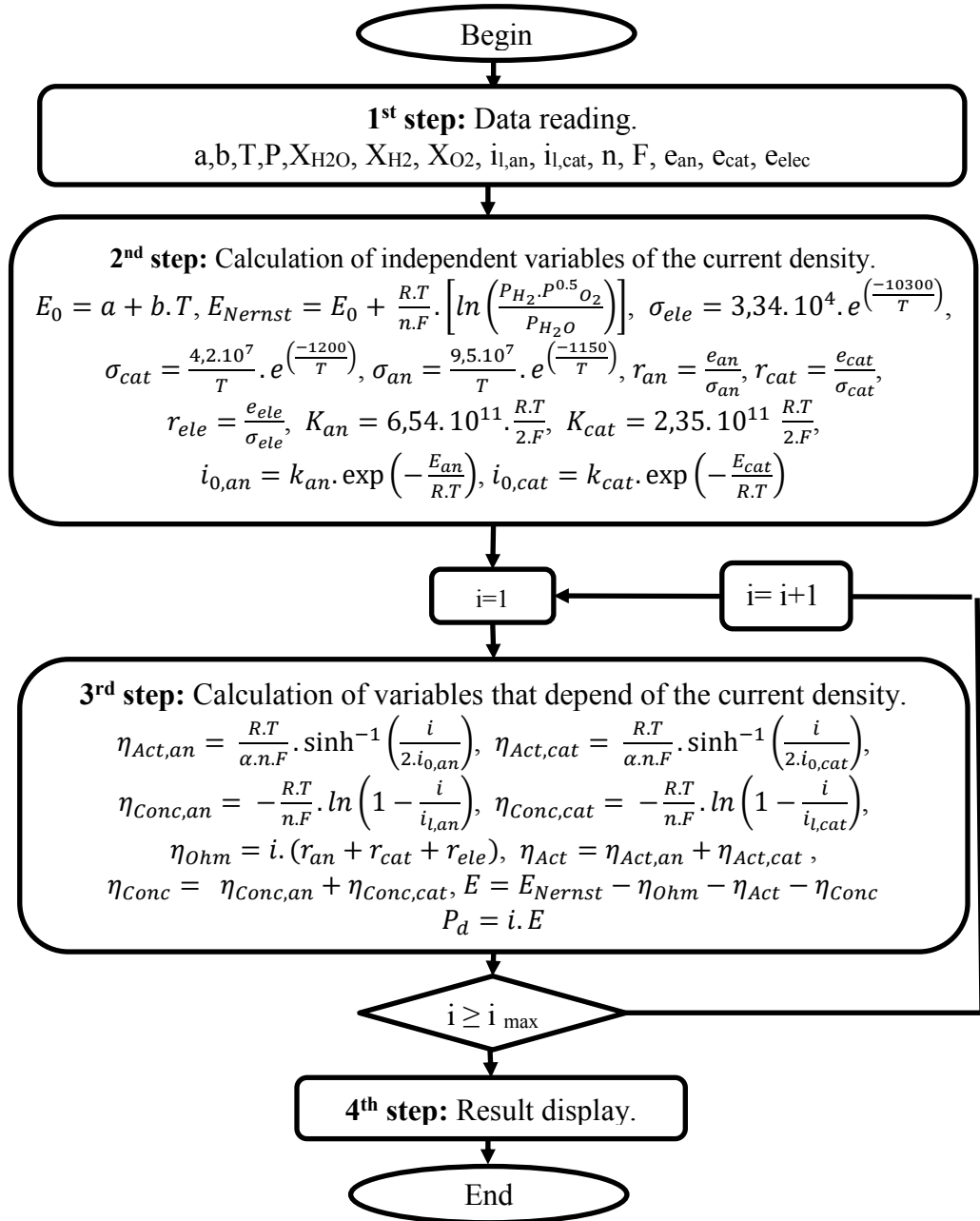


FIGURE 1. Resolution algorithm.

3. Results and Discussion

After writing a computer Fortran language program based on the previously presented model [3,5,9,16-32], all object curves in our study are made using a spreadsheet type visualization software to plot these obtained curves.

The results are presented in five classes. In the first class, the impact of each polarization on the total polarization is demonstrated. In the second class, the explanation of the operating temperature effect on the cell potential and power density is presented. While in the third class, the supply pressure effect on the potential and the power density is discussed. As to the fourth class, the water steam and oxygen concentration contributions in the variation of the cell potential and power density are illustrated. Finally, the fifth class concerns the obtained results analysis with the different electrolyte thickness dimensions. All parameter values that are used for obtaining these results are given in Table 5.

TABLE 5. Used parameter values in the simulation.

Parameters	Class 1	Class 2	Class 3	Class 4-a	Class 4-b	Class 5
T , (k)	1073	973,1073,1173	1073	1073	1073	1073
P , (bar)	1	1	1,2,3	1	1	1
X_{H_2O}	0.05	0.05	0.05	0.03,0.06,0.09	0.05	0.05
X_{H_2}	0.95	0.95	0.95	0.97,0.94,0.91	0.95	0.95
X_{O_2}	0.21	0.21	0.21	0.21	0.21,0.5,1	0.21
e_{an} , (μm)	100	100	100	100	100	100
e_{cat} , (μm)	100	100	100	100	100	100
e_{ele} , (μm)	50	50	50	50	50	5,50,500

3.1. Impact of each Polarization on the Total Polarization

Polarization and power density curves are obtained in the case of a solid oxide fuel cell at supported electrodes. The electrolyte and electrodes are supposed to be made with standard materials: (Ni-YSZ) for the anode, (LSM) for the cathode and (YSZ) for the electrolyte. Cell heart element thicknesses are (100 μm) for the electrodes and (50 μm) for the electrolyte. The cell is supplied with the humidified hydrogen as fuel ($X_{H_2O} = 0,05$) and the air as an oxidizer

($X_{O_2} = 0,21$). Fuel and air pressure values are the same (1bar). The operating temperature is assumed to be the same and equal to (1073 K). Three distinct loss types are shown in Figure 2. The first is the greatest loss. It is generated by the Ohmic polarization and localized mainly at the electrolyte. The second potential drop is due to the activation over-potential. The third is the smallest loss; it brings up the reactive diffusion problem to the catalytic sites. In addition, the cell potential maximum value reached in this simulation is (0,7731 V). It is alone of Nernst to a nil current density.

The maximum current density is about (17000 A.m^{-2}) which is suitable for very low potential and very large exothermic. The maximum produced power density by the cell is upper to (3027 W.m^{-2}); it is defined by a current density of (8390 A.m^{-2}). In the minimum current density values, the power density is low. It increases hyperbolically in relation to the current density up to its maximum value at (8390 A.m^{-2}), then a hyperbolic collapse of the power density that is resulted by the different over-potentials.

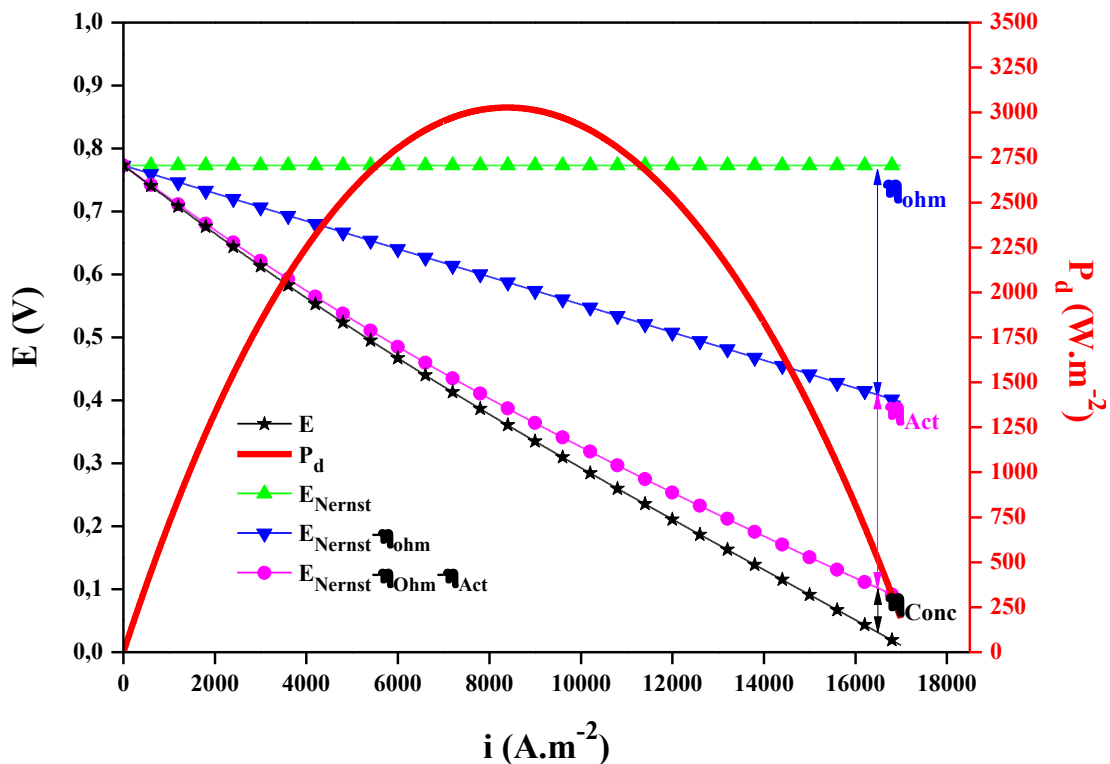


FIGURE 2. SOFC tension, power density and all over-potentials curves.

3.2. Operating Temperature Influence

The operating temperature effect on the polarization and the power density values is shown in Figure 3. The fuel is the humidified hydrogen ($X_{H_2O} = 0,05$), and the air is the oxidant ($X_{O_2} = 0,21$). Supply pressure is common for the fuel and the air. It is identical to one bar. The operating temperatures are supposed similar to (973, 1073 and 1173 K). In addition, the important Nernst potential noticed among the three carried out tests is the one which suits with an operating temperature equal to (973 K). The minor Nernst potential value is recorded for an operating temperature identical to (1173 K). Reasonably, the Nernst potential that corresponds to an operating temperature similar to (1073 K) is between the two Nernst potentials previously exposed. The highest values of the real potential and the power density belong to the cell operating at a temperature similar to (1173 K). The lowest values of the power density and the real potential are recorded for the cell operating at a temperature equivalent to (973 K). However, an operating temperature of (1073 K) leads to power density and real potential average values, which demonstrates that the Nernst potential is inversely proportional to the cell operating temperature. Hence, the real potential is proportional to the cell operating temperature. In other words, all the losses are inversely proportional to the cell operating temperature, which leads directly to a potential and a power density proportional to the operating temperature.

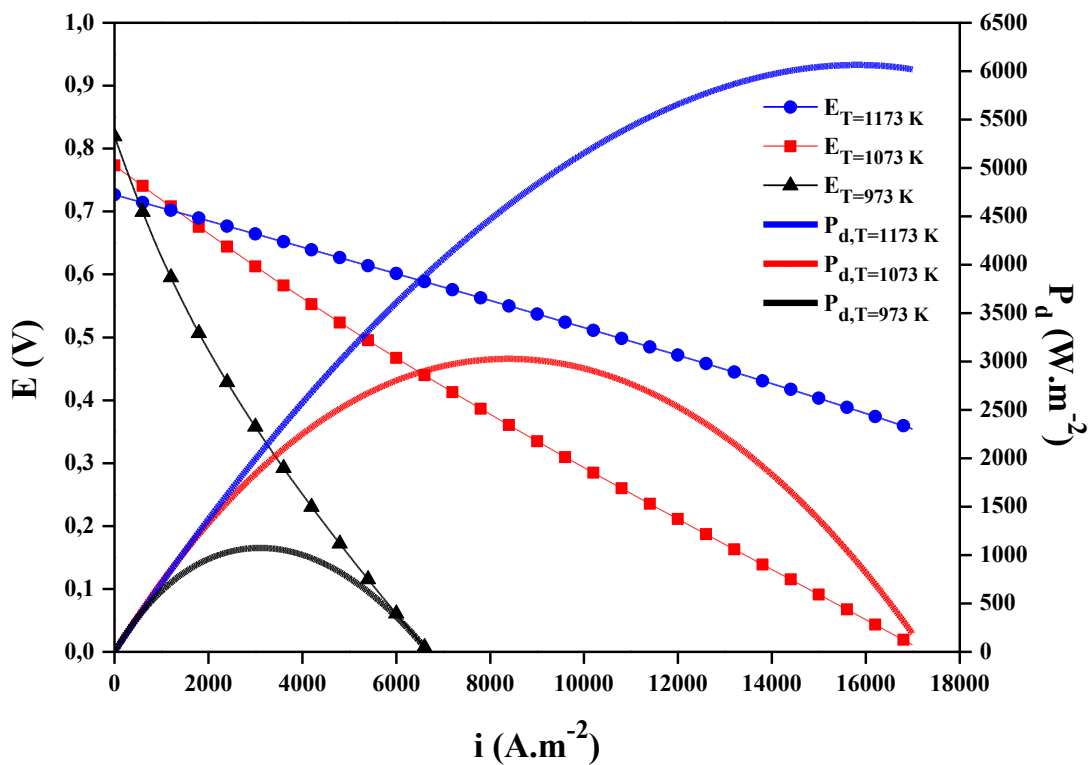


FIGURE 3. Potential and power density evolutions according to the operating temperature.

3.3. Supply Pressure Effect

The operating pressure effect on the polarization and power density curves, which are obtained by the model simulation, is shown in Figure 4. The supply pressures are common for both gasses; they are recognized by (1, 2 and 3 bars). In addition, the highest values of Nernst potential, real potential and power density noticed in the three tests belong to the cell having a supply pressure identical to one bar. While the lowest values of Nernst potential, real potential and power density recorded in the realized simulation tests belong to the cell that has a supply pressure of four bars. Logically, the Nernst potential, real potential and power density that correspond to an intermediate air and fuel supply pressure have intermediate values which are between the values of the two Nernst potentials, two real potentials and two power densities presented previously. It means that the Nernst potential and power density are inversely proportional to the cell operating pressure. It is because the change in the cell operating pressure does not influence all the over-potentials.

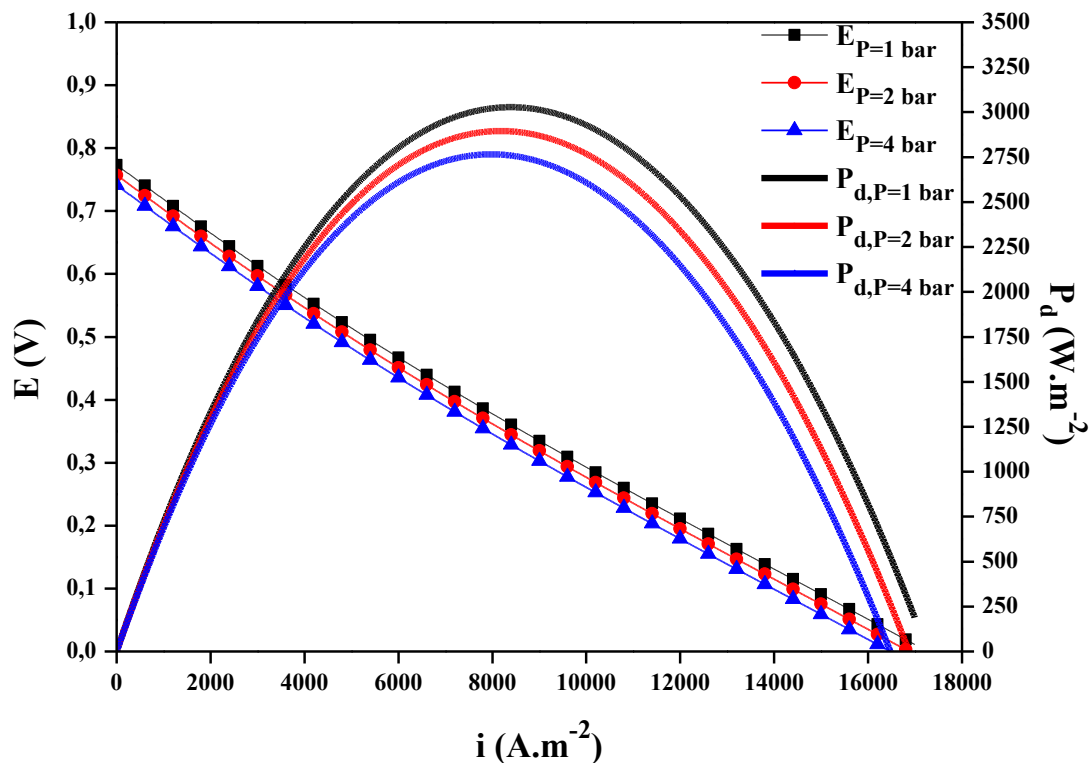


FIGURE 4. Potential and power density evolutions according to the operating pressure.

3.4. Steam and Oxygen Concentration Effects

Figure 5 shows the effect of the steam content in the fuel and the oxygen concentration in oxidant on the different polarizations and on the delivered cell power density.

The cell operating temperature is identical to (1073 K). Hydrogen humidification rates are ($X_{H_2O} = 0,03, 0,06$ and $0,09$). The oxygen concentration rates in the oxidizer are ($X_{O_2} = 0,21, 0,50$ and $1,00$). The highest values of Nernst potential, real potential and power density noticed in the performed tests on the various water contents are the values that fit a fuel humidity rate of (0,03). Whereas the smallest values of the same parameters are recorded for the cell that has a fuel humidification rate of (0,09). The Nernst potential, real potential and power density corresponding to a middle fuel humidification rate have average values that are between the two Nernst potentials, two real potentials and two power density cited previously. It means that the Nernst potential, real potential and power density are inversely proportional to the fuel humidification rate. For an SOFC cell that operates by the pure oxygen as oxidizer, the values of Nernst potential, real potential and power density are maximal. These parameters take minimal values for the air as an oxidizer of an oxygen rate of (0,21). Logically, the Nernst potential, real potential and power density correspond to an oxygen rate in the oxidizer of (0,50). They have intermediate values which are between the two Nernst potentials, two real potentials and two power densities discussed previously. The Nernst potential and real potential are proportional to the oxygen concentration rate in the oxidant. In addition, the cell power density is proportional to the oxygen concentration in the oxidant.

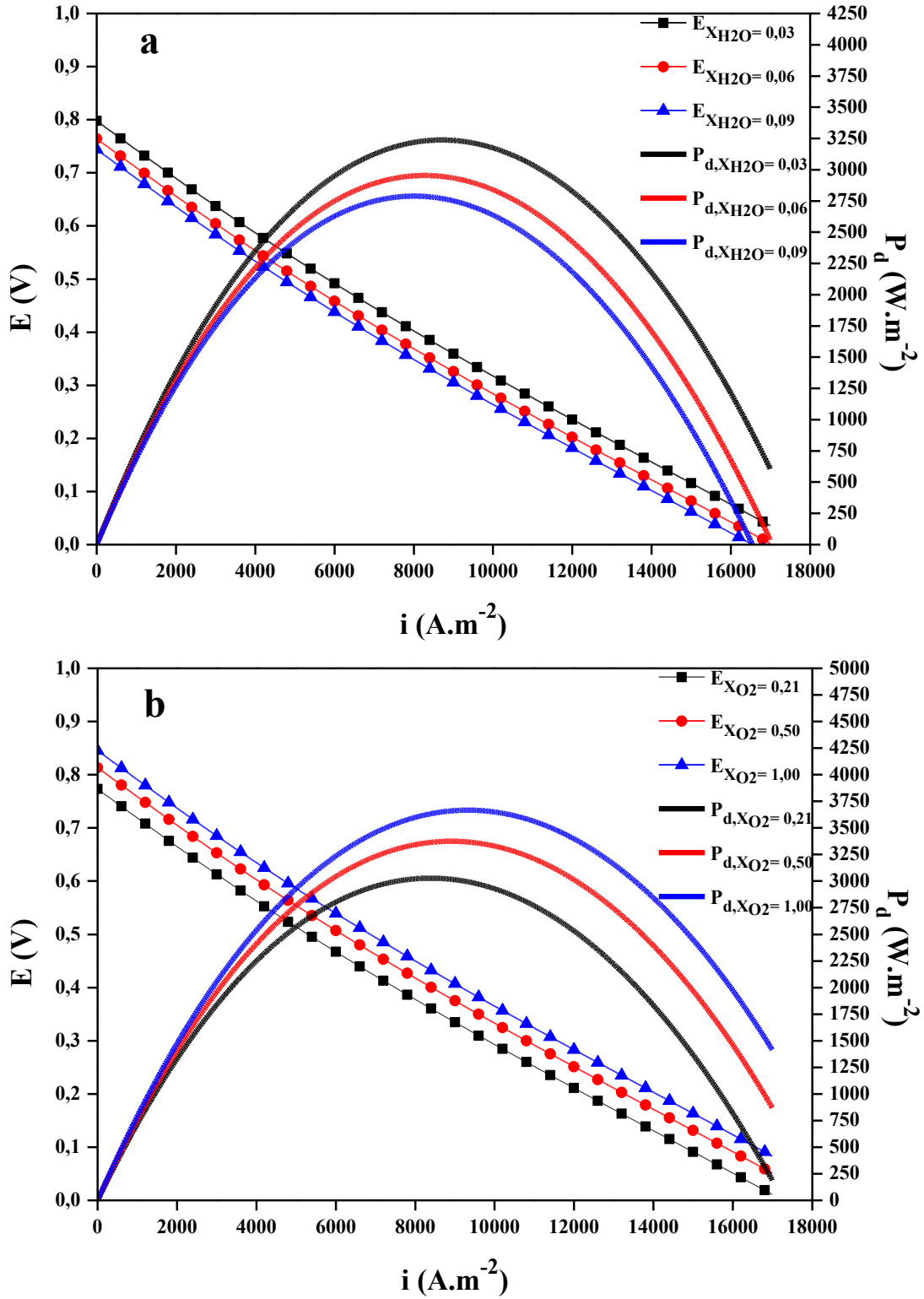


FIGURE 5. Potential and power density evolution according to the H₂O and O₂ concentration.
 a) H₂O concentration effect, b) O₂ concentration effect.

3.5. Electrolyte Thickness Effect

The electrolyte thickness effect on the polarization and power density curves is shown in Figure 6. The fuel is a humidified hydrogen ($X_{H_2O} = 0,05$) and the oxidant is the air ($X_{O_2} = 0,21$). Supply pressure values are common for the fuel and air (1 bar). The operating temperature is equal to (1073 K). Electrolyte thicknesses are taken equivalent to (5, 50 and 500 μm). The obtained values of the ideal and Nernst potentials in all the realized tests according to several electrolyte thicknesses are the same, which demonstrates that the electrolyte dimensions do not affect the Nernst and ideal potentials. Highest values of the real potential and the power density are obtained in the case of the smallest electrolyte thickness. However, the lowest values of the real potential and the power density are identical to the produced values by the cell having the largest electrolyte thickness. Logically, the real potential and power density values corresponding to a medium electrolyte thickness are between the values of the two real potentials and the two power densities presented by the two electrolyte dimensions mentioned earlier. It confirms that the real potential and the power density are inversely proportional to the electrolyte thickness.

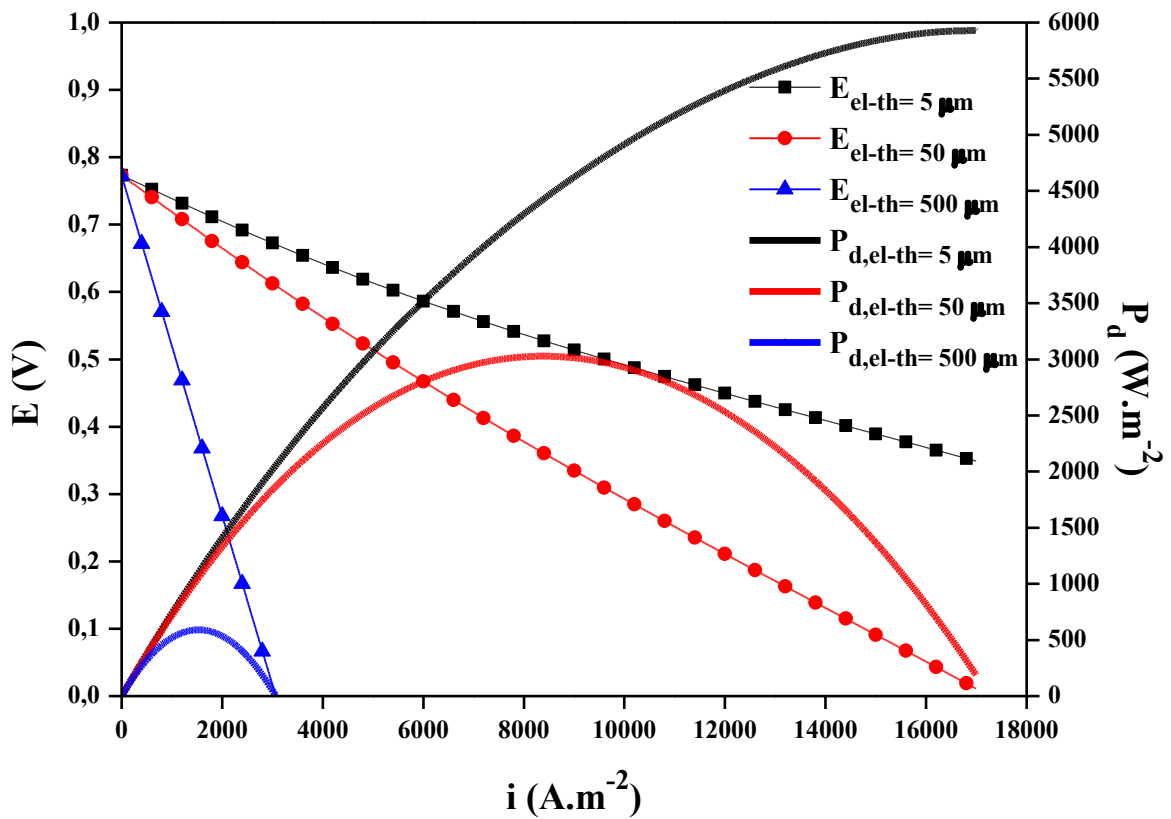


FIGURE 6. Potential and power density evolution according to electrolyte thickness.

4. Conclusions

SOFC is an electrochemical device. It serves to convert the chemical energy to the electrical and thermal energies. This study is based on the SOFC thermodynamic performance study. Particular attention is given to the delivered power density optimization. Mathematical equations are solved using a program in the FORTRAN language that is developed locally. Based on the obtained result analysis, it appeared that the developed model by combining the several sub-models can be a design tool. The main results are:

- The greatest loss is only generated by the Ohmic polarization. The smallest produced loss is due to the reactant diffusion in the catalytic sites. It can be neglected compared to the activation and Ohmic losses.
- SOFC potential and power density are proportional to the operating temperature and to the oxidant oxygen concentration.
- The potential and the power density are inversely proportional to the supply pressure, to the fuel humidification and to the electrolyte thickness.

References

- [1] S. Yang, T. Chen, Y. Wang, Z. Peng, W.G. Wang, Electrochemical Analysis of an Anode-Supported SOFC, *International Journal of Electrochemical Science*, **8**(2), (2013), 2330-2344.
- [2] A. AlZahrani, I. Dincer, X. Li, A performance assessment study on solid oxide fuel cells for reduced operating temperatures, *International Journal of Hydrogen Energy*, **40**(24), (2015), 7791-7797.
- [3] J.K. Verma, A. Verma, A.K. Ghoshal, Performance analysis of solid oxide fuel cell using reformed fuel, *International Journal of Hydrogen Energy*, **38**(22), (2013), 9511-9518.
- [4] D. Saebea, S. Authayanun, Y. Patcharavorachot, W. Paengjuntuek, A. Arpornwichanop, Use of different renewable fuels in a steam reformer integrated into a solid oxide fuel cell: Theoretical analysis and performance comparison, *Energy*, **51**(1), (2013), 305-313.

- [5] P. Tippawan, A. Arpornwichanop, Energy and exergy analysis of an ethanol reforming process for solid oxide fuel cell applications, *Bioresource Technology*, **157**(1), (2014), 231-239.
- [6] B. Zitouni, H. Ben Moussa, K. Oulmi, Studying on the increasing temperature in IT-SOFC: Effect of heat sources, *Journal of Zhejiang University SCIENCE A*, **8**(09), (2007), 1500-1504.
- [7] B. Zitouni, H. Ben Moussa, K. Oulmi, S. Saighi, K. Chetehouna, Temperature field, H₂ and H₂O mass transfer in SOFC single cell: Electrode and electrolyte thickness effects, *International Journal of Hydrogen Energy*, **34**(11), (2009), 5032-5039.
- [8] B. Zitouni, G.M. Andreadis, H. Ben Moussa, H. Abdenebi, D. Haddad, M. Zeroual, Two-dimensional numerical study of temperature field in an anode supported planar SOFC: Effect of the chemical reaction, *International Journal of Hydrogen Energy*, **36**(6), (2011), 4228-4235.
- [9] K. Oulmi, B. Zitouni, H. Ben Moussa, H. Abdenebi, G.M. Andreadis, Total polarization effect on the location of maximum temperature value in planar SOFC, *International Journal of Hydrogen Energy*, **36**(6), (2011), 4236-4243.
- [10] H. Abdenebi, B. Zitouni, D. Haddad, H. Ben Moussa, M.A. George, S. Abdessemed, SOFC fuel cell heat production: Analysis, *Energy Procedia* **6**(1), (2011), 643-650.
- [11] H. Ben Moussa, B. Zitouni, K. Oulmi, B. Mahmah, M. Belhamel, P. Mandin, Hydrogen consumption and power density in a co-flow planar SOFC, *International Journal of Hydrogen Energy*, **34**(11), (2009), 5022-5031.
- [12] D. Haddad, H. Abdenebi, B. Zitouni, H. Ben Moussa, K. Oulmi, Thermal field in SOFC fed by hydrogen: Inlet gases temperature effect, *International Journal of Hydrogen Energy*, **38**(20), (2013), 8575-8583.
- [13] H. Abdenebi, B. Zitouni, H. Ben Moussa, D. Haddad, Thermal field in SOFC fed by CH₄: Molar fractions effect, *Journal of the Association of Arab Universities for Basic and Applied Sciences*, **17**(1), (2015), 82-89.
- [14] H. Abdenebi, B. Zitouni, H. Ben Moussa, D. Haddad, H. Zitouni, Y. Sahli, Inlet Methane Temperature Effect at a Planar SOFC Thermal Field Under Direct Internal Reforming Condition, In I. Dincer, C. Ozgur Colpan, O. Kizilkan and M. Akif Ezan

(eds), *Progress in clean energy volume II: Novel Systems and Applications*, Switzerland: Springer, 567-581 (2015).

[15] Y. Sahli, B. Zitouni, H. Ben Moussa, H. Abdenebi, Three-Dimensional Numerical Study of the Heat Transfer on the Planar Solid Oxide Fuel Cell: Joule's Effect, In I. Dincer, C. Ozgur Colpan, O. Kizilkan and M. Akif Ezan (eds), *Progress in clean energy volume I: Analysis and Modeling*, Switzerland: Springer, 449-461 (2015).

[16] A. Arpornwichanop, Y. Patcharavorachot, S. Assabumrungrat, Analysis of a proton-conducting SOFC with direct internal reforming, *Chemical Engineering Science*, **65**(1), (2010), 581-589.

[17] Y. Patcharavorachot, N.P. Brandon, W. Paengjuntuek, S. Assabumrungrat, A. Arpornwichanop, Analysis of planar solid oxide fuel cells based on proton-conducting electrolyte, *Solid State Ionics*, **181**(35-36), (2010) 1568-1576.

[18] Y. Patcharavorachot, W. Paengjuntuek, S. Assabumrungrat, A. Arpornwichanop, Performance evaluation of combined solid oxide fuel cells with different electrolytes, *International Journal of Hydrogen Energy*, **35**(9), (2010), 4301-4310.

[19] M. Ni, An electrochemical model for syngas production by co-electrolysis of H₂O and CO₂, *Journal of Power Sources*, **202**(1), (2012), 209-216.

[20] R.K. Akikur, R. Saidur, H.W. Ping, K.R. Ullah, Performance analysis of a co-generation system using solar energy and SOFC technology, *Energy Conversion and Management*, **79**(1), (2014), 415-430.

[21] M. Andersson, H. Nakajima, T. Kitahara, A. Shimizu, T. Koshiyama, H. Paradis, J. Yuan, 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*, **77**(1), (2014), 1008-1022.

[22] B.H. Choi, H.J. Sung, Effect of a shielded slot on a planar solid oxide fuel cell, *International Journal of Hydrogen Energy*, **39**(24), (2014), 12913-12923.

[23] M. Saidi, F. Siavashi, M.R. Rahimpour, Application of solid oxide fuel cell for flare gas recovery as a new approach: a case study for Asalouyeh gas processing plant, Iran, *Journal of Natural Gas Science & Engineering*, **17**(1), (2014), 13-25.

[24] K. Zheng, L. Li, M. Ni, Investigation of the electrochemical active thickness of solid oxide fuel cell anode, *International Journal of Hydrogen Energy*, **39**(24), (2014), 12904-12912.

- [25] J.R. Ferguson, J.M. Fiard, R. Herbin, Three-dimensional numerical simulation for various geometries of solid oxide fuel cells, *Journal of Power Sources*, **58**(1), (1996), 109-122.
- [26] M.M. Hussain, X. Li, I. Dincer, Mathematical modeling of planar solid oxide fuel cells, *Journal of Power Sources*, **161**(1), (2006), 1012-1022.
- [27] L. Andreassi, G. Rubeo, S. Ubertini, P. Lunghi, R. Bove, Experimental and numerical analysis of a radial flow solid oxide fuel cell, *International Journal of Hydrogen Energy*, **32**(17), (2007), 4559-4574.
- [28] X. Zhang, G. Li, J. Li, Z. Feng, Numerical study on electric characteristics of solid oxide fuel cells, *Energy Conversion and Management*, **48**(1), (2007), 977-989.
- [29] C. Bao, N. Cai, E. Croiset, A multi-level simulation platform of natural gas internal reforming solid oxide fuel cell-gas turbine hybrid generation system-Part II. Balancing units model library and system simulation, *Journal of Power Sources*, **196**(1), (2011), 8424-8434.
- [30] M. Andersson, H. Paradis, J. Yuan, B. Sundén, Three dimensional modeling of an solid oxide fuel cell coupling charge transfer phenomena with transport processes and heat generation, *Electrochimica Acta*, **109**(1), (2013), 981-993.
- [31] M. Andersson, J. Yuan, B. Sundén, SOFC modeling considering hydrogen and carbon monoxide as electrochemical reactants, *Journal of Power Sources*, **232**(1), (2013), 42-54.
- [32] D. Saebea, Y. Patcharavorachot, S. Assabumrungrat, A. Arpornwichanop, Analysis of a pressurized solid oxide fuel cell-gas turbine hybrid power system with cathode gas recirculation, *International Journal of Hydrogen Energy*, **38**(11), (2013), 4748-4759.
- [33] X. Zhang, S. Su, J. Chen, Y. Zhao, N. Brandon, A new analytical approach to evaluate and optimize the performance of an irreversible solid oxide fuel cell-gas turbine hybrid system, *International Journal of Hydrogen Energy*, **36**(23), (2011), 15304-15312.
- [34] X. Zhang, Y. Wang, J. Guo, T. Shih, J. Chen, A unified model of high-temperature fuel-cell heat-engine hybrid systems and analyses of its optimum performances, *International Journal of Hydrogen Energy*, **39**(4), (2014), 1811-1825.

THERMODYNAMIC OPTIMIZATION OF THE SOLID OXYDE FUEL CELL ELECTRIC POWER

Youcef SAHLI¹, Bariza ZITOUNI², Hocine BEN-MOUSSA³

The object of the present work is the optimization study of the solid oxide fuel cell (SOFC) using a thermodynamic model; a particular attention is given to maximizing the produced power density by a single cell. In this study, the SOFC real delivered voltage is defined by the Nernst potentials and overpotentials due to the activation polarizations of the chemical reactions in the anode and the cathode, the losses due to the species concentration in these two electrodes (anode and cathode), and the ohmic losses caused by the Joule's effect in the electrolyte and both electrodes. The obtained results show that the SOFC power density is proportional to the variations of the operating temperature and the oxygen concentration in the oxidizer; conversely, it is inversely proportional to the evolutions of the fuel humidification and the thicknesses of the electrolyte, cathode and anode. The operating temperature and the electrolyte thickness are the most influential parameters on the power density; conversely, the cathode and anode thicknesses are the least influential parameters on the power density.

Keywords: SOFC, thermodynamic study, power density, optimization of fuel cells operation

1. Introduction

The fuel cell is one of clean energy production vectors. SOFC belongs to the fuel cell family, it is characterized by a high overall efficiency (90%), a solid electrolyte and a high operating temperature (600-1050°C). The high overall efficiency and operating capability of various fuels of the SOFCs gave a very good status between the renewable energies family. Current development research of SOFCs is focused on maximizing the energy produced by electrochemical cells or fuel cell systems and on reducing the high operating temperature that affecting the cell components in several ways to improve the lifetime of this technology.

¹ Attaché de Recherche, Unité de Recherche en Energies Renouvelables en Milieu Saharien, URERMS, Centre de Développement des Energies Renouvelables, CDER 01000, Adrar, Algérie, and Département de Mécanique, Faculté de Technologie, Université de Batna 2, Algérie, e-mail: sahli.sofc@gmail.com/y.sahli@urerms.dz

² Prof., Institut des Sciences Vétérinaires et des Sciences Agronomiques, Université Batna 1, Algérie, e-mail: zitounibariza@yahoo.fr

³ Prof., Département de Mécanique, Faculté de Technologie, Université Batna 2, Algérie, e-mail: h2sofc@gmail.com

Several studies are carried out on this subject. The energetic production optimization of SOFCs has been conducted by several researchers in this domain using several optimization methods. The most widely used methods can be divided into three categories: deterministic, meta-heuristic and stochastic methods [1].

Wen et al. [2] have realized a numerical simulation in the microstructure level to optimize the electrical power of a single SOFC cell using a deterministic method. Goyal et al. [3] have used a deterministic method to optimize the solid oxide fuel cell combined with a proton exchange membrane fuel cell SOFC-PEMFC system power generation. Cheddie [4] has presented a thermo-economic study that is based on a stochastic method to obtain the energy production minimum cost of an indirectly coupled SOFC. Francois et al. [5] have proposed a real-time optimization according to a stochastic method to optimize SOFC electrical efficiency.

Moller et al. [6] have used a genetic algorithm based on a meta-heuristic method for optimization of several operating parameters of the coupled system, solid oxide fuel cell combined with a gas turbine (SOFC-GT), in an autonomous power system. Shi et al. [7] have studied the microstructure optimization by a meta-heuristic method to obtain the electrodes optimum porosity (pore size and porosity distribution) to maximize the cell output power.

In previous works [8-18] we have reported various studies of the SOFCs operation. In [8] the thermodynamic analysis was used to obtain the influence and behavior of all overpotentials (ohmic, concentration and activation) on the produced power density by SOFCs.

In [9], the thermoelectric performance of the intermediate temperature solid oxide fuel cell (IT-SOFC) has been obtained by a one-dimensional model based on the finite volume method. Heat is generated by the chemical loss due to the internal chemical reaction and the ohmic loss due to Joule's effect. In [14], the hydrogen consumption and the power density of the planar SOFC are studied by a one-dimensional model using the finite difference method. The influences of the input parameters, such as the operating temperature, operating pressure, flow rates and mass fractions of chemical species were analyzed.

In [10], the anode thickness influence on the water and hydrogen distribution has been evidenced in the planar SOFC heart using the finite difference method (FDM) in the perpendicular plane to the gas flow directions. In the reference [11] the effect of internal chemical reactions on the temperature field at an anode supported planar solid oxide fuel cell (AS-SOFC) was numerically studied by the aid of a two-dimensional mathematical model.

The reference [12] showed a numerical study of the determination and location of the maximum temperature in all cell parts (electrolyte, electrodes and interconnectors) of a planar AS-SOFC, in a perpendicular plane to the reactive gas

flow under the effects of different polarizations: concentration, ohmic and activation. The reference [13] represents an analysis of the thermal behavior during the SOFC operation. Heat production and its distribution in all porous and solid parts of a planar AS-SOFC under the effect of various overpotentials (activation, ohmic, chemical and concentration), in the perpendicular plane to the reactive gas flow direction were determined.

Reference [15] showed a comparison of the heat distribution between two planar SOFC configurations (one with anode supported and the other one with electrolyte supported) depending on the gas supply temperature for both cases with and without the heat source (activation, ohmic, chemical and concentration). In [16], the effect of molar fractions of chemical species of the fuel (CH_4 , H_2 , CO , CO_2 and H_2O) on the heat distribution in the perpendicular plane to the reactive gas flow direction of the planar AS-SOFC was studied. The generation and absorption processes of heat due to the direct internal reforming are discussed. Reference [17] also showed the produced heat distribution by the direct internal reforming depending on the pressure and temperature of the fuel in all components of a planar AS-SOFC. In [18], a comparative study of the heat generation by the Joule's effect in the three geometric configurations of the planar SOFC (electrolyte supported, anode supported, and cathode supported) was presented.

In this work, we present a thermodynamic study of the solid oxide fuel cell. The maximum power density produced by SOFC is determined via the mathematical model which was implemented in FORTRAN language. The graphical method uses the SOFC physical and dimensional parameters: operating temperature, water and oxygen concentrations, electrolyte thickness, anode thickness and cathode thickness to optimize the delivered electric power.

2. Thermodynamic model

The SOFC operating voltage (V) is defined by the following difference:

$$V = E_{Nernst} - Losses, \quad (1)$$

E_{Nernst} is the SOFC theoretical voltage calculated from the Nernst potential between both anode and cathode, which represents the maximum voltage (open circuit voltage) of the SOFC; it is given by the following equation [19]:

$$E_{Nernst} = \frac{R.T}{n.F} \ln(k) + \frac{R.T}{n.F} \left[\ln \left(\frac{P_{H_2} \cdot P_{O_2}^{0.5}}{P_{H_2O}} \right) \right], \quad (2)$$

R is the gas constant, T is the operating temperature, n is the transferred electrons number, F is the Faraday number, P_i is the partial pressure of each species i . The

parameter k is a constant related to the cell reaction, it is defined by the Arrhenius equation [19]:

$$k = A.e^{\frac{-E}{R.T}}, \quad (3)$$

In equation (3) A is a constant and E is the activation energy, their values being 0.00144 and -246 kJ/mol, respectively [19].

The losses defined by equation (1) include three types of voltage losses due to activation, concentration and ohmic overvoltages.

2.1. Ohmic losses

These voltage losses in each SOFC constituent element are given by the product of the current density (i) and the corresponding electrical resistance (r_i) according to equation (4) [8, 18]:

$$\eta_{ohm} = i.r, \quad (4)$$

The parameter r_i is the ratio of the thickness (e) of each component of the cell heart and its electrical conductivity (σ), equation (5) [8, 18]:

$$r_i = \frac{e_i}{\sigma_i}, \quad (5)$$

The expressions of electrical conductivity of all parts of the SOFC (the two electrodes and electrolyte) are given in the Table 1.

Table 1

Electrical conductivity of cell components		
Components	σ [$\Omega^{-1} \cdot \text{cm}^{-1}$]	References
Electrolyte	$\sigma_{\text{ele}} = 3.34 \times 10^4 \exp(-10300/T)$	[8, 12, 18]
Cathode	$\sigma_{\text{cat}} = \frac{4.2 \times 10^7}{T} \exp(-1200/T)$	[8, 12, 18]
Anode	$\sigma_{\text{an}} = \frac{9.5 \times 10^7}{T} \exp(-1150/T)$	[8, 12, 18]

2.2. Activation losses

These voltage losses are due to the activation overpotentials at both electrodes. The activation overpotential expression for each electrode is given by equation (6) [8, 20]:

$$\eta_{Act,j} = \frac{R.T}{\alpha.n.F} \cdot \sinh^{-1} \left(\frac{i}{2.i_{0,j}} \right), \quad j = anode, cathode, \quad (6)$$

The parameter α is the charge transfer coefficient and the parameter i_0 is the exchange current density of each electrode which varies exponentially with temperature, equation (7) [8, 20]:

$$i_{0,j} = k_j \cdot \exp \left(-\frac{E_j}{R.T} \right), \quad j = anode, cathode, \quad (7)$$

where k and E are the pre-exponential factor and the activation energy for each electrode, respectively. Their values are given in Table 2.

Table 2

Values of the pre-exponential factor and activation energy for the exchange current densities at both electrodes of SOFC

Anode		Cathode		References
k_{an} [A.m ⁻²]	E_{cat} [J.mol ⁻¹]	k_{an} [A.m ⁻²]	E_{cat} [J.mol ⁻¹]	
$6.54 \cdot 10^{11} \frac{R.T}{2.F}$	$1.4 \cdot 10^5$	$2.35 \cdot 10^{11} \frac{R.T}{2.F}$	$1.37 \cdot 10^5$	[8, 20]

2.3. Tension losses due to the concentration overpotentials

These losses are due to the inability of the system to maintain the initial species concentrations of the reactive gases in the electrolyte interfaces. Expression of concentration overpotential for each electrode is given by equation (8) [8, 21]:

$$\eta_{conc,j} = -\frac{R.T}{n.F} \cdot \ln \left(1 - \frac{i}{i_l} \right), \quad j = anode, cathode, \quad (8)$$

where i_l is the limiting current of the anode and cathode, the chosen i_l values being respectively 2.99×10^4 and 2.16×10^4 A.m⁻² [8, 21].

3. Results and discussion

A program in FORTRAN language that is based on the thermodynamic model equations has been developed locally. The code structure and procedure were described in [8]. The obtained results are presented in five sections. In the first we present the impact of operating temperature and current density on the

power density. In the second section, we show the influence of the oxygen concentration and the moisture content on the power density, for the different current densities. In the third section, we highlight the effect of the electrolyte thickness and the current density on the power density delivered by SOFC. As to the fourth section, the effects of the cathode thickness and the current density on the power density are exposed. Finally, the impacts of the anode thickness and current density on the power density are presented.

Fig. 1 shows the effect of the operating temperature and the current density on the power density of a supported electrolyte in the SOFC. The building materials are: nickel oxide–yttria stabilized zirconia (Ni-YSZ) for the anode, lanthanum strontium manganite (LSM) for the cathode and yttria stabilized zirconia (YSZ) for the electrolyte. The thicknesses of cell heart elements are identical to 100 μm for the electrodes and 50 μm for the electrolyte. The fuel is humidified hydrogen (low molar fraction $X_{\text{H}_2\text{O}} = 0.05$), and the oxidizer is air (oxygen content $X_{\text{O}_2} = 0.21$), the supply pressure being common for these both gases (1 bar).

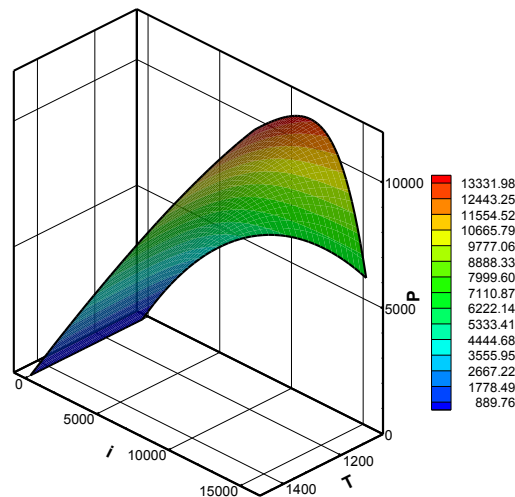


Fig. 1. Power density P (W.m^{-2}) evolution vs. the operating temperature T (K) and current density i (A.m^{-2}).

It is clearly remarkable in Figure 1 that the maximum values of the power density are obtained for the maximum values of the current density. Figure 1 shows that the maximum values of the power density correspond to the maximum temperature values and the minimum values of the power density correspond to the minimum temperature values. Thus, we can consider that both voltage and power density are proportional to the operating temperature.

Fig. 2 shows the effect of the hydrogen water content and the oxidizer oxygen concentration on the SOFC power density. The building materials are Ni-

YSZ for the anode, LSM for the cathode and YSZ for the electrolyte, and the cell heart elements thicknesses are identical to $100\ \mu\text{m}$ for the electrodes and $50\ \mu\text{m}$ for the electrolyte. The supply pressure is common for these both gases (1 bar). The SOFC operating temperature is $1073\ \text{K}$.

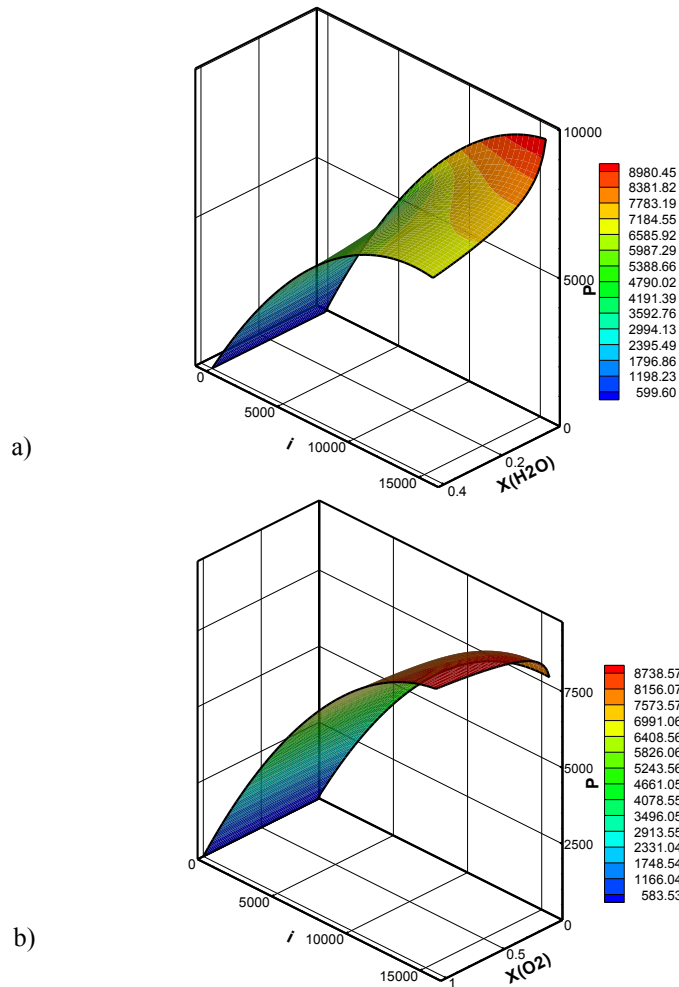


Fig. 2. Power density P (W.m⁻²) evolution vs. species concentrations X (as mole fractions) and current density i (A.m⁻²) at $1073\ \text{K}$ for:
(a) water in the fuel; (b) oxygen in the oxidizer

Fig. 2.a shows that the maximum values of the power density correspond to the maximum values of the current density and to a minimum fuel humidification rate. The minimum values of the power density are obtained by a maximum fuel humidification rate, meaning that the power density of the solid oxide fuel cell is inversely proportional to the fuel humidification rate. Therefore,

the SOFC delivered voltage and voltage calculated from Nernst potential are inversely proportional to the fuel humidification rate.

In Fig. 2.b the maximum values of the power density are situated at the largest current density values. The maximum values of the power density correspond to the maximum oxygen concentration rate in the oxidizer and the minimum values of the power density correspond to the minimum oxygen concentration rate in the oxidizer. Therefore, the SOFC power density is proportional to the oxygen concentration in the oxidizer and also the SOFC delivered voltage and voltage calculated from Nernst potential are proportional to the oxygen concentration rate.

Fig. 3 shows the effect of the electrolyte thickness and the current density on the power density of a SOFC. The building materials are Ni-YSZ for the anode, LSM for the cathode and YSZ for the electrolyte. The thicknesses of the anode and cathode are of $100\ \mu\text{m}$. The fuel is humidified hydrogen ($X_{\text{H}_2\text{O}} = 0.05$), and the oxidizer is air ($X_{\text{O}_2} = 0.21$). The supply pressure is common for these both gases (1 bar). The SOFC operating temperature is 1073 K.

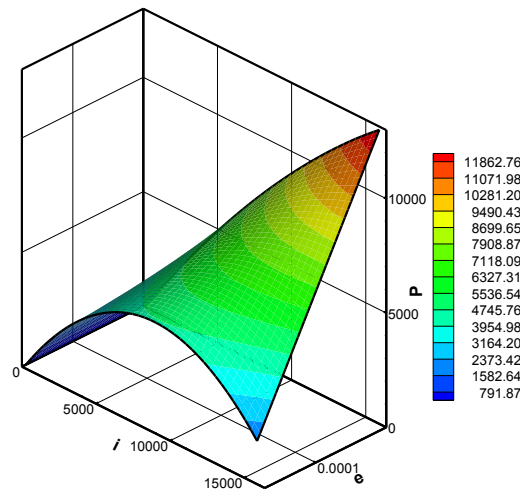


Fig. 3. Power density P (W.m⁻²) evolution vs. the electrolyte thickness e (m) and current density i (A.m⁻²) at 1073 K

It is clearly remarkable in Fig. 3 that the maximum values of the power density are obtained at the maximum values of the current density. Fig. 3 also shows that the maximum values of the power density correspond to the minimum electrolyte thickness. The minimum values of the power density correspond to the maximum electrolyte thickness. Thus, we can consider that both voltage and power density are inversely proportional to the electrolyte thickness.

The results presented in Fig. 4 show the effect of the anode thickness and current density on the power density variation. The building materials are Ni-YSZ

for the anode, LSM for the cathode and YSZ for the electrolyte. The anode and electrolyte thickness are respectively $100\ \mu\text{m}$ and $50\ \mu\text{m}$. The fuel is the humidified hydrogen ($X_{\text{H}_2\text{O}} = 0.05$), and the air ($X_{\text{O}_2} = 0.21$) is the oxidant, the supply pressure is common for the fuel and air (1 bar). The cell operating temperature is identical to 1073 K.

Fig. 4 shows that the maximum values of the power density correspond to the maximum values of the current density. The maximum values of the power density are obtained by a minimum cathode thickness values and the minimum values of the power density are obtained by a maximum cathode thickness values. Thus, we can state that the power density of the solid oxide fuel cell is inversely proportional to the cathode thickness.

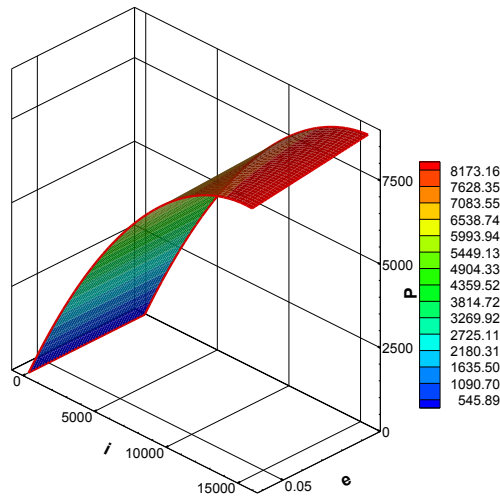


Fig. 4. Power density P ($\text{W}\cdot\text{m}^{-2}$) evolution vs. the cathode thickness e (m) and current density i ($\text{A}\cdot\text{m}^{-2}$) at 1073 K

Fig. 5 shows the effect of the anode thickness and the current density on the SOFC power density, the building materials are Ni-YSZ for the anode, LSM for the cathode and YSZ for the electrolyte, the cathode and electrolyte thickness are respectively $100\ \mu\text{m}$ and $50\ \mu\text{m}$. The fuel is humidified hydrogen ($X_{\text{H}_2\text{O}} = 0.05$), and the oxidizer is air ($X_{\text{O}_2} = 0.21$) is the oxidizer. The supply pressure is common for these both gases (1 bar). The SOFC operating temperature is 1073 K.

The maximum values of the power density are situated at the largest current density values. The maximum values of the power density correspond to the minimum anode thickness values and the minimum values of the power density correspond to the maximum anode thickness values. The SOFC real delivered voltage is inversely proportional to the anode thickness. SOFC power density is also inversely proportional to the anode thickness.

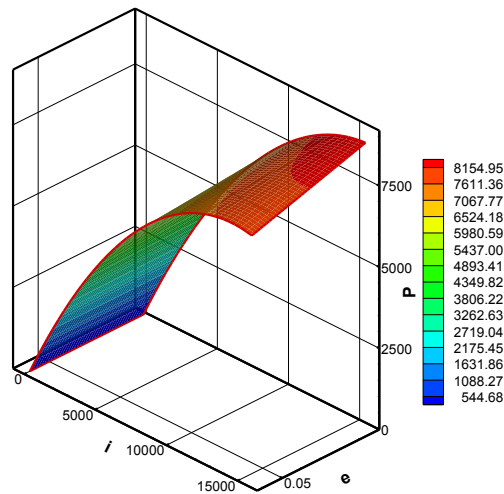


Fig. 5. Power density P (W.m⁻²) evolution vs. the anode thickness e (m) and current density i (A.m⁻²) at 1073 K

6. Conclusions

The solid oxide fuel cell is an electrochemical device that converts the chemical energy of a reaction to the thermal and electrical energies. In the present study an optimization study of the produced electric power by SOFCs is presented. A program in FORTRAN language that is based on the thermodynamic model equations has been developed locally. According to the analysis of the obtained results, it appears that the realized code can be used as a design tool for the optimization of the produced electric power by SOFCs. The main obtained results of this work are:

- The SOFC power density is proportional to the operating temperature and the oxygen concentration in the oxidizer.

- The SOFC power density is inversely proportional to the fuel humidification and the thicknesses of electrolyte, cathode and anode.

- The operating temperature and the electrolyte thickness are the most influential parameters on the power density; conversely, the cathode and anode thicknesses are the few influential parameters on the power density.

REFERENCES

- [1]. *F. Ramadhani, M.A. Hussain, H. Mokhlis, S. Hajimolana*, "Optimization strategies for Solid Oxide Fuel Cell (SOFC) application: A literature survey", *Renewable Sustainable Energy Rev.*, **vol. 76**, 2017, pp. A460–A480.
- [2]. *H. Wen, J.C. Ordonez, J.V.C. Vargas*, "Single solid oxide fuel cell modeling and optimization", *J. Power Sources*, **vol. 196**, 2011, pp. 7519–7532.

- [3]. *A. Goyal, U. Diwekar, R. Geisbrecht*, “Multi-objective optimization for hybrid fuel cells power system design”, Annual Meeting. American Institute of Chemical Engineers (AIChE), Reno, Nevada, Nov 4-9, 2001.
- [4]. *D.F. Cheddie*, “Thermo-economic optimization of an indirectly coupled solid oxide fuel cell/gas turbine hybrid power plant”, *Int. J. Hydrog. Energy*, **vol. 36**, 2011, pp. 1702–1709.
- [5]. *G. François, S. Costello, D. Bonvin*, “Application of real-time optimization methods to energy systems in the presence of uncertainties and disturbances”, *TMC. Acad. J.*, **vol. 9**, 2015, pp. 19–40.
- [6]. *B. Fredriksson Möller, J. Arriagada, M. Assadi, I. Potts*, “Optimisation of an SOFC/GT system with CO₂-capture”, *J. Power Sources*, **vol. 131**, 2004, pp. 320–326.
- [7]. *J. Shi, X. Xue*, “Optimization design of electrodes for anode-supported solid Oxide Fuel Cells via genetic algorithm”, *J. Electrochem. Soc.*, **vol. 158**, 2010, pp. B143-B151.
- [8]. *Y. Sahli, B. Zitouni, H. Ben-Moussa*, “Solid Oxide Fuel Cell thermodynamic study”, *Çankaya University Journal of Science and Engineering*, **vol. 14**, 2017, pp. 134–151.
- [9]. *B. Zitouni, H. Ben Moussa, K. Oulmi*, “Studying on the increasing temperature in IT-SOFC: Effect of heat sources”, *Journal of Zhejiang University. SCIENCE A*, **vol. 9**, 2007, pp. 1500-1504.
- [10]. *B. Zitouni, H. Ben Moussa, K. Oulmi, S. Saighi, K. Chetehouna*, “Temperature field, H₂ and H₂O mass transfer in SOFC single cell: Electrode and electrolyte thickness effects”, *Int. J. Hydrog. Energy*, **vol. 34**, 2009, pp. 5032–5039.
- [11]. *B. Zitouni, G.M. Andreadis, H. Ben Moussa, H. Abdenebi, D. Haddad, M. Zeroual*, “Two-dimensional numerical study of temperature field in an anode supported planar SOFC: Effect of the chemical reaction”, *Int. J. Hydrog. Energy*, **vol. 36**, 2011, pp. 4228–4235.
- [12]. *K. Oulmi, B. Zitouni, H. Ben Moussa, H. Abdenebi, G.M. Andreadis*, “Total polarization effect on the location of maximum temperature value in planar SOFC”, *Int. J. Hydrog. Energy*, **vol. 36**, 2011, pp. 4236–4243.
- [13]. *H. Abdenebi, B. Zitouni, D. Haddad, H. Ben Moussa, M.A. George, S. Abdessemed*, “SOFC fuel cell heat production: Analysis”, *Energy Procedia*, **vol. 6**, 2011, pp. 643–650.
- [14]. *H. Ben Moussa, B. Zitouni, K. Oulmi, B. Mahmah, M. Belhamel, P. Mandin*, “Hydrogen consumption and power density in a co-flow planar SOFC”, *Int. J. Hydrog. Energy*, **vol. 34**, 2009, pp. 5022–5031.
- [15]. *D. Haddad, H. Abdenebi, B. Zitouni, H. Ben Moussa, K. Oulmi*, “Thermal field in SOFC fed by hydrogen: Inlet gases temperature effect”, *Int. J. Hydrog. Energy*, **vol. 38**, 2013, pp. 8575–8583.
- [16]. *H. Abdenebi, B. Zitouni, H. Ben Moussa, D. Haddad*, “Thermal field in SOFC fed by CH₄: Molar fractions effect”, *Journal of the Association of Arab Universities for Basic and Applied Sciences*, **vol. 17**, 2015, pp. 82–89.
- [17]. *H. Abdenebi, B. Zitouni, H. Ben Moussa, D. Haddad, H. Zitouni, Y. Sahli*, “Inlet Methane Temperature Effect at a Planar SOFC Thermal Field Under Direct Internal Reforming Condition”, in: *Progress in Clean Energy*, volume 2: Novel Systems and Applications, I. Dincer, C.O. Colpan, O. Kizilkan, M.A. Ezan (Eds). Springer, Switzerland, 2015, pp. Switzerland: Springer, 2015, pp. 567–581.
- [18]. *Y. Sahli, B. Zitouni, H. Ben Moussa, H. Abdenebi*, “Three-Dimensional Numerical Study of the Heat Transfer on the Planar Solid Oxide Fuel Cell: Joule’s Effect”, in: *Progress in Clean Energy*, volume 1: Analysis and Modeling, I. Dincer, C.O. Colpan, O. Kizilkan, M.A. Ezan (Eds). Springer, Switzerland, 2015, pp. 449–461.
- [19]. *J. Milewski, K. Swirski, M. Santarelli, P. Leone*. “Advanced Methods of Solid Oxide Fuel Cell Modeling”, Springer-Verlag London Ltd., London, 2011.

- [20]. *D. Saebea, Y. Patcharavorachot, S. Assabumrungrat, A. Arpornwichanop*, “Analysis of a pressurized solid oxide fuel cell-gas turbine hybrid power system with cathode gas recirculation”, *Int. J. Hydrog. Energy*, **vol. 38**, 2013, pp. 4748–4759.
- [21]. *X. Zhang, Y. Wang, J. Guo, T.-M. Shih, J. Chen*, “A unified model of high-temperature fuel-cell heat-engine hybrid systems and analyses of its optimum performances”, *Int. J. Hydrog. Energy*, **vol. 39**, 2014, pp. 1811–1825.

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

Y. Sahli ^{1*}, B. Zitouni ^{2 †} et H. Benmoussa ³

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).

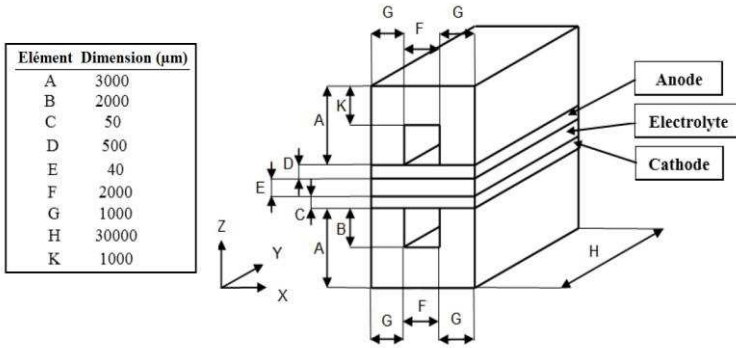


Fig. 1: Domaine de calcul

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.

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

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**:

Tableau 1: Valeurs des conductivités thermiques

Composants	Conductivité thermique λ (W/m.K)	Matériau	Références
Anode	5.84	Ni-YSZ	[7, 8]
Cathode	4	$La_{1-x}Sr_xMnO_3$	[4, 9]
Electrolyte	2.16	YSZ	[7, 8]
Interconnecteur	6	$LaCrO_3$	[10]

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.

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

Les conductivités électriques des éléments constructifs de la pile sont définies par le **Tableau 2**.

Tableau 2: Expressions de la conductivité électrique

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

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).

$$S_{\text{Act}} = \eta_{\text{Act},i} \quad (3)$$

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

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

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.

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

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

Anode	Cathode	Ref.
$E_{\text{an}} \text{ (J/mol)} = 1.4 \times 10^5$	$E_{\text{cat}} \text{ (J/mol)} = 1.37 \times 10^5$	[14]
$k_{\text{an}} \text{ (Am}^2\text{)}$	$k_{\text{cat}} \text{ (Am}^2\text{)}$	[15]
$6.54 \times 10^{11} \cdot \frac{R \cdot T}{2F}$	$2.35 \times 10^{11} \cdot \frac{R \cdot T}{2F}$	

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/m^2 [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.

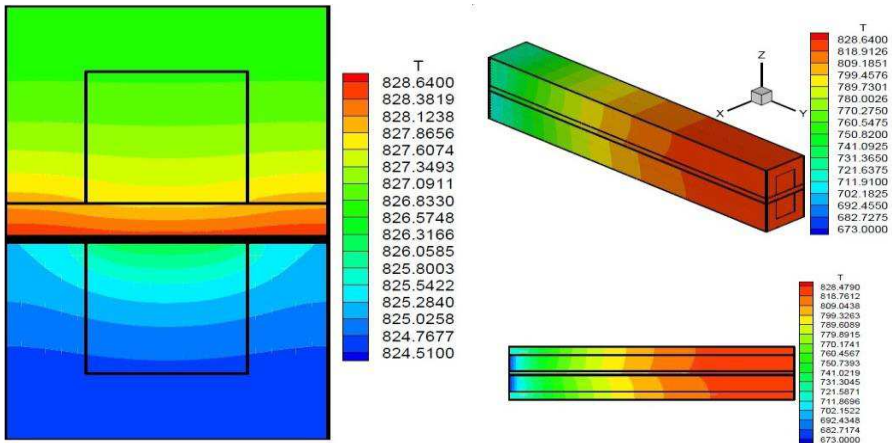


Fig. 2: Champ de température de la cellule à une température d'entrée des gaz de 673 K

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.

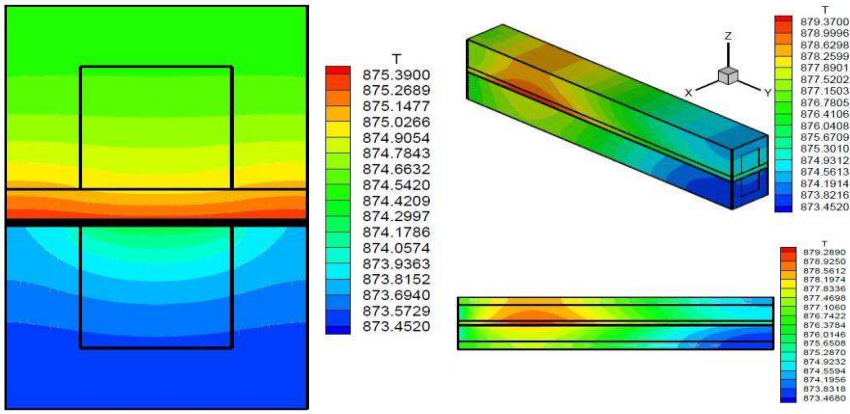


Fig. 3: Champ de température de la cellule à une température d'entrée des gaz de 873 K

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.

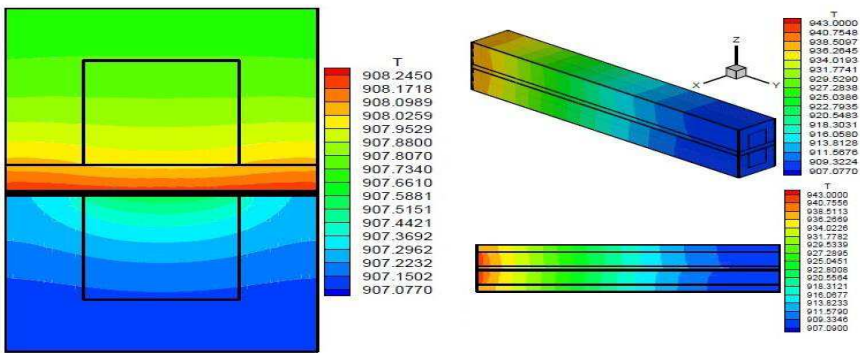


Fig. 4: Champ de température de la cellule à une température d'entrée des gaz de 943 K

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-parabologiquement proportionnelle à la température d'entrée des gaz.

Au début de la courbe, l'écart maximal des valeurs de la température est décroissant quasi-parabologiquement, 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.

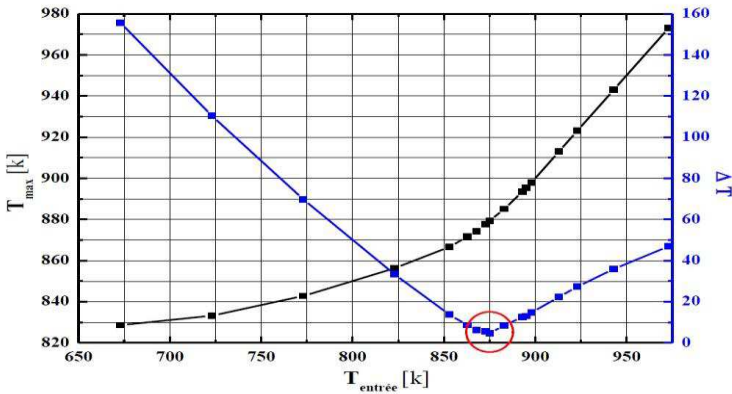


Fig. 5: Effet de la température d'entrée des gaz sur la température maximale et l'écart des températures maximal dans la cellule SOFC

NOMENCLATURE

E , Energie d'activation, J.mol^{-1}	i , Densité de courant, A.m^{-2}
K , Facteur pré-exponentiel, A.m^2	i_0 , Densité de courant d'échange, A.m^2
n , Nombre d'électron de transfert	R , Constante de gaz parfaits, $\text{kg.m}^{-1}.\text{s}^{-1}$
σ , Conductivité électrique, $\Omega^{-1}.\text{m}^{-1}$	λ , Conductivité thermique $\text{W.m}^{-1}\text{K}^{-1}$
α , Coefficient de transfert électronique	η , Perte de tension, V
S , Source de chaleur, W.m^3	T , Température, K
Act, Activation; an, Anode; car, Cathode	elec, Electrolyte; in, Intercon.; ohm, Ohmic

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.

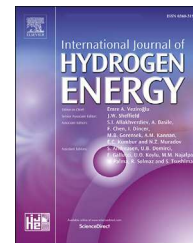
- [3] Y. Inui, A. Urata, N. Ito, T. Nakajima and T. Tanaka, 'Performance Simulation of Planar SOFC using Mixed Hydrogen and Carbon Mon/oxide Gases as Fuel', Energy Conversion and Management, Vol. 47 pp. 1738 – 1747, 2006 .
- [4] T.X. Ho, P. Kosinski, A.C. Hoffmann and A. Vik, 'Numerical Analysis of a 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.



ELSEVIER

Available online at www.sciencedirect.com

ScienceDirect

journal homepage: www.elsevier.com/locate/he

Optimization study of the produced electric power by SOFCs

Yucef Sahli ^{a,b,*}, Hocine Ben Moussa ^b, Bariza Zitouni ^{b,c}

^a Unité de Recherche en Energies Renouvelables en Milieu Saharien, URERMS, Centre de Développement des Energies Renouvelables, CDER 01000, Adrar, Algeria

^b Département de Mécanique, Faculté de Technologie, Université de Batna 2, Algeria

^c Institut des Sciences Vétérinaires et des Sciences Agronomiques, Université de Batna 1, Algeria

ARTICLE INFO

Article history:

Received 19 April 2018

Received in revised form

15 July 2018

Accepted 24 August 2018

Available online xxx

Keywords:

SOFC

Thermodynamic

Power density

Current density

Over-potential and optimization

ABSTRACT

In this work, an optimization study of the delivered power density by the solid oxide fuel cells is presented according to a thermodynamic model. The power density is defined by the current density, the Nernst potential and the three losses: concentration, activation and ohmic. A comparison between the Tafel and Butler-Volmer formulations was performed to quantify the activation loss. A program in FORTRAN language was developed locally for the resolution of the mathematical equations representing the used physical model. The obtained results show that the SOFCs power density is inversely proportional to the anode thickness, electrolyte thickness and cathode thickness. The optimum fuel water content ensures the maximum power density is 6.25%. The cell power density is proportional to the oxygen concentration in the oxidant, the operating temperature and the operating pressure.

© 2018 Hydrogen Energy Publications LLC. Published by Elsevier Ltd. All rights reserved.

Introduction

SOFC is one of the fuel cells family; it is characterized by a high overall efficiency (90%), a solid electrolyte and a high operating temperature (600–1050 °C). The high overall efficiency and operating ability by various fuels have given a very good status for SOFCs in the clean energy production family. Current SOFC developments are focused on reducing their very high operating temperature which leads to the fast aging of these components and maximizing the electrical energy production of this cells. In this context, the SOFCs energy production optimization has been conducted by several researchers. Several optimization methods are used in this contexts. The most used optimization methods are divided

into three types: meta-heuristic, deterministic and stochastic methods [1]. Shi et al. [2] have optimized the electrodes porosity (pore size and porosity distribution) by a meta-heuristic method to maximize the fuel cell output power. Moller et al. [3] have used a genetic algorithm that based on a meta-heuristic method for optimization of several operating parameters of a coupled system (solid oxide fuel cell and gas turbine). Goyal et al. [4] have used a deterministic method to optimize the produced energy of coupled system SOFC-PEM. Wen et al. [5] have optimized the electrical power of a single SOFC cell using a deterministic method. Francois et al. [6] have exposed a real-time optimization using a stochastic method to realize an optimization of SOFCs electrical efficiency. Cheddie [7] has used a thermo-economic study that based on a

* Corresponding author. Unité de Recherche en Energies Renouvelables en Milieu Saharien, URERMS, Centre de Développement des Energies Renouvelables, CDER 01000, Adrar, Algeria.

E-mail address: sahli.sofc@gmail.com (Y. Sahli).

<https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2018.08.162>

0360-3199/© 2018 Hydrogen Energy Publications LLC. Published by Elsevier Ltd. All rights reserved.

stochastic optimization method to obtain the minimum cost of the produced energy by an indirectly coupled SOFC.

Genc et al. [8] have presented a geometric optimization of an ejector for a 4 kW SOFC system with anode off-gas recycle. Gholamian et al. [9] have exploited the waste heat of a biomass-based solid oxide fuel cell in a gas turbine to enhance the power generation/exergy efficiency and transferred the surplus power which is generated by the gas turbine to a proton exchange membrane electrolyzer to produce the hydrogen. Choudhary et al. [10,11] have presented a novel and optimal thermal integration of SOFC with an intercooled-recuperated gas turbine.

In the continuation of our previous works [12–22]. In Ref. [12] the influence and behavior of all over-potentials (concentration, activation and Ohmic) on the produced potential and power density of SOFCs are studied using a thermodynamic model. In Ref. [13], the hydrogen consumption and power density of a planar SOFC are studied according to the input parameters; operating pressure, operating temperature, mass fractions and flow rates by an electro-dynamic model using the finite difference method. In Ref. [14], the intermediate temperature SOFC thermoelectric performance is studied using a one-dimensional model that is resolved by the finite volume method. The generated heat is the result of the losses due to the internal chemical reaction and joule effect. The reference [15] exhibits a numerical study of the chemical reactions effect on the temperature fields in the perpendicular plane to the gas flow of the planar SOFC heart (anode, electrolyte and cathode). In Ref. [16], the anode thickness effect on the hydrogen and water distribution in the SOFC heart has been presented by a two-dimensional model using the finite difference method in the perpendicular plane to the gas flow directions. The reference [17] shows a study of the heat distribution and generation in all solid and porous parts of a planar AS-SOFC under the over-potentials effect (activation, concentration, chemical and Ohmic), in the perpendicular plane to the gas flow. The reference [18] shows a thermal and numerical study of two planar SOFC types (supported electrolyte and supported anode) for the determination and location of the maximum temperature in all fuel cell parts (anode, electrolyte, cathode and inter-connectors) in the perpendicular plane to the gas flow. The heat is generated by the concentration, activation and Ohmic polarizations. Reference [19] shows a comparative study of the heat generation and distribution according to the gas supply temperature between two geometrical configuration types of the planar SOFC (supported electrolyte and supported anode) for the cases with and without the heat source (activation, concentration, chemical and Ohmic) in the perpendicular plane to the gas flow. The reference [20] present a study of the direct internal reforming depending on the temperature and pressure of the fuel in a planar AS-SOFC in the perpendicular plane to the gas flow. In Ref. [21], the molar fractions effects (CH_4 , H_2O , CO , CO_2 and H_2) on the heat generation and distribution is studied in a planar AS-SOFC in the perpendicular plane to the gas flow. In Ref. [22], a heat generation comparative study between three planar SOFC geometric configuration types (supported anode, supported cathode and supported electrolyte) is presented in a three-

dimensional environment that only count the heat generation caused by the Joule's effect.

In the present work, an optimization study of the delivered power density by the solid oxide fuel cells is presented according to a thermodynamic model. A comparison between the Tafel and Butler-Volmer formulations was performed to quantify the activation loss. The graphical method is used to optimize the SOFCs power density according to the dimensional and physical parameters (electrolyte thickness, anode thickness, cathode thickness, oxygen concentration in the oxidant, water content in the fuel, operating temperature and operating pressure).

Physical model

The SOFCs real voltage is the result of the energy conversion procedure irreversibility; it is represented by the difference between the reversible or ideal voltage and the equivalent voltage to the amount of heat released by the system ... etc. In other words, it is defined by the difference between the theoretical voltage of Nernst and the totality of the voltage losses that are mainly due to the three over-voltages (ohmic, activation and concentration). The SOFC real voltage (V) is defined by the following equation:

$$V = E_{\text{Nernst}} - \text{Losses} \quad (1)$$

The equilibrium potential or the Nernst potential (E_{Nernst}) is the open circuit voltage (OCV), its value depends on the fuel and oxidizer types, the concentrations of each species, the operating temperature, the operating pressure ... etc. E_{Nernst} is given by the following equation:

$$E_{\text{Nernst}} = E_0 + \frac{R \cdot T}{n \cdot F} \left[\ln \left(\frac{P_{\text{H}_2\text{O}} \cdot P_{\text{O}_2}^{0.5}}{P_{\text{H}_2}} \right) \right] \quad (2)$$

where E_0 is the ideal potential, R is the perfect gas constant, T is the operating temperature, n is the number of transfer electrons and F is the Faraday number.

The ideal potential is presented by the ratio of Gibbs free energy (ΔG) on the product of the number of transfer electrons and Faraday number. Eq. (3) [23–25].

$$E_0 = \frac{\Delta G}{n \cdot F} \quad (3)$$

The Gibbs free energy is defined by the difference between the enthalpy variation and the product of the temperature and entropy variation. Eq. (4) [23,26].

$$\Delta G = \Delta H - T \cdot \Delta S \quad (4)$$

The enthalpy and entropy variations are calculated according to the Eqs. (5)–(8) [23,26].

$$H_T = H_{298,15} + \int_{298,15}^T C_p \cdot dT \quad (5)$$

$$S_T = S_{298,15} + \int_{298,15}^T \frac{C_p}{T} \cdot dT \quad (6)$$

$$\Delta H_{H_2O} = H_{H_2O} - H_{H_2} - \frac{1}{2} \cdot H_{O_2} \quad (7)$$

$$\Delta S_{H_2O} = S_{H_2O} - S_{H_2} - \frac{1}{2} \cdot S_{O_2} \quad (8)$$

The heat capacity (C_p) of each species is determined by Eq. (9).

$$C_p = a_1 \cdot T^{b_1} + a_2 \cdot T^{b_2} + a_3 \cdot T^{b_3} + a_4 \cdot T^{b_4} \quad (9)$$

The empirical constants a_i and b_i presented in Eq. (9) are given for each species in Table 1.

The enthalpies and entropies of water steam, hydrogen and oxygen at a reference temperature of 25 °C are given in Table 2.

Ohmic loss

The ohmic loss is due to the encountered resistance by the electrons and ions while traversing the electrolyte and electrodes. The electrolyte and two electrodes obeying Ohm's law. The ohmic loss in each component of the cell is defined by the product of the current density (i) and the electrical resistance (r). Eq. (10) [22,27].

$$\eta_{Ohm,j} = i \cdot r_j \quad (10)$$

The electrical resistance (r) of each component (j) (anode, electrolyte and cathode) is defined by the ratio of the element thickness (e_j) and its electrical conductivity (σ_j). Eq. (11). The electrical conductivity of each element is given in Table 3 for the standard materials (electrolyte: YSZ, anode: Ni-YSZ, cathode: LSM).

$$r_j = \frac{e_j}{\sigma_j} \quad (11)$$

The overall ohmic loss is defined by the sum of the three anodic, cathodic and electrolytic ohmic losses. Eq. (12) [12].

$$\eta_{Ohm} = \eta_{Ohm,An} + \eta_{Ohm,el} + \eta_{Ohm,cath} \quad (12)$$

Activation loss

The activation polarization is present when the rate of an electrochemical reaction at the electrode surface is controlled by the slowing of the electrode kinetics. In the scientific literature, several formulations are used to estimate the activation overvoltage; the most used are the Butler-Volmer formulation and the experimental formulation of Tafel. Several authors favor the quantization of the activation loss by the non-linear equation of Butler-Volmer simplified for an electronic transfer coefficient of ($\alpha = 0.5$). Eq. (13) [26-26,28,32-37].

Table 2 – Enthalpy and entropy of each species [23,26].

Species	Enthalpy (J·mol ⁻¹)	Entropy (J·mol ⁻¹ ·K ⁻¹)
H ₂ O (steam)	-241,827	188.83
H ₂	0	130.59
O ₂	0	205.14

Table 3 – The electrical conductivity of each component of the SOFC.

Components	σ [$\Omega^{-1} \cdot \text{cm}^{-1}$]	References
Anode	$\sigma_{an} = \frac{9,5 \cdot 10^7}{T} \cdot e^{\left(\frac{-1150}{T}\right)}$	[12,22,28–31]
Electrolyte	$\sigma_{el} = 3,34 \cdot 10^4 \cdot e^{\left(\frac{-10300}{T}\right)}$	[12,22,28–31]
Cathode	$\sigma_{cat} = \frac{4,2 \cdot 10^7}{T} \cdot e^{\left(\frac{-1200}{T}\right)}$	[12,22,28–31]

$$\eta_{Act,j} = \frac{R \cdot T}{\alpha \cdot n \cdot F} \cdot \sinh^{-1} \left(\frac{i}{i_{0,j}} \right), j = anode, cathode \quad (13)$$

where α is the electronic transfer coefficient or the charge transfer coefficient and i_0 is the exchange current density of each electrode.

The other authors prefer to use the Tafel experimental formulation. Eq. (14) [24,25,29,31,38–40].

$$i = i_{0,j} \left[\exp \left(\frac{\alpha \cdot n \cdot F \cdot \eta_{Act,j}}{R \cdot T} \right) \right], j = anode, cathode \quad (14)$$

Which gives the activation loss by Eq. (15).

$$\eta_{Act,j} = \frac{R \cdot T}{\alpha \cdot n \cdot F} \cdot \ln \left(\frac{i}{i_{0,j}} \right), j = anode, cathode \quad (15)$$

The overall activation loss is the sum of the anodic and cathodic activation losses. Eq. (16).

$$\eta_{Act} = \eta_{Act,An} + \eta_{Act,cath} \quad (16)$$

For the both activation loss formulations, the exchange current density (i_0) is given by Eq. (17).

$$i_{0,j} = k_j \cdot \exp \left(- \frac{E_j}{R \cdot T} \right), j = anode, cathode \quad (17)$$

where k_j and E_j represent the pre-exponential factor and the activation energy (Table 4).

Fig. 1a presents the activation loss characterization according to the different operating temperatures for Tafel and Butler-Volmer models using a current density of 20,000 A/m². The Butler-Volmer model presents an activation loss variation identical to that of Tafel model for the temperature values that are below 980 k. For temperature values that above 980 k,

Table 1 – Empirical constants a_i and b_i of each species [23,26].

Species	a_1	b_1	a_2	b_2	a_3	b_3	a_4	b_4
H ₂ O (steam)	143.05	0	-58.040	0.25	8.2751	0.5	-0.036,989	1
H ₂	56.505	0	-22222.6	-0.75	116,500	-1	-560,700	-1.5
O ₂	37.432	0	2.0102*10 ⁻⁵	1.5	-178,570	-1.5	2,368,800	-2

Table 4 – Values and expressions of the pre-exponential factor and the activation energy of each electrode [22,41].

Anode		Cathode	
$k_{an} \cdot [Am^{-2}]$	$E_{an} \cdot [J \cdot mol^{-1}]$	$k_{cat} \cdot [Am^{-2}]$	$E_{cat} \cdot [J \cdot mol^{-1}]$
$6.54 \times 10^{11} \cdot \frac{R \cdot T}{2 \cdot F}$	1.4×10^5	$2.35 \times 10^{11} \cdot \frac{R \cdot T}{2 \cdot F}$	1.37×10^5

Butler-Volmer model has positive and almost zero values of the activation loss, unlike, Tafel model presents activation loss negative values. The obtained activation loss error by the Tafel model is high; it varies from 10 to 160%.

Fig. 1b shows the activation loss variation as a function of the exchange current density for a current density equal to

30,000 A/m² and an operating temperature of 1023 k according to Butler-Volmer and Tafel models. The activation loss values are inversely proportional to the exchange current density values. Butler-Volmer model has higher activation loss values than Tafel model. The obtained activation loss error by the Tafel experimental formulation is high (10–100%) and it is proportional to the exchange current density values.

Concentration loss

At an electrode, when there is a potential loss due to the system inability to maintain the initial or necessary concentrations of the reactants, the concentration gradient formation is logically produced. It exists several models to quantify the concentration loss. Minutillo et al. [37] express the

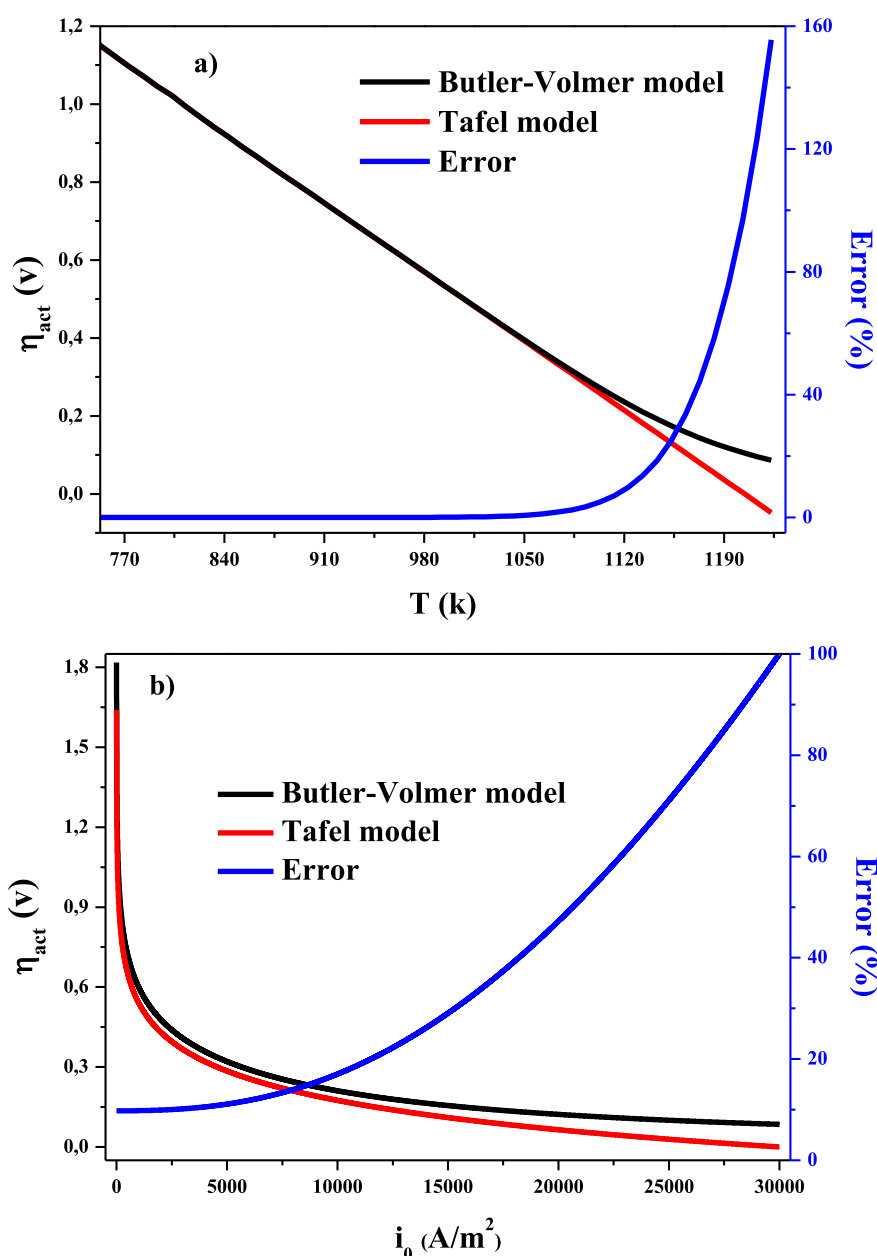


Fig. 1 – Comparison between the Butler-Volmer and the Tafel models. a) according to the operating temperature, b) according to the exchange current density.

concentration loss by the sum of the two anodic and cathodic concentration losses. Eqs. (18)–(20).

$$\eta_{\text{Conc, an}} = -\frac{R \cdot T}{2 \cdot F} \cdot \ln\left(1 - \frac{i}{i_{l, \text{an}}}\right) + \frac{R \cdot T}{2 \cdot F} \cdot \ln\left(1 + \frac{P_{\text{H}_2} \cdot i}{P_{\text{H}_2\text{O}} \cdot i_{l, \text{an}}}\right) \quad (18)$$

$$\eta_{\text{Conc, cat}} = \frac{R \cdot T}{2 \cdot F} \cdot \ln\left(1 - \frac{i}{i_{l, \text{cat}}}\right) \quad (19)$$

$$\eta_{\text{Conc}} = \eta_{\text{Conc, An}} + \eta_{\text{Conc, cat}} \quad (20)$$

where $i_{l, j}$ is the limiting current density of the two electrodes. The anodic and cathodic limiting current densities $i_{l, \text{an}}$ and $i_{l, \text{cat}}$ are calculated by Eqs. (21) And (22).

$$i_{l, \text{an}} = \frac{2 \cdot F \cdot P_{\text{H}_2} \cdot D_{\text{eff, an}}}{R \cdot T \cdot e_{\text{an}}} \quad (21)$$

$$i_{l, \text{cat}} = \frac{4 \cdot F \cdot P_{\text{O}_2} \cdot D_{\text{eff, cat}}}{\left(\frac{P - P_{\text{O}_2}}{P}\right) R \cdot T \cdot e_{\text{cat}}} \quad (22)$$

where P_{O_2} and P_{H_2} are the partial pressures of oxygen and hydrogen, the anodic and cathodic effective diffusion coefficients $D_{\text{eff, an}}$ and $D_{\text{eff, cat}}$ are considered constant of $0.2 \text{ cm}^2/\text{s}$ and $0.05 \text{ cm}^2/\text{s}$ respectively [42].

FORTTRAN computational code is developed based on the presented physical model. This code comprises four steps; the data reading, the variable calculations that are not current

density functions, the variable calculations that are current density functions and the result display. The calculator code algorithm is given by the Fig. 2.

Results and discussion

The results are presented in seven classes; the first class demonstrates the impact of the anode thickness and current density on the power density of the cell. For the second class, it shows the influence of the electrolyte thickness and current density on the SOFC power density. The third class exposes the effect of the cathode thickness and current density on the delivered power density by the solid oxide fuel cells. The fourth class illustrates the influence of the fuel water content and current density on the power density. The fifth class presents the effect of the oxygen concentration in the combustive and current density on the SOFC power density. The sixth class concerns the contribution presentation of the operating temperature and current density on the SOFC power density variation. Finally, the seventh class concerns the contribution illustration of the operating pressure and current density in the solid oxide fuel cell power density variation. All used parameter values in the different performed simulations to obtain all results are given for each class in Table 5.

Fig. 3 shows the effect of the anode thickness and current density on the cell power density. The low power densities

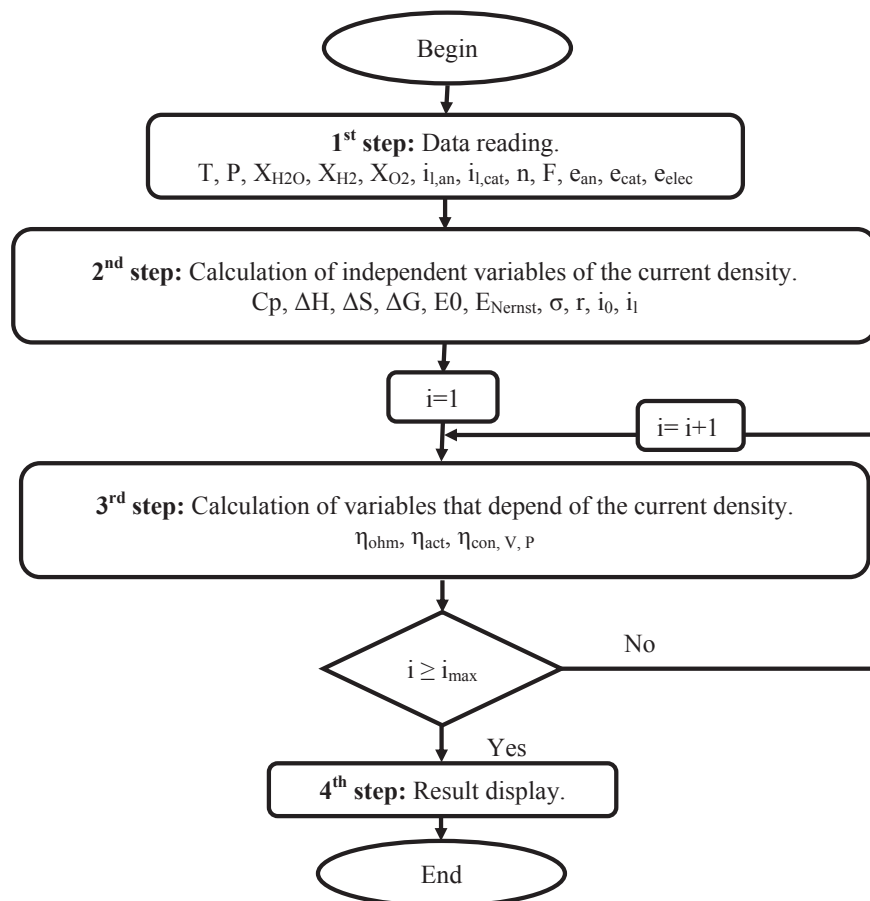


Fig. 2 – Computational algorithm.

Table 5 – The used parameter values in each class.

Parameters	Class 1 Anode thickness	Class 2 Electrolyte thickness	Class 3 Cathode thickness	Class 4 Fuel water content	Class 5 Oxygen concentration	Class 6 Operating temperature	Class 7 Operating pressure
e_{an} , (μm)	50-2000	400	400	400	400	400	400
e_{ele} , (μm)	60	0.2-60	60	60	60	60	60
e_{cat} , (μm)	30	30	0.7-300	30	30	30	30
X_{H_2O} (%)	0.03	0.03	0.03	0.01-0.50	0.03	0.03	0.03
X_{H_2} (%)	0.97	0.97	0.97	0.99-0.50	0.97	0.97	0.97
X_{O_2} (%)	0.21	0.21	0.21	0.21	0.21-0.71	0.21	0.21
T (k)	973	973	973	973	973	973-1168	973
P (bar)	1	1	1	1	1	1	1-3

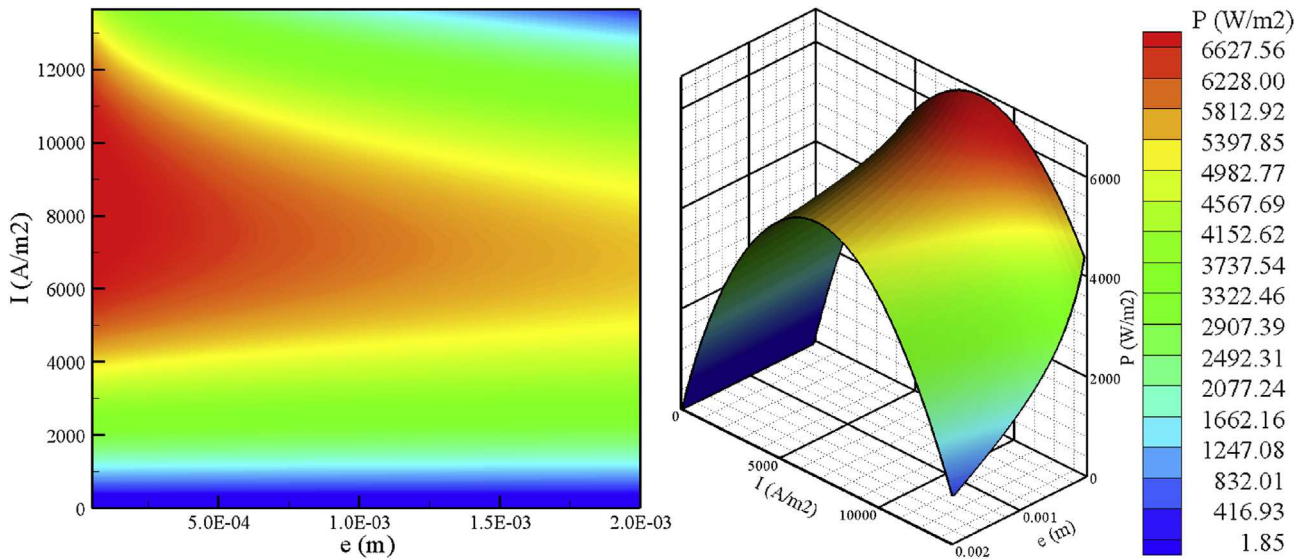


Fig. 3 – Power density evolution according to the current density and the anode thickness.

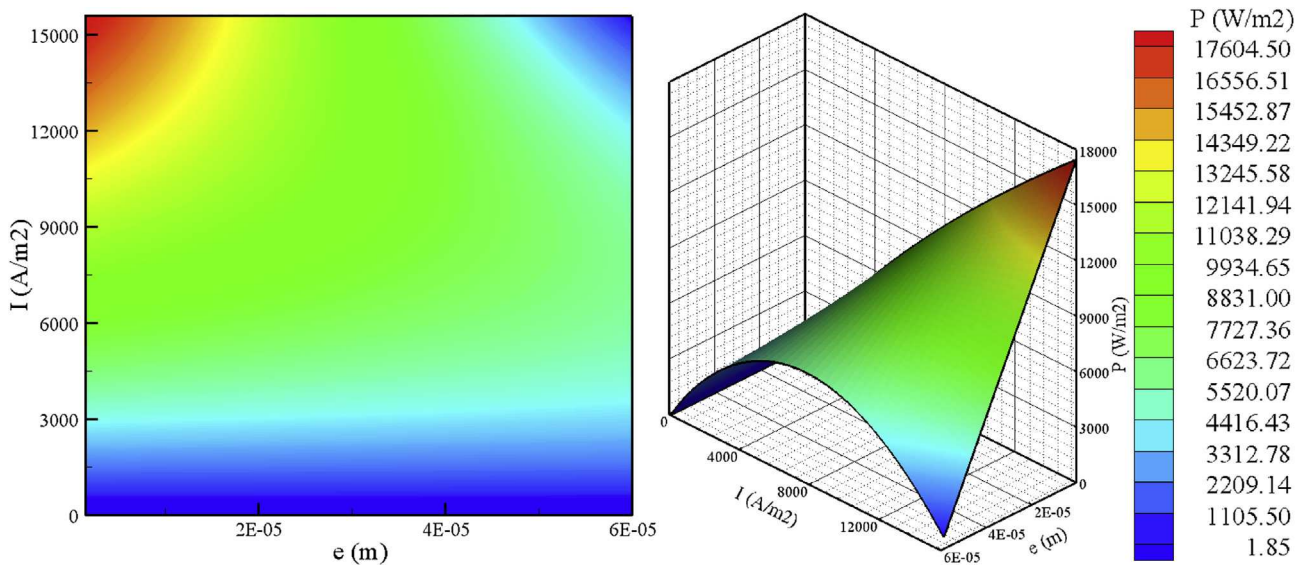


Fig. 4 – Power density evolution according to the current density and the electrolyte thickness.

correspond to the largest sizing of the anode. The highest power density (6627.56 W/m^2) is obtained by the smallest thickness of the anode at a current density of 8400 A/m^2 . The anode thickness enlargement serves to increase the ohmic and concentration polarizations in the anode which logically leads to a reduced the real potential and power density. Therefore, the cell power density is inversely proportional to the anode thickness. This corresponds to the results obtained by Yang et al. [28] and Xu et al. [43].

The presented results in Fig. 4, shows the impact of the electrolyte thickness and current density on the power density of the solid oxide fuel cell. The low power densities have been obtained by the greatest electrolyte thicknesses. The highest obtained power density is about $17,604.5 \text{ W/m}^2$, it corresponds to the smallest electrolyte dimension at a current density of $15,600 \text{ A/m}^2$. The electrolyte thickness enlargement leads to

the electrolytic ohmic loss growth which leads to a reduced potential and a power density of the SOFC. Logically, the power density is inversely proportional to the electrolyte thickness. This corresponds to the results obtained by Xu et al. [43] and Patcharavorachot et al. [44].

The variation in the SOFC power density according to the cathode thickness and current density is presented in Fig. 5. The lowest power densities are obtained by the highest cathode thicknesses. The highest obtained power density is about 5994 W/m^2 , which corresponds to the thinnest cathode at a current density of 7820 A/m^2 . The cathode thickness increasing will result in increased ohmic and cathodic concentration losses which leads to reduced real potential and power density. Therefore, the power density of the SOFC is inversely proportional to the cathode thickness. This

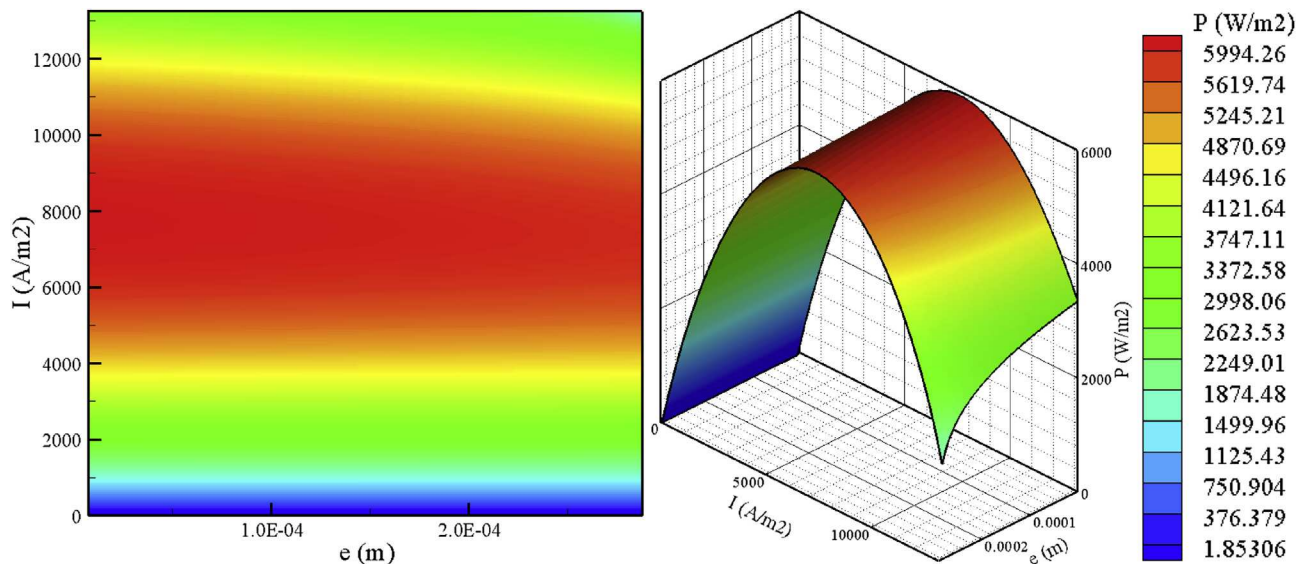


Fig. 5 – Power density evolution according to the current density and the cathode thickness.

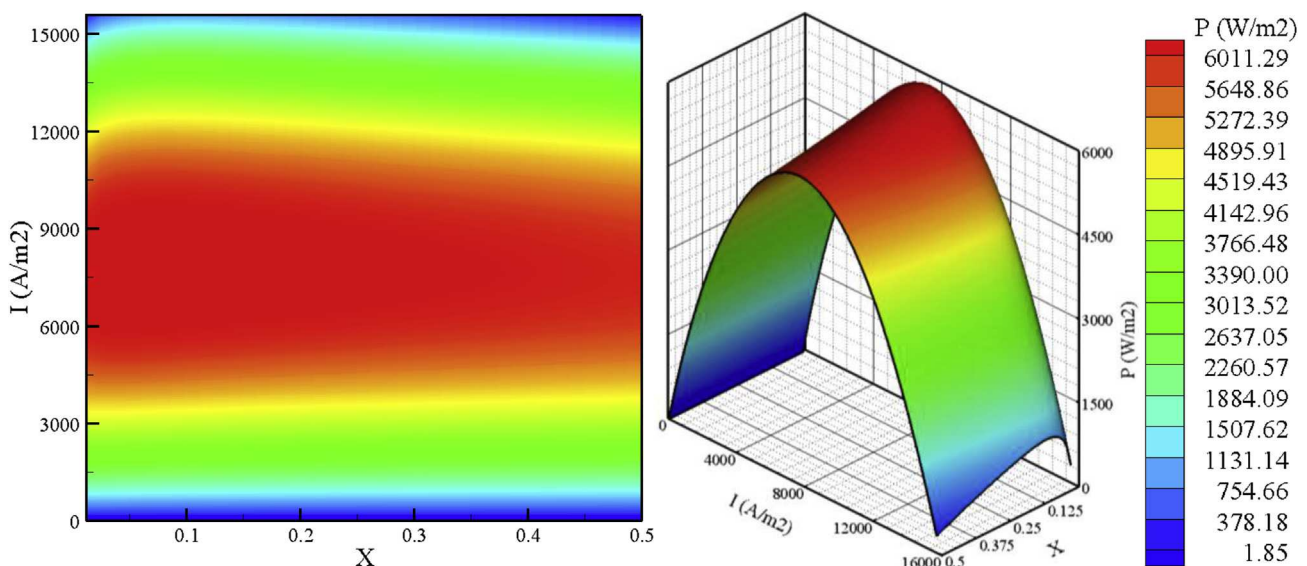


Fig. 6 – Power density evolution according to the current density and the fuel water content.

corresponds to the results obtained by Sahli et al. [12] and Patcharavorachot et al. [44].

Fig. 6 shows the effect of the fuel steam water concentration rate and current density on the produced power density SOFCs. The low power densities are obtained by the largest and smallest water contents. The highest power density (6011.29 W/m^2) is achieved by a water content of 6.25% at a current density of 8000 A/m^2 . The water steam content increase serves the decreasing of the Nernst potential and the concentration loss. Thus the optimum water content that ensures the maximum power density is 6.25%.

Fig. 7 shows the effect of the oxygen concentration in the combustive and current density on the SOFC power density. The low power densities have been achieved by the lowest oxygen concentrations. The highest obtained power density is about 6376 W/m^2 , which corresponds to the highest oxygen

concentration at a current density of 8000 A/m^2 . The oxygen concentration increasing leads to a growth of the Nernst potential and real potential and cathodic concentration loss, which is logically translated by an increased power density. Logically, the SOFC power density is proportional to the oxygen concentration in the combustive. This corresponds to the results obtained by Sahli et al. [12].

The presented results in Fig. 8, shows the effect of the operating temperature and current density on the SOFC power density. The low power densities are obtained by the lower operating temperatures. The highest obtained power density is about to $27,404 \text{ W/m}^2$, that corresponding to the highest operating temperature and the current density of 1168 k and $15,600 \text{ A/m}^2$ respectively. The operating temperature increasing produces an increase of the Nernst potential, a decrease of the anodic, electrolytic and cathodic ohmic losses,

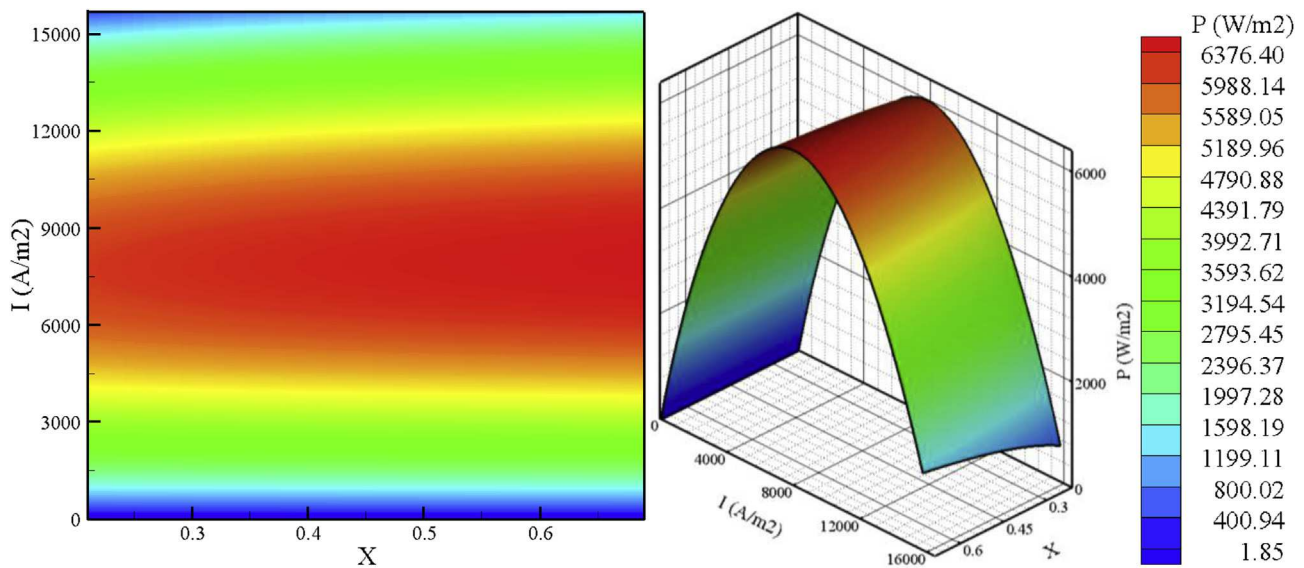


Fig. 7 – Power density evolution according to the current density and the oxygen concentration in the combustive.

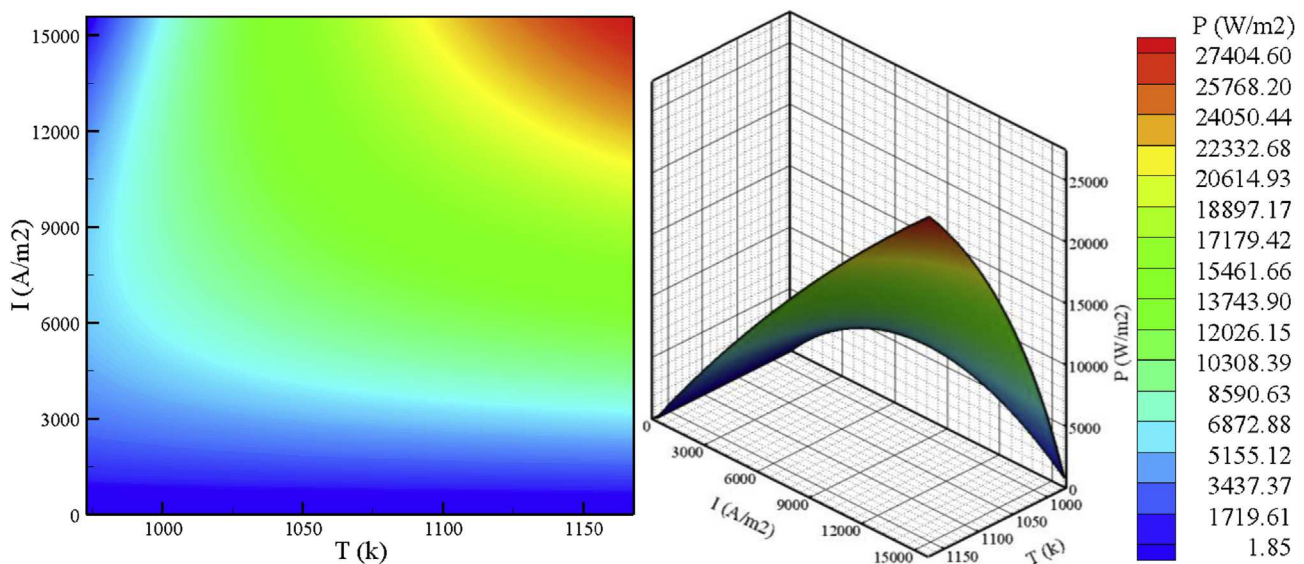


Fig. 8 – Power density evolution according to the current density and the operating temperature.

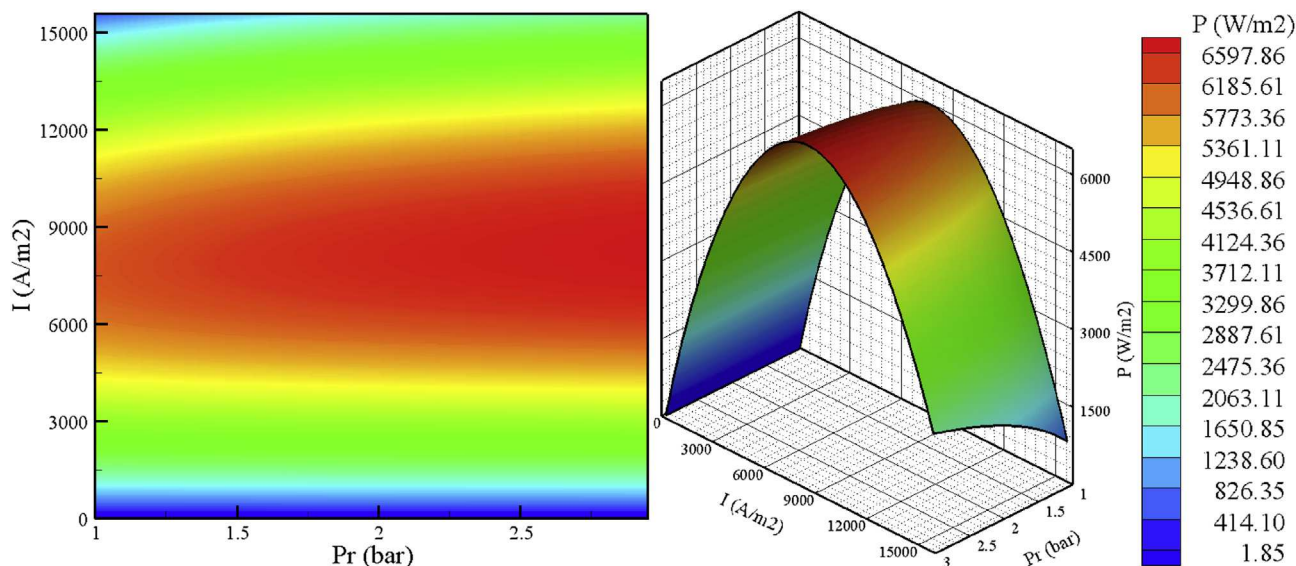


Fig. 9 – Power density evolution according to the current density and the operating pressure.

a decrease of the anodic and cathodic activations losses and an increase of the anodic and cathodic concentration losses which leads to an enhanced real potential and power density. This corresponds to the results obtained by Yang et al. [28] and Xu et al. [43].

Fig. 9 shows the effect of the operating pressure and current density on the power density of the solid oxide fuel cells. The low power densities correspond to the lower operating pressures. The highest power density (6597.86 W/m^2) is achieved by the highest operating pressure at a current density of 8400 A/m^2 . The operating pressure increasing serves to increase the Nernst potential and to decrease the concentration loss which leads to an improved potential and power density. Therefore, the cell power density is proportional to the operating pressure. This corresponds to the results obtained by Yang et al. [28] and AlZahrani et al. [42].

Conclusion

In this work, a graphical optimization study of the produced power density by the solid oxide fuel cells is presented. The used thermodynamic model is defined by the Nernst potential and the three concentration, activation and ohmic losses. A comparison between Tafel and Butler-Volmer formulations was realized to better quantify the activation polarization, the Butler-Volmer general formulation is used in the activation loss calculation. The equations that represent the Nernst potential and the three concentration, activation and ohmic losses are solved using a FORTRAN language program that developed locally.

From the obtained result analyzes, it appears that the obtained results correspond to the results found in the literature and the developed model helped us to understand and explain the behavior and the power density variation according to several parameters. The obtained result principals are: the SOFC power density is inversely proportional to the anode,

electrolyte and cathode thicknesses, the optimum fuel water content that ensures the maximum SOFC power density is 6.25%, The SOFC power density is proportional to the oxygen concentration in the combustive, the operating temperature and the operating pressure.

REFERENCES

- [1] Ramadhani F, Hussain MA, Mokhlis H, Hajimolana S. Optimization strategies for solid oxide fuel cell (SOFC) application: a literature survey. *Renew Sustain Energy Rev* 2017;76:A460–80.
- [2] Shi J, Xue X. Optimization design of electrodes for anode-supported solid oxide fuel cells via genetic algorithm. *J Electrochem Soc* 2010;158:B143.
- [3] Fredriksson Möller B, Arriagada J, Assadi M, Potts I. Optimisation of an SOFC/GT system with CO₂-capture. *J Power Sources* 2004;131:320–6.
- [4] Goyal A, Diwekar U. Multi-objective optimization for hybrid fuel cells power system design. *J Chem Inf Model* 2001;53:1689–709.
- [5] Wen H, Ordonez JC, Vargas JVC. Single solid oxide fuel cell modeling and optimization. *J Power Sources* 2011;196:7519–32.
- [6] François G, Costello S, Bonvin D. Application of real-time optimization methods to energy systems in the presence of uncertainties and disturbances. *TMC Acad J* 2015;9: 19–40.
- [7] Cheddief DF. Thermo-economic optimization of an indirectly coupled solid oxide fuel cell/gas turbine hybrid power plant. *Int J Hydrogen Energy* 2011;36:1702–9.
- [8] Genc Omer, Toros Serkan, Timurkutluk Bora. Geometric optimization of an ejector for a 4 kW SOFC system with anode off-gas recycle. *Int J Hydrogen Energy* 2018;43:9413–22.
- [9] Gholamian Ehsan, Hanafizadeh Pedram, Ali Habibollahzade, Ahmadi Pouria. Evolutionary based multi-criteria optimization of an integrated energy system with SOFC, gas turbine, and hydrogen production via electrolysis. *Int J*

- Hydrogen Energy 2018;43:16201–14. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2018.06.130>.
- [10] Choudhary Tushar, Sanjay. Thermodynamic assessment of SOFC-ICGT hybrid cycle: energy analysis and entropy generation minimization. *Energy* 2017;134:1013–28. <https://doi.org/10.1016/j.energy.2017.06.064>.
- [11] Choudhary Tushar, Sanjay. Novel and optimal integration of SOFC-ICGT hybrid cycle: energy analysis and entropy generation minimization. *Int J Hydrogen Energy* 2017;42:15597–612.
- [12] Sahli Y, Zitouni B, Ben-Moussa H. Solid oxide fuel cell thermodynamic study. *Çankaya Univ J Sci Eng* 2017;14:134–51.
- [13] Ben Moussa H, Zitouni B, Oulmi K, Mahmah B, Belhamel M, Mandin P. Hydrogen consumption and power density in a co-flow planar SOFC. *Int J Hydrogen Energy* 2009;34:5022–31.
- [14] Zitouni B, Ben-Moussa H, Oulmi K. Studying on the increasing temperature in IT-SOFC: effect of heat sources. *J Zhejiang Univ Sci A* 2007;9:1500–4.
- [15] Zitouni B, Andreadis GM, Ben-Moussa H, Abdenebi H, Haddad D, Zeroual M. Two-dimensional numerical study of temperature field in an anode supported planar SOFC: effect of the chemical reaction. *Int J Hydrogen Energy* 2011;36:4228–35.
- [16] Zitouni B, Ben-Moussa H, Oulmi K, Saighi S, Chetehouna K. Temperature field, H₂ and H₂O mass transfer in SOFC single cell: electrode and electrolyte thickness effects. *Int J Hydrogen Energy* 2009;34:5032–9.
- [17] Abdenebi H, Zitouni B, Haddad D, Ben-Moussa H, George MA, Abdessem S. SOFC fuel cell heat production: analysis. *Energy Procedia* 2011;6:643–50.
- [18] Oulmi K, Zitouni B, Ben-Moussa H, Abdenebi H, Andreadis GM. Total polarization effect on the location of maximum temperature value in planar SOFC. *Int J Hydrogen Energy* 2011;36:4236–43.
- [19] Haddad D, Abdenebi H, Zitouni B, Ben-Moussa H, Oulmi K. Thermal field in SOFC fed by hydrogen: inlet gases temperature effect. *Int J Hydrogen Energy* 2013;38:8575–83.
- [20] Abdenebi H, Zitouni B, Ben-Moussa H, Haddad D, Zitouni H, Sahli Y. Inlet methane temperature effect at a planar SOFC thermal field under direct internal reforming condition. In: Dincer I, Ozgur Colpan C, Kizilkan O, Akif Ezan M, editors. *Progress in clean energy volume II: novel systems and applications*. Switzerland: Springer; 2015. p. 567–81.
- [21] Abdenebi H, Zitouni B, Ben-Moussa H, Haddad D. Thermal field in SOFC fed by CH₄: molar fractions effect. *J Assoc Arab Univ Basic Appl Sci* 2015;17:82–9.
- [22] Sahli Y, Zitouni B, Ben-Moussa H, Abdenebi H. Three-dimensional numerical study of the heat transfer on the planar solid oxide fuel cell: joule's effect. In: Dincer I, Ozgur Colpan C, Kizilkan O, Akif Ezan M, editors. *Progress in clean energy volume I: analysis and modeling*. Switzerland: Springer; 2015. p. 449–61.
- [23] Kumar Narahariseti Pavan, Lakshminarayanan S, Karimi IA. Design of biomass and natural gas based IGFC using multi-objective optimization. *Energy* 2014;73:635–52.
- [24] Kakaça Sadik, Pramuanjaroenkij Anchasa, Yang Zhou Xiang. A review of numerical modeling of solid oxide fuel cells. *Int J Hydrogen Energy* 2007;32:761–86.
- [25] Burt AC, Celik IB, Gemmen RS, Smirnov AV. A numerical study of cell-to-cell variations in a SOFC stack. *J Power Sources* 2004;126:76–87.
- [26] Yang Wenyuan, Zhao Yingru, Liso Vincenzo, Brandon Nigel. Optimal design and operation of a syngas-fuelled SOFC micro-CHP system for residential applications in different climate zones in China. *Energy and Build* 2014;80:613–22.
- [27] Choudhary Tushar, Sanjay. Computational analysis of IR-SOFC: thermodynamic, electrochemical process and flow configuration dependency. *Int J Hydrogen Energy* 2016;41:1259–71.
- [28] Yang Shuangqiao, Chen Tao, Wang Ying, Peng Zhenbo, Wang Wei Guo. Electrochemical analysis of an anode-supported SOFC. *Int J Electrochem Sci* 2013;8:2330–44.
- [29] Ferguson JR, Fiard JM, Herbin R. Three-dimensional numerical simulation for various geometries of solid oxide fuel cells. *J Power Sources* 1996;58:109–22.
- [30] Andreassi Luca, Rubeo Giampiero, Ubertini Stefano, Lunghi Piero, Bove Roberto. Experimental and numerical analysis of a radial flow solid oxide fuel cell. *Int J Hydrogen Energy* 2007;32:4559–74.
- [31] Zhang Xiongwen, Li Guojun, Li Jun, Feng Zhenping. Numerical study on electric characteristics of solid oxide fuel cells. *Energy Convers Manag* 2007;48:977–89.
- [32] Lee Kanghun, Kang Sanggyu, Ahn Kook-Young. Development of a highly efficient solid oxide fuel cell system. *Appl Energy* 2017;205:822–33.
- [33] Azizi Mohammad Ali, Brouwer Jacob, Dunn-Rankin Derek. Analytical investigation of high temperature 1 kW solid oxide fuel cell system feasibility in methane hydrate recovery and deep ocean power generation. *Appl Energy* 2016;179:909–28.
- [34] Farida Harun Nor, Tucker David, Thomas A. Adams II. Impact of fuel composition transients on SOFC performance in gas turbine hybrid systems. *Appl Energy* 2016;164:446–61.
- [35] Kang Sanggyu, Ahn Kook-Young. Dynamic modeling of solid oxide fuel cell and engine hybrid system for distributed power generation. *Appl Energy* 2017;195:1086–99.
- [36] Perna Alessandra, Minutillo Mariagiovanna, Jannelli Elio, Cigolotti Viviana, Woo Nam Suk, Joong Yoon Kyung. Performance assessment of a hybrid SOFC/MGT cogeneration power plant fed by syngas from a biomass down-draft gasifier. *Appl Energy* 2018;227:80–91. <https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2017.08.077>.
- [37] Minutillo M, Perna A, Jannelli E. SOFC and MCFC system level modeling for hybrid plants performance prediction. *Int J Hydrogen Energy* 2014;39:21688–99.
- [38] Pramuanjaroenkij Anchasa, Kakac Sadik, Zhou Xiang Yang. Mathematical analysis of planar solid oxide fuel cells. *Int J Hydrogen Energy* 2008;33:2547–65.
- [39] Zhao Yingru, Ou Congjie, Chen Jincan. A new analytical approach to model and evaluate the performance of a class of irreversible fuel cells. *Int J Hydrogen Energy* 2008;33:4161–70.
- [40] Ali Azizi Mohammad, Brouwer Jacob. Progress in solid oxide fuel cell-gas turbine hybrid power systems: system design and analysis, transient operation, controls and optimization. *Appl Energy* 2018;215:237–89.
- [41] Dang Saebea, Authayanun Suthida, Patcharavorachot Yaneeporn, Paengjuntuek Woranee, Arpornwihanop Amornchai. Use of different renewable fuels in a steam reformer integrated into a solid oxide fuel cell: theoretical analysis and performance comparison. *Energy* 2013;51:305–13.
- [42] Abdullah AlZahrani, Dincer I, Li Xianguo. A performance assessment study on solid oxide fuel cells for reduced operating temperatures. *Int J Hydrogen Energy* 2015;40:7791–7.
- [43] Han Xu, Zheng Dang, Bai Bo-Feng. Electrochemical performance study of solid oxide fuel cell using lattice Boltzmann method. *Energy* 2014;67:575–83.
- [44] Patcharavorachot Yaneeporn, Brandon NP, Paengjuntuek Woranee, Assabumrungrat Suttichai, Arpornwihanop Amornchai. Analysis of planar solid oxide fuel cells based on proton-conducting electrolyte. *Solid State Ionics* 2010;181:1568–76.

Résumé

Ce travail est appuyé sur l'étude thermodynamique et thermique d'une cellule élémentaire d'une pile à combustible à oxyde solide (SOFC), selon les différents paramètres : géométrique, physique et électrochimique, etc...

Dans ce contexte, notre intérêt est axé sur l'étude des comportements thermodynamiques des SOFC et l'analyse des distributions de température dans le cas d'équilibre selon une géométrie tridimensionnelle qui comptabilise la production de chaleur due aux pertes ohmique, concentration, électrochimique et d'activation.

Abstract

This work is based on the thermodynamic and thermal study of an elementary cell of a solid oxide fuel cell (SOFC), according to the different parameters: geometric, physical and electrochemical ... etc.

In this context, our interest is focused on the study of the SOFC thermodynamic behaviour and the analysis of the temperature distributions in the steady-state case according to a three-dimensional geometry that counts the heat production due to the Ohmic, concentration, electrochemical and activation losses.

ملخص

يستند هذا العمل الى دراسة حروديناميكية وحرارية لخلية أحادية من الخلايا الوقودية ذات الأكسيد الصلب (SOFC)، وفقا لمعايير مختلفة: هندسية، فيزيائية وكهروكيميائية، الخ...

في هذا السياق، تركز اهتمامنا على دراسة السلوك الحراري وتحليل التوزيعات الحرارية في حالة مستقرة وفقا لهندسة ثلاثية الأبعاد التي تنسب إنتاج الحرارة الى الخسائر الأومية، التركيزية، الكهروكيميائية والتفعلية.