

# THÈSE

Présentée en vue de l'obtention du grade de

## DOCTEUR

délivré conjointement par

**L'UNIVERSITE DE TECHNOLOGIE DE BELFORT-MONTBELIARD**

et par

**L'UNIVERSITE DE FRANCHE COMTE**

**Spécialité:** Sciences pour l'ingénieur - Automatique

Soutenue publiquement le 19 décembre 2008

par

**Abdelkrim SALAH**

**Simulation et contrôle de l'aspect thermique d'une pile  
à combustible PEMFC**

### JURY

Pascal LORENZ	Président	Professeur Université Haute Alsace, Colmar
Mohamed BOUTAYEB	Rapporteur	Professeur Université Henri Poincaré, Nancy
Tarek EL-GHANZAWI	Rapporteur	Professeur University of George Washington, USA
Abdellah EL MOUDNI	Examineur	Professeur Université UTBM, Belfort
Jaafar GABER	Co-directeur	Maître de Conférences Université UTBM, Belfort
Rachid OUTBIB	Directeur	Professeur Université Aix-Marseille

## Résumé :

Le travail de cette thèse est dédié aux problèmes de la gestion thermique de la pile à combustible PEMFC destinée au transport automobile. En effet, 50% de l'énergie produite par la pile est transformée en chaleur. L'utilisation effective et optimale de la pile nécessite une bonne compréhension du champ thermique afin de contrôler les flux de chaleur qui la traverse.

Dans la première partie de cette thèse, nous avons développé l'approche nodale, inspirée de l'analogie thermique-électrique, pour un cas de transfert thermique couplé conduction-convection. Cette approche présente l'avantage d'une part, de présenter le phénomène thermique dans la pile à combustible sans avoir recours au couplage entre codes de calculs, et d'autre part, sa mise en œuvre pour le calcul intensif. Nous montrerons que les temps des simulations sont considérablement réduits.

Dans la deuxième partie de cette thèse, nous avons exploité l'approche nodale pour la régulation de la température de la pile. Nous avons obtenu un modèle d'état qui révèle un lien bilinéaire entre la variable d'état représentée par la température et les entrées du système. Nous montrerons dans ce travail qu'il est possible de réguler par rétroaction la température de la pile à combustible autour d'un point de fonctionnement choisi.

**Mots Clés :** Pile à combustible, PEMFC, comportement thermique, approche nodale, calcul intensif, systèmes bilinéaires, stabilisation par retour d'état, systèmes non-linéaires.

## Abstract :

This thesis deals with contribution to thermal problems of PEM Fuel Cell. In fact, since the chemical conversion of energy stored within the fuel cell is accompanied by the production of an important thermal energy (50%), it is most important to understand the thermal behavior of fuel cell. Majority of models involves complex systems of heat differential equations. In addition, PEMFC presents a heterogeneous system and thermal coupling of conduction-convection involves complex partial differential equations, and their solution can not be done within a reasonable amount of time by sequential program.

In the first part of this work, seeking reliable and simple method for study of thermal behavior phenomena, we have developed the nodal approach that result from a formal analogy between analogical circuits and their counterpart's phenomena. In this approach, we can represent the two phenomena of conduction-convection without any coupling of with another approach of representation. It will be shown in this thesis that this model presents high scalability and parallel processing characteristics that make it suitable for simulation on parallel machines or a network of workstations.

In the second part of this work, we have interested to the control of the temperature of fuel cell. The model inspired by the nodal approach that we have developed is in the bilinear form. We propose a result on feedback stabilization of thermal behavior of PEM Fuel Cell.

**keywords :** PEM Fuel Cells, thermal behavior, nodal approach, parallel processing, bilinear systems, feedback stabilization, nonlinear systems.

# Remerciements

Le travail présenté dans ce mémoire a été effectué conjointement au sein du laboratoire Systèmes et Transports (SeT) de l'Université de Technologie de Belfort Montbéliard (UTBM) et du laboratoire des sciences de l'information et des systèmes (LSIS) de l'université saint Jérôme de Marseille.

Je tiens en premier lieu à remercier Monsieur Rachid OUTBIB professeur au LSIS à Marseille et directeur de thèse. Je tiens à lui exprimer ma profonde gratitude pour ses conseils pertinents et sa longue patience. Ses remarques ont fait évoluer très sensiblement ce travail.

Je remercie sincèrement Monsieur Jaafar GABER, Maître de Conférences à l'UTBM et co-encadrant de la thèse, pour son aide tout au long de ce travail de recherche, ses remarques m'ont été d'une grande utilité.

Je tiens à remercier Monsieur Mohamed BOUTAYEB, Professeur à l'Université Henri Poincaré de Nancy et Monsieur Tarek EL-GHANZAWI, Professeur à l'Université George Washington aux USA d'avoir accepté la charge de rapporter mon travail.

Que Monsieur Pascal LORENZ, Professeur à l'Université Haute Alsace à Colmar, reçoive tout mon profond respect pour l'honneur qu'il m'a fait en acceptant de juger ce travail.

Que mes collègues du laboratoire SeT et du laboratoire LSIS trouvent ici l'expression de ma gratitude, leur gentillesse et leur disponibilité ont grandement contribué à rendre ce travail agréable.

Mes remerciements s'adressent également à ma famille et à tous mes amis pour leur encouragement et leur soutien permanents.



*A mes très chers parents  
A mes frères et sœurs  
Avec Tendresse  
A la mémoire de ma belle sœur Rachida*



# Table des matières

<b>Table des figures</b>	<b>xiii</b>
<b>Liste des tableaux</b>	<b>xvii</b>
<b>Introduction générale</b>	<b>5</b>
<b>Chapitre 1 Généralités sur la pile à combustible</b>	<b>9</b>
1.1 Introduction . . . . .	9
1.2 Le fonctionnement général de la pile . . . . .	9
1.2.1 Thermodynamique de la pile . . . . .	10
1.2.2 Rendement d'une pile à combustible . . . . .	11
1.2.3 Fonctionnement réversible . . . . .	13
1.2.4 Fonctionnement irréversible . . . . .	13
1.2.4.1 Phénomènes de polarisation . . . . .	13
1.2.4.2 Exemple d'un transfert électronique . . . . .	14
1.2.4.3 Les pertes . . . . .	17
1.3 Les différents types de piles à combustible . . . . .	18
1.3.1 Classification . . . . .	18
1.3.2 Caractérisation . . . . .	19
1.3.3 Température de fonctionnement . . . . .	20
1.3.4 Temps de réponse . . . . .	20
1.3.5 Les combustibles . . . . .	21
1.4 Durée de vie de la pile . . . . .	21
1.5 La pile du type PEMFC . . . . .	21
1.6 Description d'une cellule . . . . .	24
1.6.1 Le Stack d'une PEMFC . . . . .	25
1.6.2 Description de l'assemblage en série . . . . .	25

1.6.3	Description de l'assemblage en parallèle . . . . .	26
1.7	Paramètres influant sur le fonctionnement de la PEMFC . . . . .	27
1.7.1	Paramètres liés à la membrane . . . . .	27
1.7.2	Paramètres liés à la réaction aux électrodes . . . . .	29
1.7.3	Paramètres liés à la densité de courant . . . . .	29
1.7.4	Paramètres liés aux propriétés physique de la cellule . . . . .	30
1.8	Classification des modèles thermique d'une PEMFC . . . . .	30
1.8.1	Classification tenant en compte la température . . . . .	31
1.8.1.1	Modèles isothermes . . . . .	31
1.8.1.2	Modèles non isothermes . . . . .	31
1.8.2	Classification à l'échelle système . . . . .	32
1.8.2.1	Modèles partiels . . . . .	32
1.8.2.2	Modèles complets . . . . .	33
1.8.3	Classification selon la dimension du problème . . . . .	33
1.9	Modélisation thermique d'une PEMFC . . . . .	34
1.10	Simulation de la pile . . . . .	35
1.11	Optimisation du système pile à combustible . . . . .	36
1.11.1	Pression . . . . .	36
1.11.2	Température . . . . .	37
1.11.3	Taux d'utilisation . . . . .	37
1.11.4	Taux d'humidification des gaz . . . . .	37
1.11.5	Refroidissement de la PEMFC . . . . .	38
1.11.5.1	Refroidissement à l'eau . . . . .	40
1.11.5.2	Refroidissement par circulation d'air à la cathode . . . . .	40
1.11.5.3	Refroidissement par circulation d'air séparée . . . . .	40
1.11.5.4	Refroidissement avec écarteurs de chaleur . . . . .	41
1.12	Conclusion . . . . .	41
<b>Chapitre 2 Modélisation du comportement thermique d'une PEMFC</b>		<b>43</b>
2.1	Introduction . . . . .	43
2.2	Notions sur les transferts de chaleur . . . . .	45
2.2.1	Transfert de chaleur par conduction : l'équation de conservation de l'énergie . . . . .	46
2.2.2	Conduction thermique dans les milieux composés . . . . .	49
2.2.3	Transfert de chaleur par convection . . . . .	49

---

2.2.4	Principe de la résistance thermique . . . . .	50
2.3	Méthodologies de modélisation du comportement thermique d'une pile . .	51
2.3.1	Méthodes CFD . . . . .	52
2.3.1.1	Différences finies . . . . .	52
2.3.1.2	Volumes finis . . . . .	53
2.3.1.3	Eléments finis . . . . .	53
2.3.2	Méthode nodale . . . . .	53
2.4	Problème de couplage . . . . .	55
2.5	Conclusion . . . . .	58
<b>Chapitre 3 Modèle nodal pour une pile à combustible</b>		<b>59</b>
3.1	Introduction . . . . .	59
3.2	Objectif de l'étude . . . . .	59
3.3	Système considéré . . . . .	60
3.4	Formulation mathématique du problème thermique . . . . .	60
3.5	Modèle nodal global . . . . .	61
3.5.1	Description du modèle . . . . .	61
3.5.2	Bilan sur le solide . . . . .	65
3.5.3	Bilan sur le fluide . . . . .	65
3.5.4	Calcul des conductances . . . . .	67
3.5.4.1	Les électrodes . . . . .	68
3.5.4.2	Les canaux des gaz . . . . .	68
3.5.5	Calcul des débits . . . . .	69
3.5.5.1	Débit du gaz . . . . .	69
3.5.5.2	Débit d'eau de refroidissement . . . . .	70
3.5.6	Conditions aux limites . . . . .	71
3.6	Calcul des termes sources . . . . .	72
3.7	Conclusion . . . . .	74
<b>Chapitre 4 Taxonomie des langages et machines parallèles</b>		<b>77</b>
4.1	Introduction . . . . .	77
4.2	Paradigmes de la programmation parallèle . . . . .	78
4.3	Architectures parallèles . . . . .	80
4.3.1	Architectures SIMD . . . . .	81
4.3.2	Architectures MIMD . . . . .	82

4.3.2.1	Architectures MIMD à mémoire partagée . . . . .	82
4.3.2.2	Architectures MIMD à mémoire distribuée . . . . .	83
4.4	Les langages parallèles . . . . .	83
4.4.1	L'API PVM . . . . .	84
4.4.2	L'API MPI . . . . .	86
4.4.2.1	Passage de messages . . . . .	86
4.4.2.2	Distribution des données . . . . .	87
4.4.2.3	Les messages . . . . .	87
4.4.3	L'API UPC . . . . .	87
4.5	Les bibliothèques spécifiques . . . . .	88
4.5.1	ScaLAPACK . . . . .	88
4.5.1.1	Blas . . . . .	89
4.5.1.2	LAPACK . . . . .	89
4.5.1.3	BLACS . . . . .	90
4.6	Evaluation d'un programme parallèle . . . . .	90
4.6.1	Calcul du speed up . . . . .	90
4.6.2	Calcul du travail . . . . .	91
4.6.3	Calcul de l'efficacité . . . . .	91
4.7	Conclusion . . . . .	92
<b>Chapitre 5 Mise en œuvre parallèle de l'approche nodale</b>		<b>93</b>
5.1	Introduction . . . . .	93
5.2	Parallélisation avec PVM . . . . .	94
5.2.1	Découpage . . . . .	95
5.2.2	Calcul des points . . . . .	96
5.2.3	Performances des calculs . . . . .	97
5.3	Parallélisation avec MPI . . . . .	99
5.3.1	Découpage en bloc . . . . .	99
5.3.2	Composition des blocs . . . . .	99
5.3.3	Découpage en volumes . . . . .	100
5.4	Précalculation des coefficients d'échanges . . . . .	100
5.4.1	Principe . . . . .	100
5.4.2	Structure de stockage . . . . .	101
5.5	Calcul distribué . . . . .	101
5.5.1	Allocation des tableaux . . . . .	101

---

5.5.2	Transfert et Calcul parallèle . . . . .	102
5.5.3	Transfert sans copie . . . . .	102
5.5.4	Echange des données durant le calcul . . . . .	103
5.5.5	Réduction du nombre de transfert . . . . .	103
5.6	Optimisation de la simulation . . . . .	103
5.6.1	Répartition de la charge . . . . .	103
5.6.2	Changement de granularité . . . . .	104
5.7	Interface de simulation dédié . . . . .	105
5.7.1	Description de l'interface . . . . .	105
5.7.2	Exploitation des résultats . . . . .	106
5.8	Performances du modèle nodal global . . . . .	107
5.8.1	Simulation en séquentiel . . . . .	107
5.8.1.1	Transformation du modèle . . . . .	107
5.8.1.2	Modèle sous forme compacte . . . . .	108
5.8.1.3	Résolution par la méthode séquentielle . . . . .	109
5.8.2	Simulation avec MPI . . . . .	109
5.8.2.1	Calcul du speedup . . . . .	109
5.8.2.2	Performances de l'algorithme . . . . .	110
5.8.2.3	Apport de la granularité . . . . .	112
5.9	Simulation avec UPC . . . . .	112
5.9.1	Distribution du réseau nodal sur les machines . . . . .	112
5.9.2	Performances de la simulation . . . . .	113
5.10	Performances du modèle FDM . . . . .	114
5.10.1	Simulation du comportement thermique d'une cellule . . . . .	115
5.10.2	Simulation du stack . . . . .	117
5.11	Comparaison entre le modèle nodale et le modèle des différences finies . . . . .	118
5.12	Comportement thermique de la pile . . . . .	118
5.12.1	Comportement d'une cellule . . . . .	118
5.12.2	Effet du courant . . . . .	119
5.12.3	Comportement du stack . . . . .	120
5.12.4	Température des gaz d'alimentation . . . . .	122
5.12.5	Intégration du refroidissement . . . . .	124
5.13	Conclusion . . . . .	124

<b>Chapitre 6 Contrôle du comportement thermique de la pile</b>	<b>127</b>
6.1 Introduction . . . . .	127
6.2 Généralités sur les modèles d'état . . . . .	128
6.2.1 Modèles à paramètres répartis . . . . .	129
6.2.2 Modèles à paramètres localisés . . . . .	129
6.3 Modèles d'état pour une pile PEMFC . . . . .	130
6.3.1 Introduction . . . . .	130
6.3.2 Principe de la modélisation . . . . .	131
6.3.3 Hypothèses de travail . . . . .	132
6.3.4 Modèles considérés . . . . .	133
6.3.4.1 Cas de grandes puissances . . . . .	133
6.3.4.2 Cas de petites puissances . . . . .	140
6.3.5 Aspects technologiques de la pile . . . . .	143
6.3.5.1 Paramètres et plages de fonctionnement . . . . .	143
6.3.5.2 Principe du refroidissement . . . . .	147
6.3.5.3 Dimensionnement de l'échangeur . . . . .	149
6.4 Stratégie du contrôle . . . . .	151
6.4.1 Exemple en boucle ouverte . . . . .	151
6.4.2 Mise en forme du modèle . . . . .	152
6.4.3 Choix du point de fonctionnement . . . . .	156
6.4.4 Contrôle du comportement thermique . . . . .	157
6.4.4.1 Méthodologies pour le contrôle . . . . .	157
6.4.4.2 Synthèse de la loi de commande . . . . .	159
6.4.5 Exemples numériques . . . . .	160
6.5 Conclusion . . . . .	172
<b>Conclusion et perspectives</b>	<b>173</b>
<b>Bibliographie</b>	<b>177</b>
<b>Annexe 1</b>	<b>185</b>
1 Paramètres de la pile à combustible . . . . .	185
<b>Annexe 2</b>	<b>191</b>
1 Approche modale . . . . .	191

# Table des figures

1.1	a-Cycle thermo-électrique de production de l'énergie. b-Cycle électro-chimique de production de l'énergie. . . . .	9
1.2	Bilan thermodynamique sur la pile. . . . .	10
1.3	Cycle de Carnot d'une machine thermique . . . . .	12
1.4	Transfert électronique entre une électrode métallique et ses ions. . . . .	15
1.5	Caractéristique tension-courant d'une cellule. . . . .	18
1.6	Classification des piles à combustible. . . . .	19
1.7	Fonctionnement d'une PàC. . . . .	23
1.8	Représentation d'une cellule d'une PàC dans un stack. . . . .	25
1.9	Assemblage verticale. . . . .	26
1.10	Assemblage en bande. . . . .	26
1.11	Assemblage en parallèle. . . . .	27
1.12	Exemple d'évolution de la résistance d'une membrane en NAFION 117 de $9\text{ cm}^2$ et la charge en eau [Gerbraux, 1996]. . . . .	28
2.1	Élément de volume du milieu . . . . .	46
2.2	Analogie électricité-thermique : conduction 1D et stationnaire. . . . .	51
2.3	Méthode nodale. . . . .	54
2.4	Couplage Flux/Température [Montenay, 2000]. . . . .	56
2.5	Modélisation thermique de la PàC par l'approche nodale. . . . .	57
2.6	Model Nodal. . . . .	57
3.1	Circuit analogie thermique/électrique d'une cellule PEMFC incluant les gaz d'alimentations et le circuit eau. . . . .	62
3.2	Echange entre un nœud (x,y,z) et ses voisins. . . . .	63
3.3	Écoulement dans un tube. . . . .	63
3.4	Schéma des conductances fluides pour le nœud (i,j,k). . . . .	66

3.5	Réseau nodal pour un niveau donné. . . . .	68
4.1	Paradigme de la programmation parallèle. . . . .	79
4.2	Le modèle d'exécution SIMD. . . . .	82
4.3	Modèle d'exécution MIMD à mémoire partagée. . . . .	83
4.4	Modèle d'exécution MIMD à mémoire distribuée. . . . .	84
4.5	Différentes implantations possibles. . . . .	85
4.6	La machine PVM. . . . .	85
4.7	Paradigme de passage de messages. . . . .	86
4.8	Distribution des données. . . . .	87
4.9	Échanges de messages entre processeurs. . . . .	87
4.10	Structure de ScaLAPACK. . . . .	89
5.1	Découpage de la cellule de la PàC. . . . .	94
5.2	Evolution de l'accélération suivant le nombre de machines. . . . .	98
5.3	Evolution de l'accélération suivant la taille du réseau nodal et le nombre de machines. . . . .	98
5.4	Répartition des données sur les nœuds et système de données. . . . .	102
5.5	Changement de granularité. . . . .	104
5.6	Modules de l'interface J-CELL. . . . .	105
5.7	Interface J-CELL : cas d'un stack à deux cellules séparées par un canal à eau. . . . .	107
5.8	Exemple de transformation. . . . .	108
5.9	Performances de MPI sur un cluster Athlon XP 2800+. . . . .	111
5.10	Performances de MPI sur le cluster Myrinet. . . . .	112
5.11	Evolution de la température avec les variations de la granularité. . . . .	113
5.12	Performances de l'UPC sur le cluster Myrinet. . . . .	114
5.13	Champs des températures dans une cellule. . . . .	116
5.14	Evolution du <b>diff</b> en fonction du temps. . . . .	116
5.15	Evolution du <b>diff</b> en fonction du temps : cas d'un stack de 4 cellules avec un refroidissement au milieu. . . . .	117
5.16	Comparaison entre GNM et FDM. . . . .	118
5.17	Visualisation du champs de température dans une cellule (logiciel J-CELL). . . . .	119

---

5.18	Champ de températures pour une cellule lorsque les gaz sont préchauffés et humidifiés : $\phi_a = 0.5, \phi_c = 0.5, T_{eau} = T_{H_2} = T_{Air} = 343.K$ , $I$ de 1.5 à $3Acm^{-2}$ . . . . .	120
5.19	Visualisation du comportement thermique d'un stack formé par six cellules séparées par un refroidissement à l'aide du logiciel J-CELL. . . . .	121
5.20	Contour des températures pour un stack formé de 6 cellules séparées par un refroidissement. . . . .	122
5.21	Variation des températures dans le stack. . . . .	122
5.22	Champ des températures dans les canaux d'alimentation. . . . .	123
5.23	Différence de température entre l'entrée et la sortie des canaux des gaz. . .	124
5.24	Profils des températures pour deux cellules séparées par un canal eau : $m_e = 2.5g/s$ et $m_e = 4.5g/s$ respectivement. . . . .	125
6.1	Principe de l'analogie thermique-électrique. . . . .	131
6.2	Modèle thermique-électrique équivalent de la PàC. . . . .	132
6.3	Modélisation en vue de la commande. . . . .	133
6.4	Refroidissement de la pile à combustible. . . . .	148
6.5	Distribution des températures dans un condenseur (à gauche) et dans un évaporateur (à droite). . . . .	149
6.6	Evolution de la température dans le compartiment cathode en l'absence du refroidissement. . . . .	151
6.7	Tracé du déterminant de $\bar{A}(Q)$ en fonction de $Q$ . . . . .	154
6.8	Schéma de contrôle. . . . .	157
6.9	Résultats des simulations pour une température de consigne de $78^\circ C$ . . . .	162
6.10	Résultats des simulations pour une température de consigne de $80^\circ C$ . . . .	164
6.11	Résultats des simulations pour une température de consigne de $80^\circ C$ . . . .	172



# Liste des tableaux

1.1	Rendement pour différentes valeurs de températures. . . . .	12
2.1	Analogie grandeurs électriques-grandeurs thermiques. . . . .	55
5.1	Temps de simulation en séquentiel pour des matrices de différentes tailles. .	109
6.1	Constantes communes aux différentes piles. . . . .	144
6.2	Constantes liées au fluide. . . . .	145
6.3	Plage de fonctionnement des grandeurs physiques. . . . .	145
6.4	Valeur du courant d'échange en fonction de la pression [ <a href="#">Friede, 2004</a> ]. . . .	145
6.5	Paramètres de simulation. . . . .	161
6.6	Dimension de la PàC. . . . .	163
1	Surfaces d'échange entre nœuds. . . . .	185
2	Expression des conductances d'une cellule de la pile. . . . .	186
3	Conductances du modèle de la pile. . . . .	187
4	Conductances du modèle de pile (suite). . . . .	188
5	Volumes des nœuds. . . . .	189
6	Capacités thermiques des nœuds. . . . .	190



# Nomenclature

## Lettres Latines

$T$	Temperature	$K$
$P$	Pression du gaz	Pa
$cp_i$	Chaleur spécifique du fluide à volume constant	$J.K^{-1}$
$k$	Conductivité thermique	$W.m^{-1}.K^{-1}$
$H$	Coefficient d'échange de chaleur	$W.m^{-2}.K^{-1}$
$U$	Coefficient d'échange global dans l'échangeur	$W.m^{-2}.K^{-1}$
$F$	Nombre de Faraday	C
$e$	Épaisseur	$m$
$h$	Hauteur	$m$
$V$	Volume du noeud	$m^3$
$d_{ij}$	Distance entre deux noeuds	$m$
$D_h$	Diamètre hydraulique	$m$
$\dot{m}$	Flux massique des espèces	$mol.s^{-1}$
$q$	Flux molaire	$mol/s$
$G$	Conductance	-
$v$	Vitesse du fluide	$m.s^{-1}$
$Re$	Nombre adimensionnel de Reynolds	-
$ut$	Facteur d'utilisation	-
$Nu$	Nombre adimensionnel de Nusselt	-
$N$	Nombre de canaux	-
$Q_w$	Source de chaleur volumique	$Wm^{-3}$
$I$	Densité de courant	$A.m^{-2}$
$I_{O_2}^0$	Densité de courant d'échange	$A.m^{-2}$

$M_{O_2}$	masse molaire de l'oxygène	$g\ mol^{-1}$
$M_{H_2}$	masse molaire de l'hydrogène	$g\ mol^{-1}$
$L_v$	chaleur latente de vaporisation de l'eau	$W\ m^{-1}$
$b_{O_2}$	Pente de tafel	$V.dec^{-1}$
$S_{ij}$	Surface d'échange entre deux noeuds	$m^2$
$T_s$	Temps en séquentiel	$s$
$T_p$	Temps en parallèle	$s$
$t_{cp}$	Temps moyen de calcul	$s$
$t_c$	Temps des communications	$s$
$t_p$	Temps d'exécution	$s$
p	Nombre de machines	-
S	Speedup	-
E	Efficacité	-

**Lettres grecques**

$\sigma_m$	Résistivité de la membrane	$S.cm^{-1}$
$\nu_{eau}$	Viscosité dynamique de l'eau	$Pa/s$
$\rho$	Masse volumique de l'eau	$Kg.m^{-3}$
$\Phi_a$	Taux d'hydratation anodique	-
$\Phi_c$	Taux d'hydratation cathodique	-
$\alpha$	Coefficient de transport	-
$\lambda$	Coefficient d'hydratation	-
$\Phi$	flux de chaleur dans l'échangeur	-
$\xi_i$	constantes pour le retour préliminaire	-
$\sigma_i$	constante du point de fonctionnement	-

**Indices et exposants**

a	anode
c	cathode
m	membrane
ca	canal anode
cc	canal cathode
e	électrode
ce	canal eau

---

sat	saturation
solid	partie solide de la cellule
fluid	partie fluide de la cellule
cond	conduction
conv	convection
amb	ambiante
in	entrée
$H_2$	hydrogène
$O_2$	oxygène
$H_2O$	eau



# Introduction générale

La recherche d'une nouvelle source d'énergie à la fois économiquement viable et susceptible de réduire les émissions des gaz à effet de serre est l'une des problématiques de la recherche dans l'industrie énergétique. En effet, les changements climatiques et leurs effets désastreux sur la planète deviennent de plus en plus menaçant. Le secteur automobile est un consommateur principal des énergies fossiles et a un grand impact sur la pollution. C'est ainsi que, et vu les différentes décisions politiques au niveau national et international, aujourd'hui plusieurs industries y compris les fabricants des véhicules à moteur thermique investissent des moyens importants afin d'explorer de nouvelles technologies en vue du remplacement des énergies fossiles.

La Pile à Combustible (PàC) est une de ces nouvelles technologies. Bien qu'elle a été découverte il y a plus d'un siècle et demi, ce n'est que tout récemment que les progrès technologiques l'ont rendu concurrentielle par rapport aux méthodes traditionnelles de production d'énergie. Les piles de types PEMFC (Proton Exchange Membrane Fuel Cell) sont les mieux adaptées pour le secteur automobile. Elles opèrent à des températures basses (c'est-à-dire des températures utilisées entre  $80^{\circ}\text{C}$  et  $90^{\circ}\text{C}$ ), contrairement par exemple, aux SOFC (Solid Oxyd Fuel Cell) qui fonctionnent à des températures élevées (autour de  $800^{\circ}\text{C}$ ). Cette caractéristique thermique leur offre un temps de démarrage quasi-instantané (c'est-à-dire inférieur à  $0.1\text{s}$ ). Cependant, leur intégration dans un système de traction nécessite une bonne maîtrise des paramètres physiques qui influent sur leur fonctionnement.

Suite aux réactions exothermiques qui se produisent au niveau des électrodes, les grandeurs d'états telles que la température, la pression et notamment les flux des réactifs sont perturbées, ce qui affecte considérablement la tension délivrée par la PàC. Par ailleurs, les performances des PàC sont limitées par des problèmes liés à la thermo-hydraulique tels que l'assèchement des membranes et l'engorgement en eau des canaux de distribution

des gaz.

Finalement, on distingue trois problématiques importantes pour la PEMFC : l'arrivée des gaz, la gestion d'eau et le contrôle de l'aspect thermique.

Les travaux de recherche présentés dans ce mémoire de thèse sont dédiés essentiellement à l'aspect thermique de la pile. Le but de la thèse est double. D'une part, proposer des méthodologies en vue de la simulation du comportement thermique de la pile et, d'autre part, établir des stratégies pour le contrôle de la température.

Plus de 50% de l'énergie produite est transformée en chaleur. Par conséquent, l'utilisation effective et optimale de la PàC nécessite une bonne compréhension du champ thermique afin de contrôler les flux de chaleur qui traversent la pile. L'étude du comportement thermique d'une pile nécessite une approche de modélisation permettant de représenter les champs de températures en chaque partie des cellules qui forment la pile. Les approches de modélisation en vue de la simulation du comportement thermique communément utilisées, reposent sur la résolution de l'équation de la chaleur. Cependant, comme la pile est un système hétérogène constituée d'une part d'une partie solide représentant la cellule et les plaques bipolaires et, d'autre part, d'une partie fluide composée des canaux des gaz et du circuit de refroidissement, nous avons un phénomène de couplage thermique résultant de la conduction et de la convection thermique. La résolution des équations des modèles thermiques devient complexe et très coûteuse en ressources et en temps de calcul. Il est dès lors nécessaire de développer de nouvelles approches alternatives permettant d'étudier le comportement thermique global de la pile en tenant en compte de deux facteurs importants : la précision des résultats de la simulation et un coût réduit en temps de calcul.

Pour un fonctionnement optimal de la pile, le contrôle du comportement thermique est fondamental. D'une part, une pile n'est fonctionnelle que lorsque sa température atteint un seuil minimal et, d'autre part, la température ne doit pas dépasser un seuil maximal au risque de détériorer la membrane. Ainsi, un circuit de refroidissement est systématiquement mis en place. Par ailleurs, il est nécessaire d'établir des stratégies de contrôle du comportement thermique en fonction des températures de consignes considérées. Pour ce faire, une approche adoptée peut être celle d'une synthèse de lois de commande effectuée à partir de modèles mathématiques suffisamment représentatif du comportement thermique mais assez simples pour être exploités.

---

Les objectifs de ce travail sont les suivants

1. Proposer une approche de modélisation en vue de la simulation du comportement thermique en tenant en compte du facteur de couplage de la conduction et de la convection thermique. Puis, de réduire le coût de calcul en utilisant le calcul parallèle pour l'implantation et pour l'exactitude de la simulation.
2. Proposer des stratégies de contrôle pour la commande par rétroaction de la température de la pile fondées sur l'utilisation de modèles sous forme d'équations différentielles.

La thèse est organisée en six chapitres.

Le premier chapitre comporte une introduction et des généralités sur la pile à combustible et les problèmes liés à son comportement thermique. On présentera en particulier la pile de type PEMFC (Proton Membrane Exchange Fuel Cell) et on donnera une classification des modèles existants.

Le second chapitre est dédié à l'état de l'art des modèles thermiques de la pile PEMFC. Un classement des modèles décrivant le comportement thermique de la pile sera adressé. La modélisation par l'approche nodale et son domaine d'application sera aussi adressé.

Dans le troisième chapitre, nous présenterons le modèle thermique de la pile. Une approche nodale globale de représentation des transferts thermiques au sein d'une pile à combustible, en utilisant une représentation macroscopique basée sur l'équivalence électrique est mise en place. Cette approche initialement et communément utilisée dans le domaine de l'habitat et dans la description des phénomènes aérodynamiques, vient d'être appliquée récemment sur une pile [Dumercy, 2004]. Néanmoins, elle nécessite une amélioration afin d'étendre son domaine d'application pour la description des phénomènes de couplage thermique (par exemple, l'échange simultané de conduction et de convection). Dans ce type d'échange, la mise en oeuvre d'une approche de modélisation globale est possible, grâce à la notion de conductance « fluide », qui représente une grandeur liée au caractère de l'écoulement. En effet un nœud appartenant au fluide (c'est-à-dire gaz d'alimentation ou eau de refroidissement), échange de la chaleur par déplacement de la matière avec un nœud voisin du même canal et aussi par convection avec un nœud voisin situé dans la partie solide (par exemple, les électrodes de la pile). L'échange global

sera ainsi représenté par une conductance équivalente sans avoir recours à la description de chaque phénomène à part. Cette approche de modélisation s'avère simple et permet d'éviter l'utilisation des équations aux dérivées partielles qui ne sont pas toujours facile à résoudre. En plus, elle offre une souplesse en vue de la mise en oeuvre du calcul parallèle.

Le quatrième chapitre est consacré aux langages de programmation parallèles. Nous donnerons la taxonomie des langages et des machines parallèle et nous présenterons les bibliothèques utilisées pour la simulation du modèle thermique de la pile.

Les résultats de la simulation du comportement thermiques de la pile feront l'objet du cinquième chapitre. Une comparaison entre le modèle thermique simulé en utilisant la discrétisation par les différences finis et le modèle nodal sera adressé. Une synthèse sur l'apport du calcul parallèle sera aussi exposée dans ce chapitre.

Le sixième chapitre est dédié au problème du contrôle comportement de la pile à combustible. Dans ce travail, l'objectif du contrôle est de commander le système par rétroaction. Il s'agit de réguler la température de la pile à une valeur de consigne désirée. La démarche adoptée est celle de l'utilisation de modèles sous forme d'équations différentielles. Plus précisément on considère des modèles dont le principe est détaillé dans le chapitre 2. Puis en développant explicitement l'expression de la conductance thermique on aboutit à des systèmes bilinéaires. La commande des systèmes bilinéaires et malgré leur structure simple, reste une question ouverte dans la littérature même pour le petites dimensions, le cas de la dimension trois par exemple. Il convient de préciser que concernant la pile à combustible les systèmes sont de grande dimension. Par exemple, dans le cas des grandes puissances, la dimension du vecteur d'état est d'ordre douze. Par ailleurs, le système non commandé est naturellement instable. C'est pourquoi dans ce travail on procédera par un raisonnement fondée sur une analyse qui dépend des valeurs numériques des différentes paramètres et de la plage de fonctionnement des grandeurs physiques.

Finalement, des conclusions et des perspectives seront présentées dans la dernière partie de ce mémoire.

# Chapitre 1

## Généralités sur la pile à combustible

### 1.1 Introduction

L'objectif de ce chapitre est de présenter le fonctionnement de la pile à combustible et de son comportement thermique. Nous présenterons en particulier la pile du type PEMFC et son principe de fonctionnement. Nous commencerons par décrire les paramètres physiques qui influent sur son comportement thermique. Ensuite nous donnerons une classification des modèles thermiques selon leurs types, à savoir isotherme ou non isotherme. Afin de compléter cette classification, nous introduirons le critère de l'échelle en considérant les modèles complets (c'est-à-dire ceux décrivant le comportement de la pile et de ses auxiliaires) et les modèles partiels (c'est-à-dire ceux décrivant seulement le comportement de la pile).

### 1.2 Le fonctionnement général de la pile

La pile à combustible est un système électrochimique, convertisseur d'énergie, qui convertit directement l'énergie chimique d'une réaction d'oxydo-réduction en énergie électrique. Elle diffère des machines thermomécaniques où la même conversion suppose deux stades intermédiaires, l'énergie thermique et l'énergie mécanique ([FIGURE 1.1](#)).



FIGURE 1.1 – a-Cycle thermo-électrique de production de l'énergie. b-Cycle électrochimique de production de l'énergie.

Plus précisément, une pile à combustible ne comporte pas de pièces en mouvement. C'est l'action d'un fluide, l'hydrogène, qui dispense la pile de tout dispositif de tout mouvement mécanique. Par conséquent, le fonctionnement d'une pile n'implique pas la présence de deux sources de chaleur à température différente qui peut réduire le rendement. Cependant, ceci n'entraîne pas une liberté à l'égard de la thermodynamique de la pile. En effet, l'expression du rendement électrique de la pile dépend de son entropie comme il sera décrit dans le présent chapitre.

### 1.2.1 Thermodynamique de la pile

Afin d'analyser le comportement thermique de la PàC, nous considérons le bilan thermodynamique suivant [Feidt, 1997]

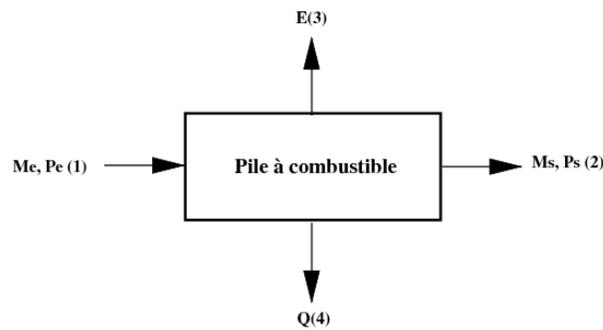


FIGURE 1.2 – Bilan thermodynamique sur la pile.

- Entrée 1 : la pile reçoit par unité de temps une masse de combustible plus un comburant.
- Sortie 2 : la pile émet les produits de combustion.
- Sortie 3 : la pile produit l'énergie utile  $E$  sous forme électrique comptée positive.
- Sortie 4 : la PàC échange la quantité de chaleur  $Q$  avec une seule source de chaleur à la température ambiante.

La PàC reçoit d'une part, une énergie mécanique externe empruntée aux pompes d'alimentation ou à l'atmosphère et, d'autre part, une énergie interne sous forme chimique. En appliquant la première loi de la thermodynamique on obtient

$$\Delta H = E + Q \tag{1.1}$$

Dans le cas d'un fonctionnement réversible, et d'après la définition de l'entropie, nous avons

$$dS = -\frac{dQ}{T}. \quad (1.2)$$

Puisque la PàC n'échange de la chaleur qu'avec une seule source à température constante, nous obtenons

$$Q = T\Delta S. \quad (1.3)$$

En introduisant la notion de l'enthalpie libre  $G = H - TS$ , l'énergie délivrée par la PàC est exprimée par l'égalité suivante, définie en fonction de l'énergie libre

$$E = \Delta G \quad (1.4)$$

En d'autres termes, l'énergie maximale qui peut être fournie par la PàC correspond à la diminution de l'enthalpie libre des produits qui la traversent.

Lorsque le fonctionnement de la pile n'est pas réversible, il y a création d'entropie et par conséquent

$$Q > T\Delta S \rightarrow E < \Delta G \quad (1.5)$$

### 1.2.2 Rendement d'une pile à combustible

La conversion électrochimique dans une pile à combustible est caractérisée par

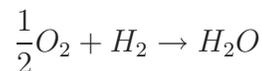
- la tension  $E$  délivrée pour une intensité donnée, et qui détermine le nombre de cellules élémentaires à empiler afin d'obtenir la tension nécessaire à l'application,
- le rendement de la conversion qui fixe les conditions thermohydrauliques de fonctionnement de la PàC. Ce dernier détermine les paramètres de la modélisation.

La pile absorbe l'énergie  $\Delta H$  qu'elle transforme en énergie électrique. Son rendement théorique maximal est

$$\eta_{max} = \frac{\Delta G}{\Delta H} = 1 - T \frac{\Delta S}{\Delta H} \quad (1.6)$$

où  $\Delta H > 0$ .

Dans le cas général des réactions chimiques pour lesquelles  $\Delta S > 0$ , l'accroissement de la température de fonctionnement de la pile exerce une action défavorable sur son rendement. A titre d'exemple, pour la réaction, de production d'eau par la pile, suivante



Nous obtenons des rendements qui sont en fonction de la température (voir TABLE 1.1)

TABLE 1.1 – Rendement pour différentes valeurs de températures.

Température (K)	298	800	1500
$\eta_{max}$ (%)	94	83	66

Il est important de noter que le rendement théorique est en générale très élevé par rapport à la température ambiante ( $\eta_{max} = 94\%$  pour  $T = 298K$ ).

Par ailleurs, il est intéressant de comparer ce rendement avec le rendement du cycle de Carnot d'une machine thermique fonctionnant de façon réversible (voir FIGURE 1.3).

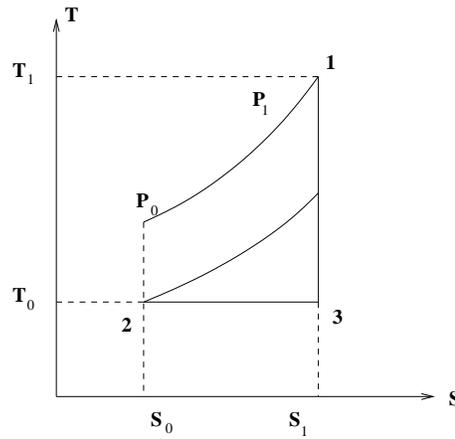


FIGURE 1.3 – Cycle de Carnot d'une machine thermique

Le cycle de Carnot implique une détente adiabatique ( $1 \rightarrow 3$ ) et une compression isotherme ( $3 \rightarrow 2$ ), ce qui donne l'énergie utile sous forme mécanique, soit

$$\varepsilon = H_1 - H_0 - T_0(S_1 - S_0) \quad (1.7)$$

On obtient alors une nouvelle expression du rendement  $\eta_{max}$ , soit

$$\eta_{max} = \frac{\varepsilon}{H_1 - H_0 - T_0} \quad (1.8)$$

Notons que  $\eta_{max}$  tend vers zero lorsque  $T_1$  tend vers  $T_0$  ( $\Delta S$  et  $\Delta H > 0$ ).

Cependant, le rendement thermique  $\eta_t$  qui sera pris en compte lors du calcul du prix de revient de l'énergie électrique, dépendra du rendement énergétique  $\eta_e$  qui définit le degré de perfectionnement de l'installation, soit

$$\eta_t = \eta_e \cdot \eta_{max} \quad (1.9)$$

Par conséquent, Le rendement réel est très inférieur à  $\eta_{max}$  étant donnée que ces deux machines (c'est-à-dire la pile et la machine génératrice de Carnot) ne fonctionnent pas dans les mêmes conditions de réversibilité. En d'autres termes, pour les machines thermiques, la réversibilité implique des températures élevées de l'ordre de  $3000^{\circ}C$  et qui sont irréalisables vu les matériaux réfractaires actuellement disponibles.

La pile à combustible fournit directement de l'énergie électrique alors qu'avec la machine thermique il faut joindre une génératrice. Ainsi, l'enjeu technologique se déroulera sur deux fronts entre les machines thermiques et les machines électrochimiques en vue de

- l'obtention économique de hautes températures pour les machines thermiques,
- l'activation économique des combustibles classiques à basse températures pour les machines électrochimiques.

### 1.2.3 Fonctionnement réversible

En fonctionnement réversible, il existe une différence de potentiel entre les deux électrodes de la pile, appelée force électromotrice  $E$ . Si la pile envoie dans le circuit extérieur la quantité de charge  $q$  pendant un certain temps, l'énergie fournie est exprimée par

$$\varepsilon = qE = \Delta G \quad (1.10)$$

Pour une réaction réversible qui a lieu à température et à pression constantes



La force électromotrice est calculée de la manière suivante

$$E = E_0 + RT \log \frac{(\text{produits réactifs})^{\nu_i}}{(\text{produits résultants})^{\nu_i}} \quad (1.12)$$

avec :

$$E_0 = \frac{RT}{zF} \log k, \quad k \text{ constante d'équilibre et } E_0 \text{ force électromotrice standard.}$$

### 1.2.4 Fonctionnement irréversible

#### 1.2.4.1 Phénomènes de polarisation

Lorsqu'une pile de force électromotrice  $E$  débite un courant  $i$ , d'une intensité stationnaire, la tension à ses bornes se fixe à une valeur  $E_1 < E$ . La différence de tension est

appelée polarisation et elle peut être représentée par une fonction croissante du courant atteignant rapidement des valeurs importantes. Cependant, les phénomènes de polarisation ne peuvent être expliqués par la thermodynamique. En effet, il est nécessaire de recourir au domaine de l'électricité, de la cinétique électrochimique et du transfert de masse. Plus précisément, nous distinguons les deux cas suivants

- Pour un courant nul nous avons  $E = E^+ - E^-$  où  $E^+$  et  $E^-$  sont les différences de potentiel entre les deux électrodes et une électrode de référence<sup>1</sup>.
- En fonctionnement, nous avons  $E_1 = E_1^+ - E_1^- - RI_1$  où  $R$  est la résistance ohmique de l'ensemble électrodes électrolyte.

Les quantités  $|E_1^+ - E^-| = \eta_+$  et  $|E_1^- - E^-| = \eta_-$  sont appelées communément la polarisation ou bien la surtension des deux électrodes.

Ces polarisation  $\eta_+$  et  $\eta_-$  sont liées à chaque processus impliqué dans la réaction électrochimique. L'expression de la force électromotrice prend la forme suivante

$$E_1 = E - (\eta_+ + \eta_-) - RI_1 \quad (1.13)$$

#### 1.2.4.2 Exemple d'un transfert électronique

Afin d'expliquer ces phénomènes, prenons l'exemple d'un transfert électronique entre une électrode métallique et les ions du même métal en solution.

Dans l'électrode, deux réactions se produisent simultanément. D'une part, l'ionisation du métal et, d'autre part, la décharge des ions produits lors de l'ionisation, soit



Chaque ion doit passer par l'état activé pour se décharger.

La théorie de EYRING montre que le nombre d'ions qui se déchargent est proportionnel à  $C \cdot \exp\left(\frac{-W}{RT}\right)$  où  $C$  est la concentration en ions et  $W$  est l'énergie exprimée pour un équivalent gramme. De même, le nombre d'atomes susceptibles de s'ioniser sera proportionnel à  $C' \cdot \exp\left(\frac{-W'}{RT}\right)$ .

---

1. L'électrode de référence est l'électrode standard à hydrogène ou ESH. Cependant, l'ESH n'est qu'une référence idéale. En pratique, on réalise une électrode normale à hydrogène ou ENH pour l'étalonnage des autres électrodes de référence en considérant généralement comme négligeable les différences existant entre l'ENH et l'ESH.

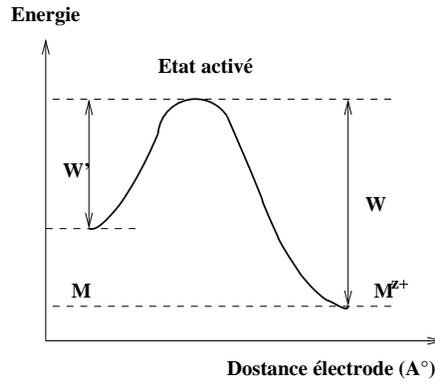


FIGURE 1.4 – Transfert électronique entre une électrode métallique et ses ions.

Lorsque l'électrode est à l'équilibre réversible, elle n'est globalement traversée par aucun courant, le courant d'ionisation est égale au courant de décharge, et nous avons par conséquent l'égalité suivante

$$k.C'.exp\left(\frac{-W'}{RT}\right) = k.C.exp\left(\frac{-W}{RT}\right) = i. \quad (1.14)$$

$i$  est appelé courant d'échange.

On en déduit

$$\frac{C}{C'} = exp\left(-\frac{W - W'}{RT}\right) \quad (1.15)$$

Par ailleurs, de l'expression de l'enthalpie libre de la réaction d'ionisation du métal ( $W - W' = \Delta G$ ), on retrouve l'expression du potentiel d'équilibre  $E_{eq}$

$$E_{eq} = E_0 + \frac{RT}{ZF} \text{Log} \frac{C}{C'} \quad (1.16)$$

Lorsque la réaction a lieu, le potentiel électrode doit être modifié car l'énergie d'activation de la décharge est diminuée. Dans ce cas l'électrode joue le rôle de la cathode.

L'enthalpie de la décharge peut être exprimée par la relation suivante

$$W_1 = W - \alpha.Z.F.\eta_+ \quad (1.17)$$

et l'ionisation est donnée par

$$W'_1 = W' - (1 - \alpha).Z.F.\eta_+ \quad (1.18)$$

où  $\alpha$  est un coefficient de transfert.

Nous retrouvons ainsi la densité du courant de décharge sous la forme suivante

$$I_1 = k.C.exp\left(-\frac{W - \alpha + F\eta_+}{RT}\right) \quad (1.19)$$

La densité du courant de l'ionisation est exprimée par la relation suivante

$$I'_1 = k.C'.exp\left(-\frac{W + (1 - \alpha) + F\eta_+}{RT}\right) \quad (1.20)$$

Finalement, la densité de courant net externe est donnée par l'expression suivante

$$i_1 = I_1 - I'_1 = i.exp\left[\left(\frac{\alpha.Z.F.\eta_+}{RT}\right) - i.exp\left(-\frac{(1 - \alpha).Z.F.\eta_+}{RT}\right)\right] \quad (1.21)$$

Notons les deux cas suivants

- La réaction est intrinsèquement très rapide,  $i$  est grand et la surtension  $\eta_+$  est petite, la surtension est alors proportionnelle à la densité de courant, nous obtenons

$$i_1 = i \frac{ZF}{RT} \eta_+ \quad (1.22)$$

- La réaction est lente ou  $i$  est grand, dans ce cas la surtension  $\eta_+$  est notable alors la densité de courant

$$i_1 \# I_1 = i \frac{\alpha.ZF}{RT} \eta_+ \quad (1.23)$$

Le courant croit avec la surtension, il s'agit de la célèbre loi de Tafel donnée par la relation suivante

$$\eta_+ = -\frac{RT}{\alpha.ZF} \text{Log } i + \frac{RT}{\alpha.ZF} \text{Log } i_1 \quad (1.24)$$

Il est important de souligner que l'échange électronique ne représente pas la seule cause de la polarisation chimique. En effet, la polarisation peut être due aussi aux deux phénomènes suivants

- A l'interface électrode-electrolyte existe une variation brutale du potentiel. Elle implique une répartition discontinue des charges électriques appelées double couche électrique qui joue le rôle de condensateur. En effet, selon Helmholtz, il existe une couche d'ions positifs adjacente à la surface de l'électrode chargée négativement. Par ailleurs, selon GOUY [Saisset, 2004], cette couche est suivie du côté de la solution par une zone diffuse qui assure la transition avec l'électrolyte électriquement neutre. L'existence de cette double couche électrique affecte la différence de

potentiel électrode-solution et la concentration ionique à l'électrode.

- Le phénomène de l'échange électronique est précédé par l'adsorption de la particule à la surface de l'électrode. Ce phénomène appelé surtension d'activation peut avoir une influence sur la concentration à l'électrode, donc sur la vitesse de la réaction.

En outre, un troisième type de polarisation s'ajoute pour réduire la tension de sortie dans la pile, il s'agit de la polarisation d'activation. En effet, lorsque l'électrode est à l'équilibre réversible, aucune espèce n'est consommée. Si on néglige l'effet de la double couche électrique, les concentrations des corps actifs en solution seront les mêmes dans l'électrode et dans l'électrolyte.

Par ailleurs, lorsque la réaction a lieu dans un sens déterminé, les concentrations à l'électrode ne restent constantes que si la vitesse de déplacement des réactifs au sein de l'électrolyte est grande devant la vitesse des réactions. Enfin, l'expression de la polarisation doit être modifiée en tenant compte des concentrations effectives dans l'électrode. La densité de courant s'exprime par conséquent de la manière suivante

$$i_1 = i \left[ \frac{C_e}{C_o} \exp\left(\frac{\alpha \cdot ZF\eta}{RT}\right) - \frac{C'_e}{C'_o} \exp\left(-\frac{(1-\alpha)ZF\eta}{RT}\right) \right] \quad (1.25)$$

où l'électrode et l'électrolyte sont représentés respectivement par les indices  $e$  et  $o$ .

Dans le cas d'une réaction électrochimique très rapide, la polarisation observée est uniquement de concentration, elle est donnée par l'expression suivante

$$\eta = \frac{RT}{ZF} \text{Log} \frac{C_o}{C_e} \cdot \frac{C'_o}{C'_e} \quad (1.26)$$

### 1.2.4.3 Les pertes

FIGURE 1.5 montre les différentes pertes de tensions dans la pile. Il s'agit des pertes d'activation liées au transfert des électrons, des pertes de concentration dues à la concentration des réactifs dans la zone de réaction de la PàC, et enfin des pertes ohmiques résultants de la résistance au transfert des protons dans la membrane. Finalement, les types de perte peuvent être classifiés de la façon suivante

- Les pertes d'activation traduisent la cinétique des réactions électrochimiques. Cette cinétique dépend de la nature constitutive des électrodes et de leurs états de surfaces.
- Les pertes ohmiques expriment les résistances aux transports des électrons et des protons, elles deviennent significatives à fortes densités de courant. La résistance

au transfert des électrons est localisée dans la partie conducteur électronique des électrodes, dans les plaques bipolaires et aux interfaces plaques-électrodes. La résistance au transfert des protons se situe dans l'électrolyte et dans la partie électrolyte des électrodes. Les pertes ohmiques sont principalement localisées dans l'électrolyte.

- Les limitations de potentiel dues aux problèmes de diffusion et de noyage dans les électrodes apparaissent à de fortes densités de courant. Elles représentent la résistance du milieu au transport des réactifs vers les sites de la réaction.

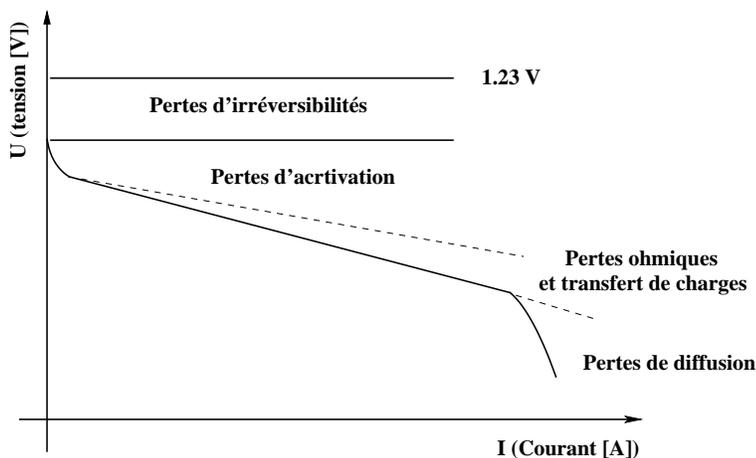


FIGURE 1.5 – Caractéristique tension-courant d'une cellule.

## 1.3 Les différents types de piles à combustible

### 1.3.1 Classification

Les piles à combustibles peuvent être classées suivant de nombreux critères. La température de fonctionnement, le type d'électrolyte utilisé et le domaine d'application (voir [FIGURE 1.6](#)).

Dans la première catégorie, on distingue deux types. D'une part, les piles fonctionnant à de basses températures (c'est-à-dire inférieure à  $200^{\circ}\text{C}$ ), où l'on trouve les PEMFC, les PAFC et les AFC. D'autre part, les piles fonctionnant à de hautes températures (jusqu'à  $1000^{\circ}\text{C}$ ) comme c'est le cas des SOFC et des MCFC.

Dans la deuxième catégorie, on y trouve des piles à électrolyte solide et des piles à électrolyte liquide. Dans la catégorie de piles utilisant un électrolyte solide on trouve les PEMFC et les SOFC, tandis que les piles utilisant un électrolyte liquide sont limitées aux

AFC, aux PAFC et aux MCFC.

La troisième classification des piles à combustible est relative au domaine d'application où l'on trouve des piles destinées à l'application mobile et des piles destinées à l'application fixe. Dans le domaine du mobile les AFC, les PEMFC et les SOFC sont les plus adaptées. Dans l'application fixe on trouve les AFC, PEMFC, AFC, PAFC et les SOFC.

Par ailleurs, d'autres paramètres peuvent aussi être pris en compte pour la classification des piles

- La nature de l'électrolyte (acide ou basique),
- La charge de l'ion diffusant dans l'électrolyte (positive ou négative),
- Le type du combustible (oxydation directe ou indirect).

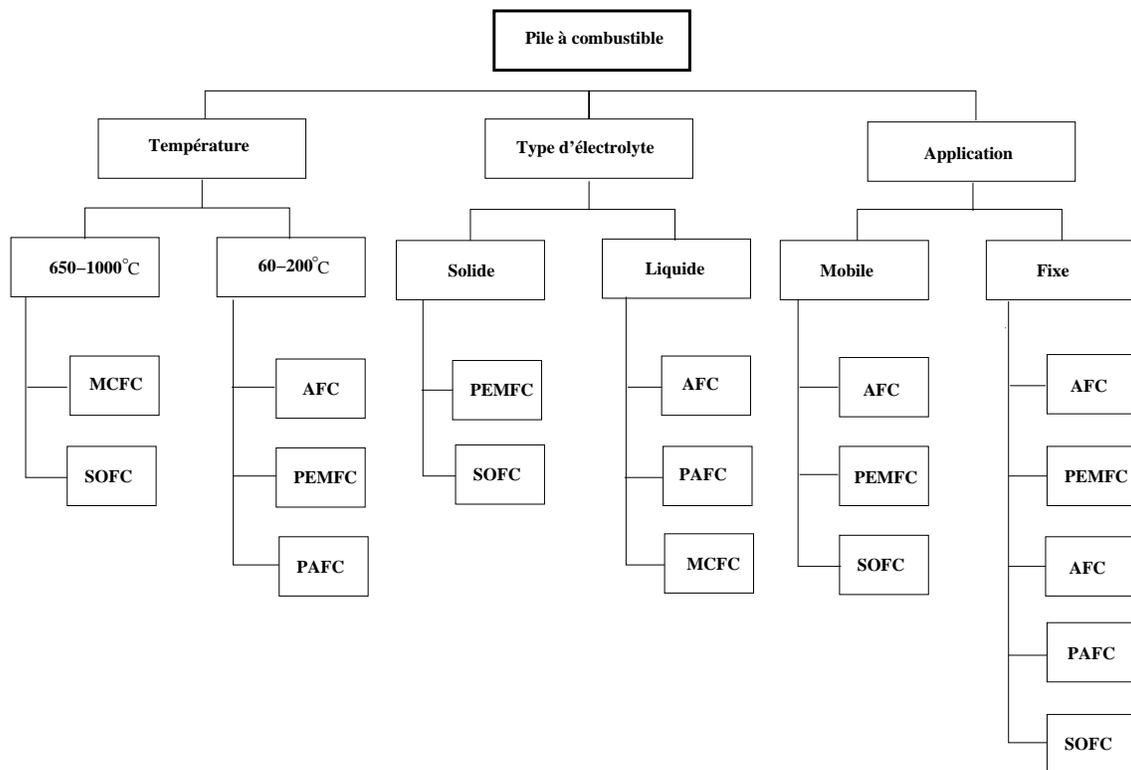


FIGURE 1.6 – Classification des piles à combustible.

### 1.3.2 Caractérisation

Il est utile de noter, que le choix du type de pile à combustible se fait suivant des paramètres à partir d'un cahier des charges. Dans ce cahier des charges, on peut trouver des restrictions sur la température de fonctionnement, facteur lié à la nature de

la membrane, et aussi des restrictions sur la durée de vie de la pile. En effet, le paramètre température de fonctionnement de la pile intervient explicitement sur le rendement global et notamment sur le temps de démarrage de la pile.

### 1.3.3 Température de fonctionnement

Nous trouvons ainsi dans la catégorie des basses températures, les PEMFC qui fonctionnent entre  $80^{\circ}\text{C}$  et  $90^{\circ}\text{C}$ . Actuellement, les recherches se concentrent sur l'amélioration de l'électrolyte, membrane en Nafion, afin d'atteindre des températures de l'ordre de  $120^{\circ}\text{C}$  qui favorisent les réactions aux électrodes [Büchel *et al.*, 2002].

Les DMFC utilisent des Nafions et opèrent à des températures de  $110^{\circ}\text{C}$ . Les AFC, opèrent à des températures voisinant de celles des PEMFC, cependant, leur utilisation est limitée à cause de l'évaporation de l'électrolyte.

Les PAFC fonctionnent à une température proche de  $40^{\circ}\text{C}$  vu que l'acide phosphorique fond à  $42^{\circ}\text{C}$  sous pression atmosphérique. Ce type de pile n'est pas adaptable à l'application automobile pour des raisons climatiques.

### 1.3.4 Temps de réponse

Les SOFC et les MCFC développées initialement pour le stationnaire présentent un temps de réponse non compatible pour l'application automobile. Une des solutions pour baisser leur temps de démarrage consiste à maintenir le reformage à haute température, mais ceci n'est applicable que pour les piles opérant à de hautes températures.

Notons également que les PEMFC qui utilisent de l'hydrogène pur présentent un temps de réponse inférieur à  $0.1\text{s}$ . Ce temps de réponse augmente dans le cas où l'on utilise le reformage.

Le travail d'Argypoulos [Argypoulos *et al.*, 1999a, Argypoulos *et al.*, 1999b] montre que dans les DMFC, la perméation du méthanol chute dans le cas du régime dynamique. Ainsi le temps de réponse suffisamment court que dans le cas du régime stationnaire.

Les SOFC ont un temps de réponse de l'ordre de  $120\text{--}300\text{ s}$  [Larminie *et Dicks*, 2000]. Ce temps de réponse est relativement en comparaison avec celui des PEMFC. Ce temps de réponse est lié à la nature des plaques bipolaires et à la structure céramique de l'électrolyte. Notons à cet effet, qu'une forte variation de la charge entraîne des variations de températures ce qui peut détruire la structure du céramique.

### 1.3.5 Les combustibles

Pour la plupart des piles fonctionnant à de basses et moyennes températures, l'hydrogène est le combustible le plus utilisé en vertu de sa grande réactivité. Il représente le potentiel de référence de l'espèce électroactive dans les PEMFC. Cependant, pour des températures élevées comme c'est le cas des SOFC et des MCFC, l'hydrogène et le monoxyde de carbone sont des espèces électroactives. Par ailleurs, le méthanol est une espèce électroactive pour les DMFC.

## 1.4 Durée de vie de la pile

Les piles à électrolyte solide présentent des durées de vie sensiblement supérieures à celles qui exigent l'utilisation d'un électrolyte liquide, lequel est à l'origine des phénomènes de corrosion difficilement contrôlable. En effet, les piles opérant à des températures faibles ne sont pas tolérantes à la présence du monoxyde de carbone CO. A titre d'exemple, la présence de 10 ppm du monoxyde de carbone, réduit les performances de la PàC à 4% [Bernay *et al.*, 2002]. Cette quantité de monoxyde intervient dans la durée de vie des cellules de la pile. Pour les DEMFC, l'empoisonnement des électrodes est la principale cause des chutes des rendements. Pour les AFC c'est l'électrolyte qui est affecté par la présence du  $CO_2$  de l'air.

Dans le cas des PEMFC, on atteint un temps de service de 5000 heures sans maintenance et avec une tolérance de 2% sur la perte de tension, et 4000h dans le cas de reformage contenant 40 ppm<sup>2</sup> de CO [Bernay *et al.*, 2002]. Pour les piles développées pour l'application stationnaire, la durée de vie est plus importante, elle est estimée à 40.000 heures comme c'est le cas des SOFC, PAFC, et MCFC.

Cependant, les conditions de fonctionnement dans le stationnaire sont moins sévères que dans le cas du régime dynamique. La comparaison des durées de vies entre les deux régimes de fonctionnement devient par conséquent caduc.

## 1.5 La pile du type PEMFC

Les piles à combustible à membrane d'échange de protons (PEMFC) fonctionnent à des températures relativement basses. Ce sont des piles à électrolyte polymère solide, parfois appelées SPFC (Solid Polymer Fuel Cell). Elles fonctionnent à la température

---

2. ppm=particules par million.

ambiante dans des conditions optimales autour de 80°C pour des pressions allant de 1 à 4 atmosphères. Les réactions aux électrodes nécessitent des catalyseurs nobles, du platine par exemple, et sont sensibles à la présence du monoxyde de carbone (CO) qui doit être limitée à quelques ppm.

Toutes les PEMFC comportent un électrolyte solide, appelé membrane, et deux électrodes, l'anode et la cathode. L'ensemble constitue la cellule électrochimique élémentaire (MEA). La membrane a pour rôle d'assurer la continuité électrique du circuit par transfert des ions et qui sert aussi à bloquer le passage des électrons. Alors que les électrodes sont le siège où interviennent les réactions électrochimiques suivantes

- Oxydation du combustible à l'anode avec libération d'électrons. L'anode est donc l'électrode négative.
- Réduction du comburant à la cathode avec consommation d'électrons.

Pour obtenir une tension suffisante, il suffit d'empiler les éléments en série. Des plaques bipolaires conductrices serrent d'interconnexions entre les cellules pour former un stack. Elles ont pour fonction de collecter les électrons provenant des électrodes et de séparer le comburant du combustible.

Le principe de fonctionnement est donc tout à fait similaire à celui d'une pile électrique conventionnelle. Dans cette dernière, l'oxydant et le réducteur sont progressivement consommés jusqu'à épuisement de la matière.

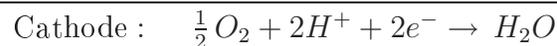
Dans les PEMFC, l'anode est alimentée en continu par un combustible provenant d'un réservoir et la cathode est le plus souvent alimentée par l'oxygène de l'air. Dans le cas d'une pile fonctionnant avec de l'hydrogène, celui-ci subit une oxydation à l'anode constitué d'un matériau catalytique conducteur définissant le pôle négatif de la pile (voir [FIGURE 1.7](#)).

Pour un électrolyte acide, nous obtenons la réaction suivante



Tandis que la réduction électrochimique de l'oxygène, elle se produit dans une cathode catalytique constituant le pôle positif de la pile.

Pour un électrolyte acide la réaction est la suivante



Les protons produits par l'oxydation de l'hydrogène traversent l'électrolyte et se combinent avec l'oxygène et les électrons provenant du circuit externe pour former de l'eau et de la chaleur.

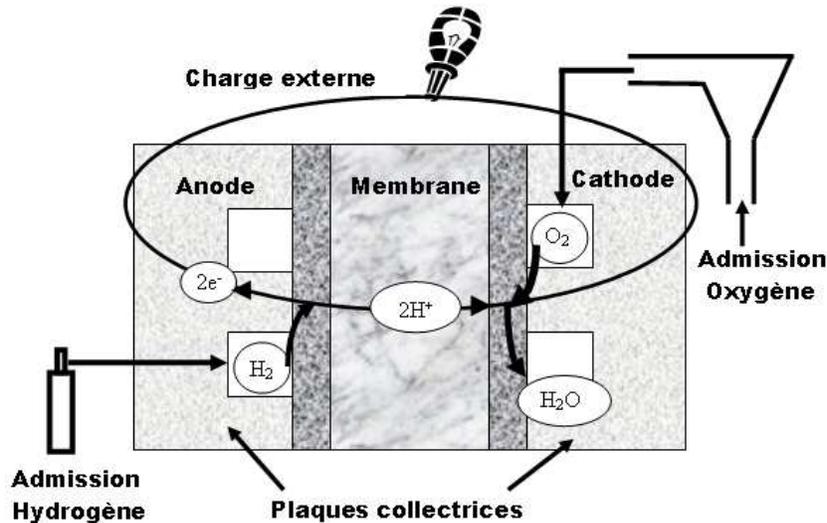
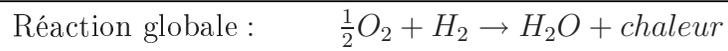


FIGURE 1.7 – Fonctionnement d'une PàC.

Comme nous l'avons noté ci-dessus, les piles présentent l'avantage d'un temps de démarrage quasiment instantanés. En effet, à température ambiante, les PEMFC produisent près de deux tiers de leur puissance nominale en quelques secondes, ce qui les rends compatibles avec les besoins des véhicules de transports.

Par contre, la teneur en eau des membranes des PEMFC doit être contrôlée soigneusement. Celles-ci doivent être maintenues humides pour favoriser le transport des ions, ce qui nécessite l'humidification des gaz à l'entrée. Le combustible le plus souvent employé est l'hydrogène sous sa forme pure que l'on peut obtenir par voie de reformage des carburants classiques tels que le gaz naturel et le méthanol.

On doit noter aussi que la pile présente un rendement électrique relativement important, il est de l'ordre de 50%. Cependant, la moitié de l'énergie produite est transformée en chaleur, ce qui nous oblige à l'évacuer pour préserver la membrane.

Par ailleurs, cette quantité de chaleur produite doit être quantifiée et localisée afin d'optimiser le système de refroidissement, et par conséquent augmenter le rendement globale du système pile. Des études récentes [Hauff et Bolwin, 1995] montrent que la chaleur créée par les réactions électrochimiques diffuse de façon différente dans les électrodes.

Suivant que l'on considère le flux de chaleur perpendiculaire à la surface des électrodes ou compris dans le plan des électrodes. Pour cela, plusieurs configurations des canaux de refroidissement sont envisageables afin de réduire ce gradient de température.

Rappelons que, l'étude du fonctionnement d'une pile revient principalement à prédire la tension disponible aux bornes d'une cellule élémentaire en fonction de l'intensité du courant qui la traverse. Cette tension chute considérablement de sa valeur théorique, appelée potentiel de Nernst<sup>3</sup>. Rappelons aussi que la chute de tension dans la pile est produite sous trois formes. La première forme de ces chutes est essentiellement de nature ohmique dans la membrane suite au passage des protons de l'anode vers la cathode. La deuxième forme de chute de tension est liée à la concentration des réactifs dans les électrodes, à cela s'ajoutent des chutes de types d'activations résultant du transfert électronique dans l'élément conducteur de la PàC.

Par ailleurs, il est nécessaire de noter la dépendance de ces chutes de tension de la température de fonctionnement de la PàC. En effet, la tension de sortie de la PàC chute considérablement avec l'augmentation de la température de la cellule et en particulier pour les fortes densités de courant [Karl et Günter, 1996]. En outre, la destruction d'une des cellules formant le stack, suite à l'assèchement de la membrane, engendre des points chauds dans la PàC par effet de joule, le rendement électrique est par conséquent considérablement affecté.

Cependant, la localisation des paramètres influant sur les variations des températures de chaque cellule de la PàC, nécessite une étude thermique de l'assemblage en série des cellules. L'uniformisation du champ de températures d'un stack passe par l'uniformisation du champ de températures de la cellule elle-même. Il est dès lors nécessaire d'intégrer un système de refroidissement adéquat pour réguler la température de la PàC.

## 1.6 Description d'une cellule

Une cellule de pile réunit les électrodes, l'électrolyte et les plaques bipolaires. L'électrolyte des PEMFC est une membrane polymère qui permet la circulation des protons, mais sans laisser passer les électrons. La membrane est d'une épaisseur comprise entre 30  $\mu\text{m}$  et 150  $\mu\text{m}$  et elle est le plus souvent en Nafion [Larminie et Dicks, 2000]. Les électrodes sont construits en graphite poreux pour permettre l'accès du combustible (voir [FIGURE 1.8](#)). Elles sont identiques et d'une épaisseur d'environ 30  $\mu\text{m}$ . L'ensemble mem-

---

3. L'équation de Nernst donne la tension d'équilibre d'une électrode par rapport à un potentiel standard du couple redox mis en jeu.

brane et électrodes (MEA) est intégré entre deux couches poreuses appelés diffuseurs. Les diffuseurs sont utilisés pour assurer une distribution uniforme de l'hydrogène et l'air aux électrodes. La cellule est consolidée par deux plaques bipolaires, généralement en graphite car il possède une bonne conductivité électrique. Sur un côté de ces plaques, des mini-canaux assurent la circulation de l'hydrogène et de l'air. Sur l'autre face, on trouve également les canaux d'eau de refroidissement (voir FIGURE 1.8).

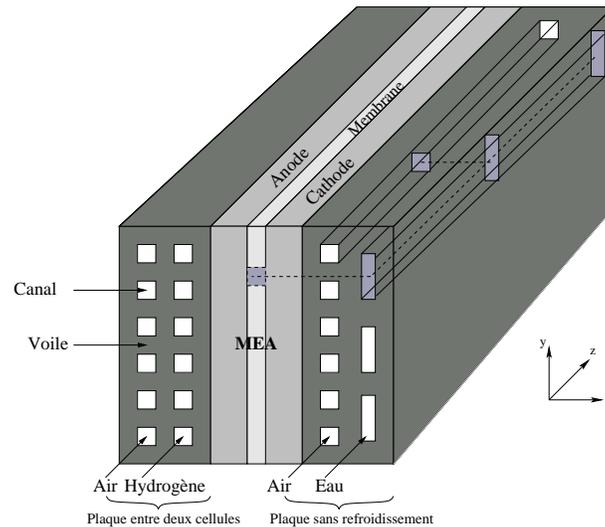


FIGURE 1.8 – Représentation d'une cellule d'une PàC dans un stack.

### 1.6.1 Le Stack d'une PEMFC

Une cellule unitaire d'une PàC produit une tension limitée entre 0.4 et 1.17 V, la densité de courant générée varie de 0.1 à 1.1  $A.cm^2$  [Bezian, 1998]. Afin d'obtenir une tension électrique suffisante il est indispensable de dimensionner une PàC en courant et en tension. Ceci revient à augmenter la surface active des cellules ou en assemblant plusieurs cellules en série pour former un stack. Cependant, afin d'avoir des intensités de courant importantes dès le démarrage de la charge, il est possible de relier les cellules de la PàC en parallèle. Par ailleurs, la tension reste la même que celle de l'assemblage qui sera suffisante pour son fonctionnement.

### 1.6.2 Description de l'assemblage en série

L'assemblage en série se fait en reliant deux pôles opposés permettant d'augmenter la tension alors que le courant reste le même qu'une cellule unitaire. La configuration en

assemblage verticale est la plus utilisée [O'Haye *et al.*, 2003]. Les cellules sont assemblées électriquement en série et chaque cellule est séparée de la suivante par une plaque bipolaire (voir FIGURE 1.9).

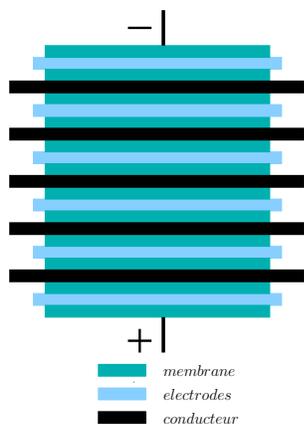


FIGURE 1.9 – Assemblage verticale.

### 1.6.3 Description de l'assemblage en parallèle

Ce type de configuration appelée, aussi configuration plane, emploie une membrane unique continue ou plusieurs membranes. Ce type d'assemblage présente l'avantage de produire une forte densité de courant. Cependant, les pertes ohmiques sont considérables. On distingue deux types de configurations :

- **L'assemblage en bande** : cette dernière est composée de plusieurs cellules assemblées en reliant deux pôles opposés de chaque cellule (FIGURE 1.10).

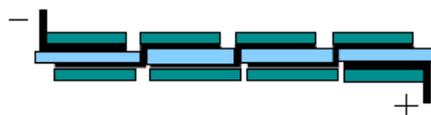


FIGURE 1.10 – Assemblage en bande.

- **L'assemblage flip-flop** : ce type d'assemblage nécessite une seule membrane et la connection entre les cellules se fait par inversion des électrodes (FIGURE 1.11).

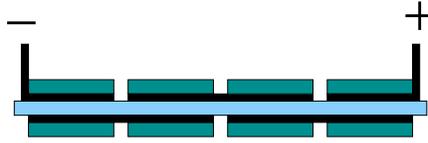


FIGURE 1.11 – Assemblage en parallèle.

## 1.7 Paramètres influant sur le fonctionnement de la PEMFC

Dans le cas de l'automobile, la température de fonctionnement est fréquemment de l'ordre de 60°C. Lorsque la température ambiante atteint une valeur proche de la température de fonctionnement de la pile, la chaleur produite devient contraignante et la distribution de la température dans la membrane en Nafion est perturbée. La mise en place d'un système de refroidissement efficace est alors nécessaire. Cependant, et afin de quantifier la quantité de chaleur à évacuer de la PàC, il est important de localiser les paramètres influant sur le comportement thermique de la PàC. Nous citons dans ce qui suit, les principaux paramètres.

### 1.7.1 Paramètres liées à la membrane

La membrane est un électrolyte solide polymère conducteur protonique qui joue un rôle clé pour les piles du type PEMFC puisqu'il assure le passage du courant électrique à l'intérieur de la PàC grâce à sa conductivité ionique. En effet, un proton ne peut migrer dans la membrane sous l'effet du champ électrique que s'il possède autour de lui un cortège d'eau de solvation. [FIGURE 1.12](#) montre un exemple de l'évolution de la résistance de la membrane en NAFION 117 avec la charge en eau.

Il est important de rappeler que si la membrane n'est pas humide, sa conductivité ionique chute ce qui risque d'interrompre le processus électrochimique. Il dès lors impératif d'humidifier les gaz et éviter les hautes températures. Lorsque la température augmente, l'humidité relative et la conductivité ionique de la membrane chutent conduisant à son assèchement. Cependant, l'augmentation de la teneur en eau de la membrane augmente sa conductivité au transfert des protons, la faisant même dépasser celle d'une solution ionique similaire [[Nguyen et Vanderborgh, 1998](#)]. En outre, le taux maximum d'hydratation de la membrane, dépend de la température d'assèchement de celle-ci [[Thomas \*et al.\*, 1993](#)]. Notons que de nombreuses recherches ont été consacrées à la problématique de la gestion

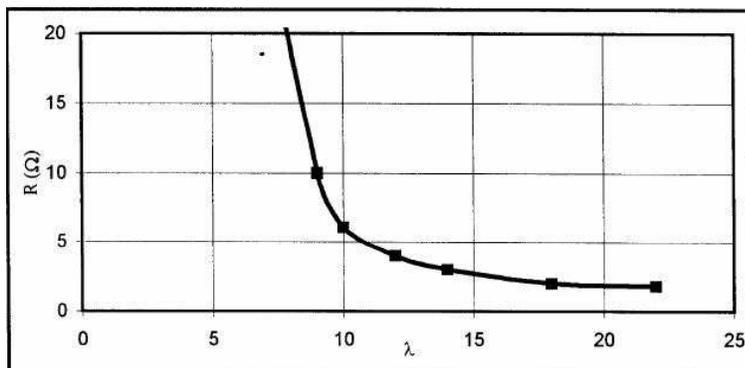


FIGURE 1.12 – Exemple d'évolution de la résistance d'une membrane en NAFION 117 de  $9\text{ cm}^2$  et la charge en eau [Gerbraux, 1996].

d'eau dans la pile (voir par exemple [Hernandez, 2006]).

Par ailleurs, une faible conductivité thermique de la cellule entraîne une répartition de la chaleur dans une masse plus grande et donc augmente la surface effective d'échange entre la membrane et les électrodes. L'effet de la conduction augmente donc la surface chauffée, ce qui diminue la conductivité ionique de la membrane de manière indirecte.

La variation de la conductivité ionique de la membrane en fonction de la température est contrebalancée par le fait que l'activité de l'eau décroît avec la température, ce qui peut faire apparaître une faible résistance apparente de la membrane à basses températures [You et Liu, 2002]. L'étude [Djilali et Lu, 2002] montre que le gradient de la température a un faible effet sur la caractéristique courant-tension, si l'on ne tient pas compte de son influence sur le contenu en eau dans la membrane.

En outre, l'augmentation de la température de fonctionnement de la PàC entraîne la chute de l'humidité relative des gaz entraînant l'assèchement de la membrane. Étant donné que la valeur maximale en vapeur d'eau dans un gaz est déterminée par sa température, on voit bien la dépendance de la teneur en eau dans la membrane de la température du fonctionnement de la pile. Par ailleurs, une diminution de la température entraîne la condensation de l'eau et donc le noyage de la PàC. Cependant, si l'eau produite n'est pas évacuée sous forme de vapeur, elle peut noyer le catalyseur et empêcher l'accès des gaz. Il s'agit du problème de noyage de la pile qui peut causer des chutes de tension.

De plus, la température de fonctionnement de la pile a une influence importante sur la durée de vie de la membrane. Ainsi, à des températures plus élevées que  $90^\circ\text{C}$ , la membrane se dégrade à cause des attaques par les radicaux libres de  $\text{OH}^-$  et de  $\text{OOH}^-$ , aggravées par les faibles taux d'humidité [Kathryn, 2004].

En résumé, pour un fonctionnement efficace de la pile, il convient de réguler la

température à une valeur optimale.

### 1.7.2 Paramètres liés à la réaction aux électrodes

La température a aussi une grande influence sur le fonctionnement du catalyseur. La loi d'Arrhénius lie la vitesse de la réaction (cf. Eq. (1.27)), l'énergie d'activation et la température. A haute température la barrière d'énergie d'activation est plus facilement franchie, donc la réaction se passe plus rapidement, cela réduit les pertes d'activation produites.

$$k = d \exp\left(-\frac{\Delta G^*}{RT}\right) \quad (1.27)$$

$k$  constante de vitesse,  $R$  constante des gaz parfaits,  $T$  température,  $d$  est un facteur de fréquence qui dépend du nombre de tentatives pour atteindre l'état d'activation.

A défaut, ces pertes créent une polarisation. Celle-ci crée un champ électrique, qui diminue la tension de la cellule, et donc le rendement de la pile [Saisset, 2004]. Pour un fonctionnement efficace, il est recommandé de maintenir la température à une valeur maximale sans pour autant assécher la membrane, ce qui exige une stratégie de refroidissement assez performante ne perturbant pas la dynamique de la pile.

### 1.7.3 Paramètres liés à la densité de courant

Les études expérimentales et la modélisation montrent la dépendance de la densité du courant à la température [Faghri et Guo, 2005].

En effet, pour les fortes densités de courant, la température de la cellule augmente et le transport d'eau par électro-osmose devient le facteur prépondérant. L'humidification de l'anode est alors nécessaire pour éviter la déshydratation de la membrane côté anode [Djilali et Lu, 2002, Ramousse *et al.*, 2005].

Wöhr [Wöhr *et al.*, 1998] montre la dépendance de la température de la cellule, ainsi que le gradient de température dans le stack, de la densité de courant et du nombre de cellules.

Par ailleurs, le modèle de Djilali [Djilali et Lu, 2002] prédit l'échauffement de la cellule de la PàC pour les fortes densités de courant et en particulier à l'interface membrane/cathode.

### 1.7.4 Paramètres liées aux propriétés physique de la cellule

La distribution de la température dans la pile, peut être liée à la variation de certains paramètres. Ces paramètres peuvent être purement physiques et donc liés à la constitution de la pile, ou sont liées aux conditions d'opération.

Il est à noter que dans la catégorie des paramètres physiques, la conductivité thermique des électrodes est l'élément déterminant dans la conduction thermique, donc dans la gestion du flux thermique.

A titre d'exemple, dans [Djilali et Lu, 2002] on fait varier la conductivité thermique des électrodes de  $0.1$  à  $1.6 \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$  et on montre que les différences des températures maximales vont de  $1.5^\circ\text{C}$  à  $5^\circ\text{C}$ .

D'autres auteurs se sont eux aussi intéressés à cette variabilité de la conductivité thermique, comme nous le montre des études comparatives sur les différents modèles employés par Ramousse [Ramousse *et al.*, 2005], Modale [Modale et Srinivasan, 1995] et notamment Costamagna [Costamagna et Srinivasan, 2001b].

Par ailleurs, dans la deuxième catégorie, les auteurs s'intéressent en particulier à montrer l'influence de la densité de courant sur la distribution de la température dans la cellule et en particulier dans la membrane [Djilali et Lu, 2002, Ramousse *et al.*, 2005, Dumercy *et al.*, 2003].

Il convient de préciser aussi l'influence des conditions d'opérations comme la température ambiante, ainsi que la position de la cellule dans le stack sur le profile des températures dans la PàC.

## 1.8 Classification des modèles thermique d'une PEMFC

Un modèle est une représentation d'un système physique, cette représentation peut se produire soit par un modèle mathématique traduit par un groupe d'équations donnant les relations entre les variables du système, soit par un modèle analogique résultant d'une analogie formelle entre les différents phénomènes physiques. Dans une pile PEMFC, la chaleur produite est du même ordre de grandeur que l'énergie électrique, les réactions aux électrodes sont exothermiques, et les échanges thermiques entre les fluides (c'est-à-dire gaz, eau du système de refroidissement) et la partie solide de la pile sont décrits par des équations différentielles ou par des équations aux dérivées partielles. La résolution de ces équations peut s'avérer très compliquée.

### 1.8.1 Classification tenant en compte la température

Appréhender le phénomène thermique de la PàC, commence par suivre la distribution de la température dans la cellule elle même. La mesure de la température interne de la cellule n'est pas facile à réaliser. Dans l'état actuel de la technologie, placer des micros capteurs dans la cellule, peut perturber le champ de l'écoulement et notamment peut poser des problèmes de fuite des réactifs. Pour cela, plusieurs modèles ont été élaborés pour décrire de façon correcte le champ de température dans la cellule d'une PàC. Ces modèles sont basés essentiellement sur la représentation par des équations différentielles. A titre d'exemple, dans le travail de Cheng [Cheng et Chang, 2005], une méthode inverse reposant sur une représentation polynômiale est proposée. Elle est basée sur les données de la température à l'interface de la surface externe de la cellule et leur généralisation sur toute la cellule. Ces mêmes auteurs proposent une amélioration de la méthode, en remplaçant la fonction polynômiale par les valeurs des températures en utilisant des capteurs ou un système thermique d'image de rayonnement infrarouge. Avec ces deux approches ils montrent que l'erreur des températures sur les valeurs prédites dépend du nombre de points de mesures.

Une autre approche de modélisation par réseaux nodaux a été utilisée par Dumercy [Dumercy *et al.*, 2003, Dumercy, 2004] pour étudier l'aspect thermique de la pile. C'est une représentation énergétique macroscopique qui est basée sur la correspondance avec les réseaux électriques.

#### 1.8.1.1 Modèles isothermes

Le problème thermique de la PàC a été longtemps négligé dans la modélisation de la PàC où la température de la cellule était supposée constante est homogène dans l'espace et dans le temps. Le modèle donné par Ge [Ge et Yi, 2003] et celui [Scott *et al.*, 2007], représentent des exemples de ce type de modèles isothermes. Il étudie l'influence de l'écoulement des réactifs sur les performances de la PàC tout en assumant que la température est constante dans la cellule et notamment dans les canaux des gaz.

#### 1.8.1.2 Modèles non isothermes

La littérature nous montre un éventail des variations de températures d'une cellule d'une PàC. Ces variations sont liées à plusieurs facteurs, à savoir les conditions d'opérations de la cellule, les paramètres thermophysiques de la cellule, les effets de joules pro-

duits par les réactions exothermiques et aux autres modes d'apport de chaleur, comme la sorption et la vaporisation de l'eau produite par la PàC.

Le modèle de Rowe [Rowe et Li, 2001] montre l'existence d'un gradient de température dans la cellule et la conséquence de ce gradient sur les performances de la PàC. Fuller [Fuller et Newman, 1993] montre aussi que la distribution de la température dépend de la conservation de la masse des réactifs.

En effet, Shan [Shan et Choe, 2006], la température interne de la cellule dépendra de sa position relative dans le stack. La température la plus importante est localisée au centre du stack.

Cependant, on rencontre dans la littérature une certaine variabilité dans les valeurs des gradients de températures et dans les valeurs maximales. Rowe [Rowe et Li, 2001] observe une élévation de température de la cellule de  $1^{\circ}\text{C}$  et qui peut atteindre la valeur de  $5^{\circ}\text{C}$  au centre du stack. Alors que Costamagna [Costamagna et Srinivasan, 2001c] prédit une température de membrane pouvant atteindre  $110^{\circ}\text{C}$  dans le cas d'une absence de refroidissement du stack. Il estime aussi [Costamagna et Srinivasan, 2001c] une augmentation de la température de l'ordre de  $10^{\circ}\text{C}$  dans les conditions adiabatiques de la cellule. D'autres travaux comme ceux de Wetton [Wetton et al., 2004] évaluent aussi une densité de courant de  $1\text{ Acm}^{-2}$  à une différence de température dans la cellule de la pile de l'ordre de  $9^{\circ}\text{C}$ .

## 1.8.2 Classification à l'échelle système

Dans la littérature il y a un certain nombre de modèles pour décrire le comportement de la pile sont proposés. Dans certains cas, ces modèles visent des phénomènes spécifiques, tels que la gestion de l'eau et le noyage. Dans d'autres cas, les modèles sont conçus pour décrire le comportement global par exemple pour tenir compte de tous les mécanismes appropriés aux phénomènes de transfert de masse et de l'énergie dans la pile.

En général, il est possible de regrouper ces modèles en deux catégories : les modèles partiels et les modèles complets. La première catégorie concerne des composants d'une cellule de carburant tels que la membrane et les électrodes poreux. La deuxième catégorie intègre les auxiliaires de la pile.

### 1.8.2.1 Modèles partiels

Dans cette première catégorie on peut citer les modèles de cellules qui traitent le problème thermique des couches et notamment le problème de diffusion des gaz dans les

électrodes ainsi que la gestion d'eau dans la membrane. Ces modèles peuvent être classés suivant la dimension du problème (1D, 2D ou 3D). Par ailleurs, ces modèles peuvent aussi être regroupés selon le phénomène physique traité : la conduction, la convection ou le couplage des deux phénomènes thermiques.

Il est utile de noter que les modèles partiels sont importants pour une description détaillée des phénomènes physiques dans la pile. A titre d'exemple, dans la catégorie des modèles traitant de la température des fluides on trouve le travail de Yi [Yi et Nguyen, 1998]. On peut aussi citer des modèles qui ne prennent en considération que la conduction dans la partie solide que représente la cellule et négligent en revanche la diffusion de la chaleur suite au déplacement des gaz dans les électrodes [Birgersson *et al.*, 2005]. Le modèle de [Kulikovsky, 2006] est basé sur un bilan thermique dans la couche du catalyseur à basse température en utilisant l'équation de transport de chaleur dans l'électrode.

### 1.8.2.2 Modèles complets

Par ces modèles, on vise une description globale de la pile. Ils incluent la description d'un minimum de composants de la cellule. Par exemple, dans [Um *et al.*, 2000b], Um propose un modèle de nature bidimensionnelle qui tient compte des transports des espèces et des protons. L'avantage de ces modèles complets, est qu'ils offrent une simulation plus précise, mais cependant présentent l'inconvénient du coût et de la complexité accrus des calculs.

### 1.8.3 Classification selon la dimension du problème

Souvent les modèles qui décrivent le comportement thermique d'une pile sont unidimensionnels et statiques. Le modèle de Verbrugge en est un exemple de ce type de modélisation [Verbrugge et Hill, 1990, Bernardi et Verbrugge, 1991]. Parmi les modèles 2D traitant la thermique de la PàC, on peut citer le travail de Gurau [Gurau *et al.*, 1998] et Ferng [Ferng *et al.*, 2004] qui traite du comportement d'une cellule entière. Le modèle de You [You et Liu, 2002] est un modèle bidimensionnel mais qui ne concerne que la partie cathode de la cellule. En revanche, le modèle 2-D de Mennola [Mennola *et al.*, 2003] s'intéresse aux couches de diffusions.

Par ailleurs, on trouve dans la littérature des modèles 3D traitant le comportement thermique de la PàC. Dans la majorité de ces modèles, les auteurs s'intéressent à décrire le comportement thermique d'une seule cellule, on peut citer le modèle de Liu [Liu et Zhou, 2003] et celui de Um [Um et Wang, 2004]. Le modèle donné par Trabold

[Trabold, 2005] est un modèle 3D dans la cellule, il utilise une configuration serpentine des canaux des gaz et prend en considération le transfert conductif et convectif de la masse et de la chaleur. Ce même modèle, utilise le code commercial CFD employant la discrétisation en volume finis pour résoudre les équations régissant le problème physique. Le modèle 3D de Nguyen [Nguyen *et al.*, 2004] prend en compte le changement de phase et de température dans la cellule d'une PàC.

## 1.9 Modélisation thermique d'une PEMFC

Pour évaluer la répartition des sources de chaleur dans une cellule de PàC à membrane PEMFC, des modèles génériques de mono cellule permettant une représentation aussi complète que possible des phénomènes physiques ont été conçus.

On trouve aussi des modèles plus précis, gardant l'essentiel de l'influence de la géométrie. Dans ces modèles, deux descriptions complémentaires ont été ajoutées. La première description concerne les transferts dans une partie du cœur de PàC comprenant les plaques bipolaires, les couches de diffusion, les électrodes et la membrane. Tandis que la deuxième description concerne les transferts des gaz dans les canaux d'alimentation. Parmi ces modèles, nous citons le modèle de Bonnet [Bonnet *et al.*, 2008] où le transfert de fluides et de charges sont considérés comme étant mono dimensionnels dans la direction perpendiculaire au plan des électrodes. Le modèle Lasbet de [Lasbet et Auvity, 2006] montre l'influence de la géométrie des canaux des gaz gravés dans les plaques bipolaires sur le transfert thermique dans la cellule de la PàC.

Par ailleurs, dans les modèles locaux [Ramousse *et al.*, 2005], les phénomènes de transfert thermique mis en jeu dans la cellule sont : la convection résultante des flux des réactifs gazeux dans les électrodes et au flux d'eau dans la membrane, et notamment la diffusion dans les matériaux polymères de la membrane.

L'étude de Djilali [Djilali et Lu, 2002] montre que les influences de l'effet de Joule et le transfert de chaleur convectif associé au transport d'eau apparaissent comme minimales par rapport à la chaleur dégagée par les réactions aux électrodes. Ce constat ne concerne pas les cas où la PàC fonctionne à de faibles densités de courant. De plus, la présence d'eau liquide modifie la distribution de la température, notamment dans le cas où les gaz sont non saturés en eau à l'entrée de la PàC [Rowe et Li, 2001].

Cependant, la partie la plus délicate dans l'étude du comportement thermique de la PàC consiste à localiser et à quantifier les différentes sources de chaleur, et en particulier

au niveau des interfaces membrane-électrodes. En effet, aux niveaux de ces interfaces, les phénomènes de changement de phase de vapeur d'eau dans les électrodes et de l'eau liquide dans la membrane sont à l'origine de nouveaux puits ou de sources de chaleur.

Généralement, la chaleur dégradée par effet de Joule dans la membrane est modélisée par une source de chaleur volumique répartie dans son épaisseur. Les quantités de chaleur produites ou absorbées par les deux demi-réactions aux électrodes sont aussi prises en compte. La chaleur libérée suite aux chutes de tension (surtensions), constitue une source de chaleur surfacique aux électrodes, c'est à dire aux interfaces membrane-électrodes.

Il est à noter aussi l'existence d'un autre type de modèles basé sur un bilan thermique global sur le stack incluant le dispositif de refroidissement. En revanche ce type de modèles ne permet pas d'indiquer pas la température locale avec précision mais donne une valeur moyenne. Néanmoins, ces modèles exprimés sous forme d'équations d'état sont utiles pour la commande [Saisset, 2004, Lachaise, 2004]. L'étude de ce type de modèle fera l'objet du chapitre 6 de cette thèse.

## 1.10 Simulation de la pile

La simulation numérique d'un système pile à combustible, consiste à reproduire et à prédire le fonctionnement du système PàC, préalablement décrit par un ensemble de modèles. Elle s'appuie sur des méthodes mathématiques et informatiques spécifiques. En chaque point du système considéré (c'est-à-dire PàC), plusieurs grandeurs physiques (vitesse, pression, température, etc.) décrivent l'état et l'évolution du système à étudier. Celles-ci ne sont pas indépendantes mais reliées et régies par des équations généralement aux dérivées partielles.

Ces équations constituent la traduction mathématique des lois physiques qui décrivent le comportement du système. Simuler l'état de ce dernier consiste à déterminer en tout point les valeurs numériques des paramètres. Comme il y a un nombre infini de points, donc une infinité de valeurs à calculer, cet objectif est inaccessible sauf dans le cas où les équations peuvent être résolues analytiquement. Finalement la solution réside dans la discrétisation des équations généralement aux dérivées partielles.

Deux méthodes sont souvent utilisées. La première méthode est fondée sur un calcul déterministe en vue de la résolution des équations discrétisées régissant les phénomènes étudiés. La deuxième est relative aux méthodes de calcul statistique ou probabiliste. La discrétisation des équations repose sur l'usage des méthodes traditionnelles, qui consiste

à assimiler chaque point de l'objet à un petit volume élémentaire. On construit alors une relation algébrique entre les paramètres de chaque élément de volume et son voisinage, on obtient ainsi autant de relations que de paramètres.

Vu les contraintes rencontrées dans la modélisation d'une PàC liées aux problèmes d'assèchement de la membrane et aux problèmes d'alimentation en gaz, il est nécessaire de construire un modèle qui tient en compte de ces paramètres. Ce modèle doit aussi prendre en considération le facteur temps car les gaz et le solide ne se comportent pas thermiquement de la même façon. En effet, le phénomène de conduction thermique dans la partie solide de la PàC est plus lent que celui de la diffusion de chaleur dans la partie fluide. Ce déséquilibre est contraignant au coût de la simulation. A ce problème s'ajoute la vitesse des réactions aux électrodes qui dépend elle même de la température locale au niveau des électrodes. Un modèle multi échelle de temps et de taille peut remédier à cette contrainte. Cependant, afin d'éviter la réalisation d'un très grand nombre de prototypes expérimentaux, une simulation fiable s'impose. Par ailleurs, le modèle de la PàC à simuler, doit prendre en considération les phénomènes locaux du cœur de la PàC et notamment des auxiliaires.

## **1.11 Optimisation du système pile à combustible**

L'optimisation d'un système d'alimentation de PàC est très complexe en raison du nombre de composants et de fonctions exigés. Le but de ce sous paragraphe est de décrire certains paramètres que l'on peut maîtriser pour contrôler le système PàC.

Parmi les paramètres sur lesquels on peut agir en vue d'optimiser le fonctionnement d'une PàC, on peut citer, la pression, la température, la composition et le taux d'utilisation des réactifs. La maîtrise de ces paramètres passe par une modélisation à une échelle locale et notamment à l'échelle du système pile à combustible.

### **1.11.1 Pression**

La pressurisation des cellules de la pile à combustible relève du problème d'optimisation. En effet, il y a beaucoup de facteurs en corrélation qui peuvent rendre difficile le problème du contrôle de la pression partielle des gaz dans les canaux de la pile. Assurer une pression partielle constante des réactifs aux électrodes permet une alimentation équitable en gaz dans les zones des réactions, mais cela sera au détriment du coût de la compression.

### 1.11.2 Température

Bien que la tension de circuit ouvert diminue avec l'augmentation de la température, les performances de la PàC s'améliorent avec l'augmentation de la température de fonctionnement. Ceci est dû aux réductions des polarisations de transfert de masse et des pertes ohmiques. Cependant, la température de fonctionnement de la pile est limitée par la contrainte du matériaux utilisé.

### 1.11.3 Taux d'utilisation

Des taux d'utilisations des réactifs élevées sont souhaitables dans le cadre de la pile et en particulier dans les cellules de petites tailles. Ceci permet de réduire au minimum le coût de compression du carburant et la taille du ventilateur pour l'alimentation de l'oxydant. Cependant, puisque l'utilisation complète du carburant n'est pas pratique, excepté pour certains carburants comme l'Hydrogène pur, le choix du taux d'utilisation représente un équilibre entre les conditions carburant/chaleur et l'impact de l'utilisation sur le rendement global [U.S.Department, 2004].

### 1.11.4 Taux d'humidification des gaz

Une cellule non humidifiée fonctionnant avec un débit d'air et une température correctement donnés produit un rendement 40% moins élevé qu'une cellule humidifiée [Larminie et Dicks, 2000]. Ceci s'explique par le fait que bien que l'équilibre global de l'eau puisse être atteint, il y aura des secteurs dans la cellule, particulièrement près des points d'entrée de gaz, où l'humidité sera si basse.

Notons qu'il existe deux types d'humidification, l'humidification interne et l'humidification externe. Notons aussi que les piles de petites puissances ne nécessitent pas une humidification externe, contrairement aux piles de grandes puissances qui ne peuvent fonctionner correctement sans la présence d'humidification des gaz.

Généralement ce n'est pas seulement l'air qui est humidifié. En effet, pour bien répartir l'humidité dans la cellule, l'hydrogène est aussi humidifié. Il convient de préciser que la quantité d'eau ajoutée est beaucoup plus importante quand la pile fonctionne à de hautes pressions.

Une cellule fonctionnant à une températures de  $60^{\circ}C$  produit moins de pertes en particuliers les chutes de tension d'activation à la cathode citées dans le chapitre de l'état de l'art. En outre, il semble raisonnable et économique d'actionner une cellule à une

densité de puissance maximum que possible même si le poids, le volume, le coût et la complexité supplémentaires de l'humidification du système sont pris en considération.

Dans le cas de l'humidification externe, les gaz sont humidifiés grâce à un processus de chauffage à la vapeur par bouillonnement d'eau. On suppose généralement que le point de condensation d'air est identique que la température de l'eau surchauffée, ainsi la température de l'eau est complètement contrôlée.

Un des moyens les plus faciles à réaliser dans l'humidification est l'injection directe de l'eau comme pulvérisateur. Ceci a l'avantage supplémentaire de refroidir le gaz. La méthode comporte l'utilisation des pompes à pressuriser l'eau et également une valve solénoïdale pour ouvrir et fermer l'injecteur. Elle est donc assez coûteuse mais particulièrement employée dans les cellules de grandes tailles.

Une autre méthode récemment décrite par Floyd [Larminie et Dicks, 2000], utilise la mousse en métal pour faire une sorte de jet d'eau fin pour humidifier l'eau. Ce système présente l'avantage d'utiliser une seule pompe pour injecter l'eau. Une autre méthode consiste à humidifier directement la pile sans passer par l'humidification des gaz. Des mèches qui plongent directement dans l'eau sont introduites dans la couche de diffusion de la cellule. Ce principe est légèrement autorégulateur car aucune eau ne peut être véhiculée si les mèches sont saturées. En revanche cette méthode présente la difficulté du scellement de la cellule. La mèche serait également un itinéraire facile de sortie des gaz. Une autre façon d'humidifier la cellule consiste à injecter directement l'eau liquide dans la cellule. Le champ d'écoulement est représenté par un fluide colporteur qui circule dans un labyrinthe sans sortie dans les plaques bipolaires.

Finalement, la méthode appropriée employée pour l'humidification de la PàC dépendra de plusieurs facteurs : la taille de la cellule, la pression de fonctionnement, l'équilibre recherché entre les performances et la simplicité de réalisation, et la source du carburant parmi d'autres considérations.

### **1.11.5 Refroidissement de la PEMFC**

L'échauffement de la PàC dû au caractère exothermique de la réaction chimique et aux pertes électrochimiques et de diffusion, est assez rapide et nécessite souvent un système de refroidissement extérieur. L'augmentation de la température de la PàC et la nécessité de devoir la réguler, sont liées d'une part au débit d'eau de refroidissement et notamment aux conditions aux limites de la cellule considérée comme étant adiabatique ou non-adiabatique et, d'autre part, à la variabilité des paramètres thermo-physiques du

matériau de la cellule elle même.

Notons cependant que les piles de petites tailles (c'est-à-dire dimensions de membrane inférieures à 5-6 cm de côté) [Lasbet et Auvity, 2006], ne nécessitent pas un refroidissement supplémentaire autre que la convection. Notons aussi que la convection naturelle suite à la circulation des gaz dans les canaux d'alimentation des piles PEMFC ne suffit pas pour ramener la température de la pile au point de fonctionnement souhaitable. En effet, pour des applications au transport, la production énergétique est d'environ d'une centaine de kilowatts, un refroidissement forcé doit être alors intégré dans le stack.

L'énergie thermique évacuée depuis le cœur de PàC doit être dissipée dans un radiateur. C'est le rôle des plaques bipolaires qui comportent en leur centre un échangeur intégré dédié à leur refroidissement par eau.

Il existe deux types de refroidissement des PàC. Le premier type utilise un fluide colporteur et le second utilise de l'eau. Dans la premier type, on distingue plusieurs modes : monophasique, supercritique et diphasique soit en convection forcée soit en caloducs.

Plusieurs contraintes sont posées à la conception du système de refroidissement. On cite le faible écart de température entre l'ambiance et le stack, ce qui nécessite la recherche d'une géométrie d'échangeurs qui favorise l'échange thermique. Une des façons pour contourner ce problème est de produire du chaos au sein des canaux de refroidissement. Ceci favorisera l'échange de chaleur entre la cellule et le fluide [Lasbet et Auvity, 2006]. Les transferts thermiques convectifs entre le fluide colporteur (c'est-à-dire l'eau de refroidissement) et la plaque bipolaire vont ainsi s'intensifier. Dans cette perspective, de nombreux modèles de refroidissement du stack ont été élaborés [Oseen-Senda, 2006].

Notons par ailleurs, que étant donné que la chaleur produite par la PàC dépend explicitement de la taille et du nombre de cellules, un choix judicieux de l'emplacement des canaux de refroidissement (c'est-à-dire échangeurs) doit être pris en compte. Il est dès lors nécessaire d'optimiser le circuit de refroidissement. Deux démarches peuvent être prises en compte. La première démarche consiste à définir le nombre d'échangeurs que l'on doit placer dans un stack. La seconde démarche concerne le choix de la configuration de l'échangeur lui même.

Notons par ailleurs que le refroidissement avec de l'air est simple à mettre en oeuvre, mais il nécessite des dimensions d'appareillage importantes.

### 1.11.5.1 Refroidissement à l'eau

Le recours au refroidissement à l'eau des PàC est une solution incontournable lorsque la chaleur produite est importante. Si la puissance produite par la PàC est inférieure à  $100\text{ W}$  la convection naturelle à l'air ambiant est suffisante. Si la puissance délivrée est supérieure à  $100\text{ W}$  et inférieure à  $3\text{ KW}$ , on utilise la convection forcée avec des ventilateurs. Maintenant, pour une puissance supérieure à  $5\text{ KW}$ , le refroidissement à l'air n'est plus suffisant et par conséquent le refroidissement à l'eau devient indispensable.

Le refroidissement à l'eau quant à lui exige une conception plus complexe où la température et la pression de l'eau de refroidissement doivent être contrôlées. Des pompes sont alors utilisées pour assurer la recirculation de la quantité d'eau nécessaire au refroidissement. Le flux volumétrique de l'eau est très petit, il est habituellement deux à trois fois plus petit que celui du flux des gaz d'alimentation. Pour les conduites annulaires, la vitesse de l'eau est de l'ordre de  $5 - 6\text{ m/s}$  [Shan et Choe, 2006]. Afin d'éviter les situations de congélation, un antigel liquide est substitué à l'eau normale dans le système de refroidissement.

### 1.11.5.2 Refroidissement par circulation d'air à la cathode

Pour une petite cellule de PEMFC, la cathode peut fonctionner dans un des deux modes d'écoulement : à l'air libre en convection naturelle ou à l'air forcée en convection forcée. La convection naturelle est la manière la plus simple de refroidir la cellule et d'évaporer l'eau à la cathode. Ce type de refroidissement est réalisé avec une structure assez ouverte sur les côtés de la cathode, mais au détriment du volume de la PàC [Oseen-Senda, 2006].

Le refroidissement à air forcé dans la cathode est un autre moyen d'extraire la chaleur produite. Ce moyen a comme conséquence une structure plus compacte de la PàC et permet d'augmenter les possibilités de refroidissement. Cependant, la vitesse très élevée de circulation d'air de cathode nécessite un canal de gaz très grand pour dégager la chaleur produite.

### 1.11.5.3 Refroidissement par circulation d'air séparée

Bien que la circulation d'air forcée puisse extraire plus de chaleur, trop d'air de réactif peut dessécher la membrane. Dans ce cas précis, les cellules auront besoin généralement d'un air séparé de réactif et d'un système de refroidissement. L'avantage de cette structure

est qu'on peut extraire plus de chaleur à partir de la PàC sans affecter la circulation d'air.

#### 1.11.5.4 Refroidissement avec écarteurs de chaleur

Un autre moyen pour refroidir la PàC consiste à utiliser des écarteurs de chaleur pour en extraire la chaleur. Afin d'absorber la chaleur à l'air environnant par la convection libre ou forcée, des écarteurs sont utilisés. Ces écarteurs ont pour rôle de réduire les gradients de la température observés dans le stack de la PàC et ils présentent un rendement assez élevé.

## 1.12 Conclusion

De nombreuses recherches sur le comportement thermique de la pile se sont focalisées sur la description d'une cellule. Ces recherches ont montré l'influence de certains paramètres physiques tels que la conductivité thermique sur le flux thermique. A titre d'exemple, la diminution de conductivité thermique entraîne l'augmentation de la résistance au transfert, ce qui entraîne à l'échauffement de la pile. Cependant, rare sont les travaux qui s'intéressent à l'étude du comportement thermique de tout le stack (toutes les cellules de la PàC). Étant donné que la tension délivrée par la cellule d'une PàC dépend directement de sa température, il est important d'homogénéiser la température du stack afin d'obtenir des tensions semblables. C'est dans cette perspective que nous avons modélisé tout le stack de la PàC y compris les plaques bipolaires ainsi que les canaux des gaz et du circuit eau. Nous avons utilisé l'approche nodale pour décrire le comportement thermique des parties solide et fluide ensemble.

Dans le chapitre suivant, nous présenterons un brief rappel sur les notions de transfert de chaleur. Nous aborderons aussi les différentes approches de la modélisation thermique et en particulier la modélisation par l'approche nodale.



# Chapitre 2

## Modélisation du comportement thermique d'une PEMFC

### 2.1 Introduction

Dans ce chapitre, nous allons présenter des définitions générales sur le transfert thermique et en particulier dans les milieux composés. Ensuite, nous présenterons les différentes techniques de modélisation et notamment la modélisation par l'approche nodale. Nous donnerons aussi les motivations du choix de l'approche nodale et un état de l'art sur la méthode. Nous concluons ce chapitre en posant le problème du couplage thermique dans les systèmes composés de parties solide et fluide comme c'est le cas pour les piles à combustible de type PEMFC.

La description du comportement thermique de la PàC, nécessite la quantification des flux de chaleur qui traversent les différents compartiments des cellules formant la pile. Cependant, la mesure de la température interne de la cellule n'est pas facile à réaliser. En effet, placer des micros capteurs dans la cellule, peut perturber le champ de l'écoulement et notamment peut poser des problèmes de fuite de réactifs [Cheng et Chang, 2005].

La plupart des modèles décrivant la thermique de la pile utilisent les techniques de discrétisation traditionnelles tel que les différences finies, les volumes finis ou encore les éléments finis, pour résoudre l'équation de la chaleur sous la forme différentielle ou aux dérivées partielles [Nguyen *et al.*, 2004, Litster *et al.*, 2006].

Ces modèles peuvent être regroupés en deux catégories. La première catégorie concerne les modèles locaux où l'on s'intéresse à décrire les champs des températures à l'échelle

de la cellule elle même [Djilali et Lu, 2002, Shan et Choe, 2006]. La deuxième catégorie représente les modèles thermiques globaux. Dans ce dernier type de modèles, le système de la pile à combustible tout entier est pris en compte y compris les canaux des gaz et le circuit de refroidissement. Dans cette catégorie, nous pouvons distinguer deux types de modèles : les modèles de commande, qui s'inspirent d'un bilan thermique global sur la PàC [Saisset, 2004, Lachaise, 2004], et les modèles complets où chaque cellule de la PàC est prise en compte dans la description thermique [Shan et Choe, 2006]. Ce dernier type de modélisation est plus adapté lorsqu'il s'agit d'optimiser le rendement électrique de la pile à combustible.

Dans la littérature, nous trouvons également un autre type de modélisation inspiré de l'analogie thermique-électrique. Ce type de représentation d'ordre macroscopique est basé sur une approche appelée "méthode nodale". Cette méthode a été récemment testée pour l'étude thermique d'une pile à combustible [Dumercy, 2004]. C'est une approche de modélisation qui décrit le comportement thermique de la PàC à travers un modèle sous la forme  $\dot{T} = GT + B$ . Cette écriture présente l'avantage de représenter les transferts thermiques entre les différents composants du système physique malgré leur hétérogénéité (composant solide, composant liquide ou composant gazeux).

Par ailleurs, il y a lieu de noter que les modèles décrits par les EDPs, souffrent d'un inconvénient majeur lié au coût de calcul très important. De plus, la mise en oeuvre d'une banque de données des champs de températures dans la PàC (cartographie thermique) nécessite des calculs précis, donc un maillage<sup>4</sup> fin.

Cependant, il est important de noter que la modélisation par la méthode nodale telle qu'elle est présentée dans le travail de Dumercy [Dumercy, 2004], présente deux limitations : la première est relative à l'utilisation de la méthode nodale en couplage avec la FDM. La seconde concerne la précision des résultats étant donné la taille des nœuds du réseau nodal considéré dans les simulations.

Dans ce travail, nous nous intéresserons en particulier à pallier au problème de couplage entre deux types de modélisation. En effet, ce type de couplage est pénalisé par un temps de calcul accru et la nécessité d'une capacité de stockage importante. Par ailleurs, il est important d'exploiter les possibilités que nous offre l'approche nodale pour l'analyse et la représentation des phénomènes de conduction et de convection thermiques dans la PàC, grâce à la notion de conductance thermique équivalente.

De plus, l'approche nodale présente des caractéristiques intrinsèques qui permettent

---

4. Un maillage est la discrétisation spatiale d'un milieu continu, ou aussi, une modélisation géométrique d'un domaine par des éléments proportionnés finit et bien définit.

l'utilisation du calcul parallèle intensif.

## 2.2 Notions sur les transferts de chaleur

Les lois de la thermo-dynamique montrent l'interaction entre un système et son environnement. Elles définissent son état d'équilibre et sont employées pour déterminer la quantité d'énergie nécessaire pour qu'un système puisse changer son état d'un point d'équilibre à un autre. Cependant, ces lois ne mesurent pas le mode ou le taux du transfert d'énergie, des relations des transferts thermiques complètent les lois thermo-dynamiques en fournissant des équations qui relient le taux de transfert thermique entre un système et son environnement.

Le transfert thermique est un processus important qui représente une partie intégrale de notre environnement et notre vie quotidienne. La chaleur transférée ou la chaleur échangée entre deux milieux se produit suite à une différence de température entre ces deux milieux. Cette chaleur peut être transférée par trois modes distincts, la conduction, la convection ou encore le rayonnement. Chacun de ces modes de transfert thermique peut être défini par une équation appropriée donnant son taux de transfert. Rappelons que la conduction thermique est définie par la loi de Fourier, la loi de Newton définie quand à elle la convection. Cependant, le rayonnement est décrit par la loi de Stefan-Boltzmann.

**Loi de Fourier de conduction.** La densité de flux thermique traversant une surface  $A$  est proportionnelle au gradient de température

$$\dot{Q}_{cond} = -kA\nabla T \quad (2.1)$$

où le coefficient de proportionnalité  $k$  est la conductivité thermique du matériau. Il dépend du matériau et de sa température.  $A$  représente la surface d'échange thermique.

**Loi de Newton de convection.** Le taux de transfert thermique entre une surface et un fluide est donné par

$$\dot{Q}_{conv} = hA\Delta T \quad (2.2)$$

où  $h$  est le coefficient de transfert à travers la surface  $A$ .

**Loi de Stefan-Boltzmann de radiation.** Les radiations sont exprimées par l'équa-

tion suivante

$$\dot{Q}_{rad} = A_1 F_{1-2} (T_1^4 - T_2^4) \quad (2.3)$$

$F_{1-2}$  est un facteur de forme,  $A_1$  est la surface d'échange et  $T$  la température du corp.

Par ailleurs, il est nécessaire de préciser que les trois modes de transfert de chaleur au sein d'une PàC sont le rayonnement, la conduction et la convection. Cependant, pour le type de PàC considéré dans ce travail (c'est à dire PEMFC) et la gamme de températures traitée (c'est-à-dire inférieur à  $100^\circ C$ ), nous pouvons nous limiter aux transferts convectif et conductif. Dans ce qui suit, nous allons décrire ces deux modes de transferts thermiques dans un milieu composé.

### 2.2.1 Transfert de chaleur par conduction : l'équation de conservation de l'énergie

Considérons un volume élémentaire  $V$  représentant la partie solide de la PàC, délimitée par une surface  $S$ , qui est la frontière de  $V$ . Le volume  $V$  et sa frontière  $S$  seront supposés être comme indéformables, fixes et continus (FIGURE 2.1).

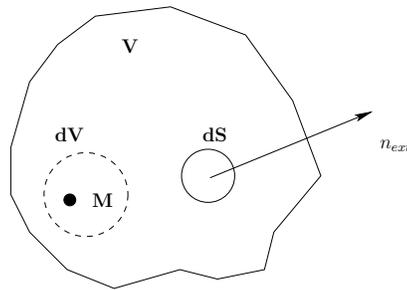


FIGURE 2.1 – Élément de volume du milieu

Le milieu reçoit, conduit et absorbe un certain flux de chaleur. Sa température  $T$  évolue dans le temps et l'espace :  $T = T(s, t)$ . Il en est de même de la densité de flux total de chaleur  $Q_t = Q_t(s, t)$ . Rappelons que par définition même du flux thermique,  $Q_t$  est la quantité de chaleur reçue par le volume  $V$  à travers la surface  $S$  par unité de temps. Elle est égale à

$$\int_V -Q_t n_{ex} dS \quad (2.4)$$

Le milieu étant considéré comme indéformable, seule la variation locale de la tem-

pérature qui intervient dans l'expression de la variation instantanée de l'énergie interne totale  $E$  du milieu. Cependant, l'énergie thermique accumulée par le milieu par échauffement et par unité de temps, s'accroît selon l'équation

$$\frac{\partial E}{\partial t} = \frac{\partial Q}{\partial t} = \frac{\partial Q}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial t} = \int_V c_p(T) \frac{\partial T}{\partial t} dm = \int_V \rho c_p(T) \frac{\partial T}{\partial t} dV \quad (2.5)$$

avec

- $Q$  : La quantité de chaleur échangée par le milieu avec son environnement.
- $\rho$  : La masse volumique du milieu.
- $c_p$  : La chaleur massique du milieu à pression constante dépendant de la température.

En l'absence de création d'énergie, l'application du premier principe de la thermodynamique au volume  $V$  nous conduit à écrire le bilan suivant

$$\underbrace{\int_V \rho c_p(T) \frac{\partial T}{\partial t} dV}_{\text{Variation de l'énergie interne}} = \underbrace{\int_V -Q_t n_{ex} dS}_{\text{Flux traversant S}} \quad (2.6)$$

Après application de la formule d'Ostrogradsky [John H. IV et John H. V, 2004] qui consiste à la transformation de l'intégrale de surface en intégrale de volume, au membre de droite de l'équation (2.6), nous obtenons le bilan énergétique suivant

$$\int_V \rho c_p(T) \frac{\partial T}{\partial t} dV = - \int_V \text{div}(Q_t) n_{ex} dV \quad (2.7)$$

Pour une unité de volume  $V$ , le bilan local prend la forme suivante

$$\rho c_p(T) \frac{\partial T}{\partial t} + \text{div}(Q_t) = 0 \quad (2.8)$$

L'équation (2.8) désigne la conservation de l'énergie et  $Q_t$  représente la densité de flux de chaleur totale.

Il est à noter que dans les piles à combustible à bases températures comme c'est le cas des PEMFC, la chaleur est transmise par conduction et par diffusion.

Il faut rappeler que l'on a adopté comme hypothèse le transfert de chaleur simultanément diffusif-conductif couplé, en présence de la convection forcée dans les canaux d'alimenta-

tion des gaz et notamment dans le circuit de refroidissement. Ceci revient à exprimer la densité de flux de chaleur totale  $Q_t$ , c'est la somme de toutes les contributions, soit

$$Q_t = Q_d + Q_c + Q_f \quad (2.9)$$

La densité de flux de chaleur par conduction  $Q_c$ , est donnée par la loi de Fourier

$$Q_c = -\lambda_c(T)\mathbf{grad}(T) \quad (2.10)$$

où  $\lambda_c$  est la conductivité thermique du milieu.

L'équation (2.10) montre que les flux de chaleur par conduction sont d'autant plus intenses que les écarts de températures sont plus importants, et qu'en outre la chaleur va des points chauds vers les points froids.

En assimilant la divergence du flux diffusif à un terme source local  $S_d$ , l'équation (2.8) s'écrit

$$\rho c_p(T) \frac{\partial T}{\partial t} - \mathit{div}(\lambda_c(T)\mathbf{grad}(\mathbf{T})) = S_d \quad (2.11)$$

avec

$$S_d = -\mathit{div}(\mathbf{Q}_d) \quad (2.12)$$

Par ailleurs, il est important de rappeler que dans la plupart des cas, la chaleur massique  $c_p(T)$  et la conductivité thermique  $\lambda_c(T)$  sont prises constantes. Le modèle thermique est alors linéaire. D'un point de vue théorique, ces deux paramètres varient avec la température, ce qui rend le modèle thermique non-linéaire et engendre donc une difficulté pour la résolution.

Rappelons que la divergence du flux diffusif est d'un grand intérêt pratique car elle caractérise l'énergie diffusive dégagée par le milieu. Elle représente, de ce fait, le terme source diffusif que l'on retrouve dans l'équation de conservation de l'énergie (Eq. (2.11)).

Cependant, c'est l'équation de conservation de l'énergie qui permet d'effectuer le couplage entre le phénomène de conduction et de convection. En effet, la connaissance du champ des températures des parties fluides et du champs des températures des parties solides sont nécessaires pour le calcul de l'interaction entre ces deux milieux.

Ces deux équations définissent un système fortement couplé d'équations aux dérivées partielles et intégral-différentielle non linéaires, où les inconnues sont le champ des

températures. On doit donc résoudre simultanément deux types d'équations.

### 2.2.2 Conduction thermique dans les milieux composés

L'analogie électrique est souvent utilisée pour déterminer la relation entre les conductivités thermiques et les différentes couches du milieu hétérogène. Les résistances au transfert thermique des couches placées en série sont alors additionnées pour donner la résistance thermique équivalente suivante

$$\frac{1}{kA} = \sum_i \frac{\delta_i}{\lambda_i A_i} \quad (2.13)$$

En effet, l'analogie entre les circuits électriques et les systèmes thermiques est couramment employée pour déterminer le transfert thermique global dans un milieu composé de plusieurs couches. Les résistances de transfert pour chaque couche en série sont sommées pour définir la résistance globale de transfert thermique du milieu.

### 2.2.3 Transfert de chaleur par convection

Dans un mouvement de fluide, l'énergie est transférée non seulement par la conduction de chaleur mais aussi par le mouvement macroscopique du fluide lui-même. En effet, dans un volume de fluide, la chaleur traverse la surface du fluide d'une part, par la conduction thermique suite à un gradient de température, et d'autre part, grâce à l'énergie cinétique qu'emmagasine le fluide et à son enthalpie. Ce dernier type de transfert est connu en tant que transfert de chaleur par convection qui peut être décrit comme la superposition de la conduction et du transfert d'énergie thermiques du fluide en mouvement.

Cependant, durant le transfert thermique entre un solide et un fluide, il y a création d'une couche limite thermique. Celle-ci a un grand effet sur la quantité de la chaleur transférée entre le corps solide et fluide. C'est L. Prandtl en 1904 qui a développé cette théorie [John H. IV et John H. V, 2004]. Dans cette région, la température dépendra de la vitesse du fluide et prend une valeur entre celle du solide  $T_s$  et celle du fluide en mouvement  $T_w$ . Un flux de chaleur alors traverse cette couche suite à ce gradient de température et le fluide peut jouer le rôle du refroidissement si sa température est inférieure à celle du solide.

En résumé, le flux de la chaleur  $\dot{Q}$  dépend donc d'une part des champs de températures et d'autre part, de la vitesse du fluide. Cependant, l'évaluation de ces deux variables

est tout à fait complexe et peut mener à des calculs difficiles. Nous avons

$$\dot{Q} = h(T_s - T_f) = h\Delta T \quad (2.14)$$

Par ailleurs, le calcul du coefficient de transfert thermique  $H$ , nécessite la connaissance du champ de températures dans le fluide. Ceci est alternativement influencé par le champ de vitesse dans le fluide. Ainsi, en plus des bilans énergétiques de la thermodynamique, les équations de la mécanique des fluides en mouvement fournissent les lois fondamentaux dans la théorie de transfert de chaleur par convection.

Le coefficient local de transfert thermique est différent en chaque point de l'obstacle. En pratique un coefficient de transfert thermique moyen  $H_m$  est pris en vue d'évaluer l'écoulement le flux de chaleur qui traverse une surface  $A$ , soit (voir par exemple [John H. IV et John H. V, 2004])

$$H_m = \frac{\dot{Q}}{A\Delta T} \quad (2.15)$$

La détermination du coefficient de transfert  $h$  fait appel aux équations de Navier-Stokes.

## 2.2.4 Principe de la résistance thermique

Comme le montre la [FIGURE 2.2](#) donnant l'analogie électrique et thermique, un courant  $I$  traverse une résistance  $R_e$ . La différence de potentiel  $\Delta V = V_1 - V_2$  est la force d'entraînement du courant électrique qui est exprimé par la loi suivante

$$I = \frac{\Delta V}{R_e} \quad (2.16)$$

Comme dans le cas de passage d'un courant électrique, le flux de chaleur thermique est régi par la différence de la température, et il peut être calculé comme suit

$$\dot{Q} = \frac{\Delta T}{R} \quad (2.17)$$

A partir de l'équation (2.13), on définit la résistance thermique par la relation suivante

$$R = \frac{L}{Ak} \quad (2.18)$$

De la même façon la résistance de convection donnée par la loi de Newton de convection

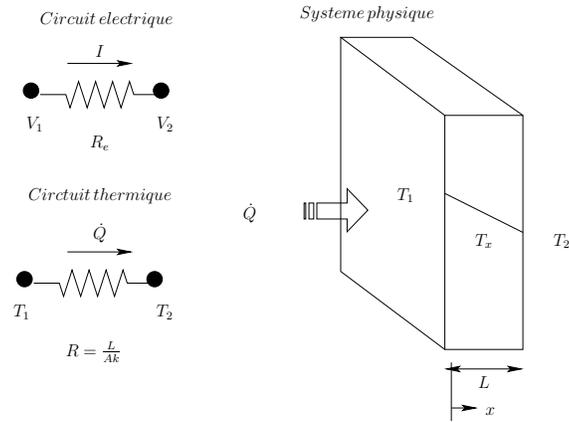


FIGURE 2.2 – Analogie électricité-thermique : conduction 1D et stationnaire.

prend la forme suivante

$$R = \frac{1}{hA} \quad (2.19)$$

## 2.3 Méthodologies de modélisation du comportement thermique d'une pile

D'après leur domaine d'application et la nature des modèles utilisés, il est possible de regrouper les différentes méthodes de modélisation en deux catégories. Les méthodes CFD qui résolvent les équations aux dérivées partielles et les méthodes nodales inspirées de l'analogie thermique/électrique.

Dans les méthodes CFD, on distingue trois types de représentation des problèmes thermiques

1. La méthode des éléments finis.
2. La méthode des volumes finis.
3. La méthode des différences finis.

Tandis que dans la méthode nodale, on fait appel à l'analogie thermique/électrique pour définir les échanges thermiques entre les différents compartiments du système.

Les méthodes nodales permettent l'étude des performances des systèmes dans leur ensemble en y associant leurs bilans énergétiques. Cependant, les techniques CFD sont essentiellement adaptées à des études fines de zones particulières d'un système et sur des périodes de temps limitées.

Par ailleurs, les modèles associés aux méthodes nodales sont des lois de conservation intégrées sur des grands volumes alors que les méthodes CFD requièrent la résolution des équations de Navier-Stokes et de l'énergie dans le domaine temporel, auxquelles il faut ajouter les conditions aux limites et les conditions initiales pour la fermeture du problème physique. Ainsi nous pouvons dégager deux grandes familles de systèmes d'équations à résoudre pour ces deux catégories de niveaux de finesse.

Il faut aussi noter, que pour les niveaux de finesse grossiers et intermédiaires, les équations des modèles sont essentiellement algébriques et différentielles ordinaires alors que pour les niveaux fins et très fins, il s'agit de résoudre des systèmes d'équations aux dérivées partielles. Finalement, les modèles peuvent être regroupées selon la finesse recherchée soit

1. Grossiers et intermédiaires (Nodales).
2. Fins et très fins (EDPs).

### 2.3.1 Méthodes CFD

On entend par méthodes CFD, les méthodes souvent utilisées pour la discrétisation des équations aux dérivées partielles. On y trouve, les différences finis, les volumes finis et les éléments finis [[Decrensefond et Maruani, 2005](#)].

#### 2.3.1.1 Différences finies

La méthode des différences finies consiste à discrétiser chaque variable du domaine à étudier en un certain nombre de points. Elle est utilisée pour modéliser la conduction thermique dans un solide. La méthode aux différences finies utilise deux types de schémas : le schéma explicite et le schéma implicite.

Le schéma explicite offre l'avantage de donner la valeur de la variable recherchée en une seule opération, mais qui implique le choix d'un pas de temps en fonction du pas de discrétisation spatiale.

Le schéma implicite quand à lui est inconditionnellement stable, mais il nécessite l'inversion d'une matrice pour la résolution du système. Cette opération est plus longue et plus coûteuse en terme de stockage et du temps de calcul.

### 2.3.1.2 Volumes finis

La méthode des volumes finis est souvent utilisée pour résoudre les problèmes de transfert aux interfaces des systèmes composés comme c'est le cas de la PàC. Cependant, et contrairement à la méthode des différences finies qui utilise des approximations de dérivées, la méthode des volumes finis utilise des approximations d'intégrales comme la méthode des éléments finis. Ces intégrales de volume sont transformées en intégrales de surface en utilisant le théorème de flux-divergence. Les termes de flux sont ensuite évalués aux interfaces entre les volumes finis. On utilise une fonction de flux numérique pour faire une approximation des flux aux interfaces. Comme le flux entrant dans un volume donné est égal au flux sortant du volume adjacent, ces méthodes sont dites conservatives.

### 2.3.1.3 Eléments finis

La méthode des éléments finis est basé sur la discrétisation du domaine étudié en éléments simples sur lesquels on écrit l'équation de la chaleur sous une formulation faible au sens des éléments finis. L'ensemble des équations élémentaires donne le système suivant

$$[K]T + [c_p] \frac{\partial T}{\partial t} = F \quad (2.20)$$

où  $[k]$  et  $[c_p]$  sont respectivement les matrices de raideur et de capacité thermique du système,  $F$  le vecteur des sources et  $T$  celui des températures.

La résolution du système donne la température de chaque élément. La solution est d'autant plus précise que le maillage du domaine est fin, mais cela se ferait au détriment du temps de calcul puisque les matrices seront plus grandes.

## 2.3.2 Méthode nodale

Au cours de ces dernières décennies, un nombre important d'outils de simulation thermique et aéraulique a été développé pour les domaines aussi bien dans l'industrie que dans le milieu universitaire. L'approche nodale est l'un de ces outils.

Le concept nodal repose sur la possibilité de décrire un processus physique par un système d'équations différentielles temporelles liant les grandeurs d'état du problème tout en supprimant toutes les dérivés spatiales. C'est une méthode de discrétisation globale qui traduit le comportement d'un système physique par des résistances équivalentes.

Une mise en équation devient facile et très efficace lorsque face à un problème de grande taille on fait appel aux calculateurs. Le système ainsi écrit facilite la description

des phénomènes thermiques grâce à la matrice de conductance  $G$  qui regroupe toutes les informations sur le transfert thermique, allant des conductances (de conduction, de convection,...) aux capacités thermiques qui sont stockées dans une matrice  $C$ .

Le principe nodal consiste à découper le système physique en un certain nombre de nœuds supposés isothermes, de volumes  $V_i$  et de températures  $T_i$ . La capacité thermique de valeur  $C_i = \rho_i c p_i V_i$  est affectée au centre du nœud  $i$  du volume considéré.  $\rho_i$  et  $c p_i$  sont respectivement la masse volumique et la chaleur massique du nœud considéré.

Un nœud peut échanger de l'énergie avec l'ensemble des nœuds  $j$  représentant son environnement soit par conduction, soit par convection, ou encore par radiation. L'analyse de ces échanges conduit à installer entre ces nœuds des connections que l'on désigne par conducteurs thermiques appelées conductances. Un nœud peut être doté d'une source de chaleur  $P_i$  représentant un apport d'énergie supplémentaire dans le volume  $V_i$  (FIGURE 2.3).

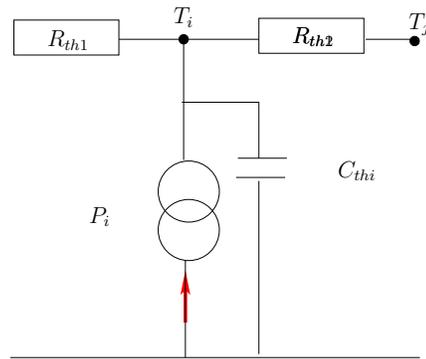


FIGURE 2.3 – Méthode nodale.

Cependant, dans le cadre de l'analogie entre les grandeurs thermiques et les grandeurs électriques, résumée par le tableau (TABLE 2.1), on peut en tirer la relation de la conductance thermique en utilisant la loi d'Ohm (Eq. (2.21)).

<i>Thermique</i>	<i>Electrique</i>	
$\Phi = G \Delta T$	$I = G \Delta V$	(2.21)

Notons par ailleurs, que comme le système physique à étudier est généralement non homogène, l'échange thermique entre deux milieux différents est assuré à l'aide d'un nœud, ne possédant pas de capacité thermique, et qui est placé à l'interface de ces deux milieux [Dumercy *et al.*, 2003, Dumercy, 2004].

Il est important de noter qu'une autre façon de modéliser l'échange thermique entre

deux milieux différents, consiste à utiliser une résistance thermique équivalente. Cette résistance représente deux phénomènes thermiques en parallèle.

En résumé, la méthode nodale permet d'obtenir

- 1- Un bilan énergétique assuré.
- 2- Un sens de l'écoulement de chaleur observé.

La méthode nodale sera décrite plus en détail dans le troisième chapitre.

## 2.4 Problème de couplage

L'étude thermique d'une pile à combustible vise à analyser les interactions entre un milieu solide qui représente les cellules et les plaques bipolaires, et un milieu fluide qui représente les canaux des gaz d'alimentation et le circuit de refroidissement. Plus précisément nous nous sommes intéressés au couplage thermique entre ces deux milieux.

Généralement, on considère deux domaines de calculs, le milieu fluide et le milieu solide. Dans le milieu fluide on résout les équations de Navier-Stokes en régime permanent et dans le milieu solide, on résout l'équation de la chaleur en régime stationnaire.

Pour effectuer un calcul couplé on fait communiquer les deux milieux à travers une ou plusieurs surfaces communes qui représente l'interface de couplage. Le principe réside donc en un calcul simultané de deux codes avec des échanges réguliers d'informations ou plus précisément de quantités physiques sur l'interface de couplage. Dans le cadre du couplage thermique, le fluide transmet un flux de chaleur au solide et reçoit une température de la part de celui-ci. Après un certain nombre d'échanges successifs on atteint un état stationnaire couplé dans lequel le système et les quantités échangées deviennent constantes.

TABLE 2.1 – Analogie grandeurs électriques-grandeurs thermiques.

Grandeur thermique	Grandeur électrique
Flux	Courant électrique
Température	Potentiel
Conductance	Conductance
Capacité	Capacité
Flux imposé	générateur de courant
Température imposée	générateur de tension

FIGURE 2.4 explique le mécanisme d'un calcul couplé du point de vue thermique stationnaire. En effet chaque code évolue de façon indépendante en effectuant un certain nombre d'itérations ( $N_f$  pour le fluide et  $N_s$  pour le solide). A une itération donnée que l'on appelle itération de couplage ou d'échange  $n + 1$ , le fluide envoie un flux de chaleur  $q_{n+1}$  au solide et reçoit en retour une température pariétale  $T_{n+1}$ . A partir de là chacun des codes utilise la quantité reçue comme condition aux limites sur l'interface de couplage et un nouveau processus itératif débute jusqu'à l'échange suivant et ainsi de suite. L'état stationnaire du système global est atteint lorsque les quantités échangées cessent d'évoluer entre deux itérations successives  $n$  et  $n + 1$ , on obtient ainsi la convergence du processus itératif.

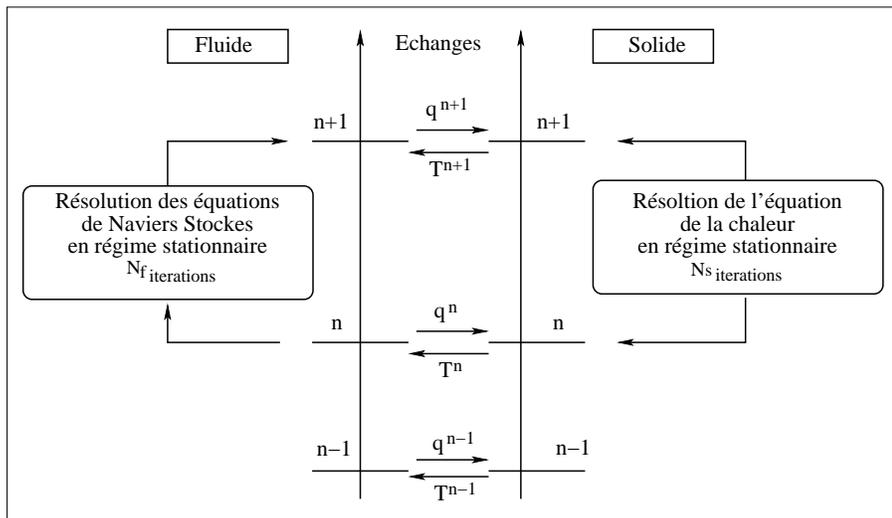


FIGURE 2.4 – Couplage Flux/Température [Montenay, 2000].

Cependant, ce type de couplage s'avère instable car le solide et le fluide évoluent de façon différente. En effet, si le fluide évolue trop rapidement, le solide reçoit à chaque itération de couplage des flux importants qui risquent de le déstabiliser. A partir de là, le calcul couplé devient globalement instable. Des méthodes de relaxation sont proposées pour y remédier à ce problème [Montenay, 2000].

Il est à noter qu'un autre moyen de couplage thermique est utilisé. Il s'agit de mettre en oeuvre un couplage de codes de calcul scientifique. On fait alors appel au calcul parallèle [Chemin *et al.*, 2003].

Par ailleurs, il est important de noter que dans ce travail, nous présentons l'approche nodale comme une alternative aux problèmes de couplage thermiques. Grâce à la notion de conductance thermique équivalente, nous pouvons décrire d'une façon pertinente le

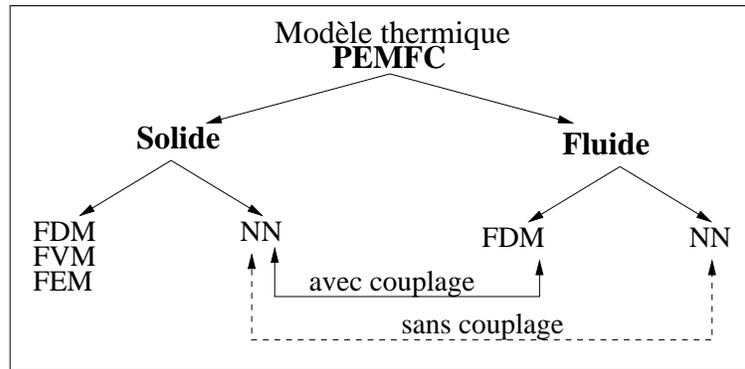


FIGURE 2.5 – Modélisation thermique de la PàC par l'approche nodale.

phénomène thermique de la PàC sans avoir recours à un couplage de modèles (voir [FIGURE 2.5](#)).

Notons aussi que le principe de la conductance thermique équivalente est un moyen efficace, comme nous allons le montrer dans le chapitre 5, afin d'éviter ce genre de couplage entre différents codes ([FIGURE 2.6](#)).

En outre, dans la méthode nodale, si le calcul de la résistance de conduction est aisé, ce n'est cependant pas le cas de la résistance de convection. En effet, la résistance de conduction dépend que de la géométrie et de la structure du matériau, tandis que celle de la convection est assujéti à de nombreuses hypothèses liées au calcul du coefficient de convection. Cependant, dans la littérature on dispose de tables contenant les coefficients d'échange par convection pour les différentes géométries et régimes d'écoulement.

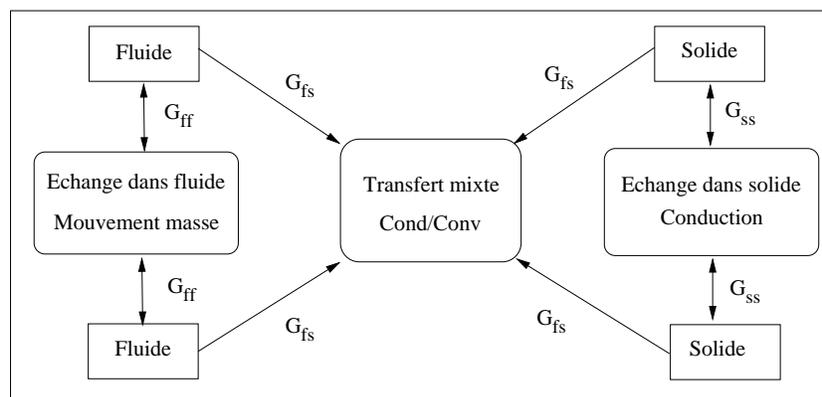


FIGURE 2.6 – Model Nodal.

## 2.5 Conclusion

Nous avons présenté dans ce chapitre les différentes approches de la modélisation thermique d'une PàC. La méthode des différences finies pénalisée par un maillage homogène n'est pas approprié à ce genre d'étude dès lors que l'on s'intéresse à la localisation des endroits les plus chauds de la cellule. Cependant, la discrétisation par volumes finis, devient plus complexe dans le cas d'un système hétérogène où on dispose pas de données sur les coefficients d'échanges aux interfaces entre le gaz et la cellule par exemple. Par ailleurs, la méthode des éléments finis s'avère plus représentative dans le cas des problèmes 3D. Néanmoins, elle peut présenter l'inconvénient de la taille de l'élément de volume, donc coût des temps des calculs. La parallélisation de tels modèles peut s'avérer plus complexe. Par ailleurs, il n'est pas aisé de décrire à travers cette méthode le phénomène recouvrement des nœuds pour tenir en compte de présence simultanée de la conduction et la convection thermique en même temps, deux phénomènes thermiques qui caractérisent la PàC.

Notons également que la raison pour laquelle nous avons opté pour l'approche nodale est double. D'une part, elle nous permet de représenter d'une façon fidèle les phénomènes thermiques notamment la production volumique de la chaleur au niveau des électrodes. D'autre part, cette approche est facilement parallélisable et donne des temps de calcul moins importants que ceux obtenus avec les méthodes CFD comme nous allons le montrer dans le chapitre 5 de ce mémoire.

Dans le chapitre suivant, nous développerons en détail le modèle thermique nodal de la PEMFC. Nous donnerons ainsi la formulation mathématique servant à la simulation des deux parties solide et fluide du stack de la PàC.

# Chapitre 3

## Modèle nodal pour une pile à combustible

### 3.1 Introduction

Pour la modélisation globale d'un stack d'une PàC, une approche simpliste consiste à concatener des modèles unitaires pour chaque cellule. Cependant, en réalité les cellules n'ont pas un comportement similaire. Il faudrait donc définir les paramètres qui changent d'une cellule à une autre. Une modélisation systématique du stack incluant l'ensemble des cellules permet d'identifier ces paramètres. En effet, comme la tension de sortie d'une cellule est liée directement à la température de fonctionnement, le modèle thermique de la PàC doit inclure toutes les cellules du stack.

Dans ce chapitre, nous présenterons un modèle décrivant le comportement thermique de cellule de nature tri-dimensionnel et une procédure de généralisation de la méthode nodale qui permet d'optimiser les coûts de calcul sans passer par un couplage entre deux types de modélisation différents.

### 3.2 Objectif de l'étude

L'objectif de ce travail de modélisation du comportement thermique, est d'établir un modèle suffisamment simple et permettant de décrire le comportement thermique lors du fonctionnement de la PàC dans des conditions d'opérations différentes, pour des configurations différentes et au prix d'un temps de calcul relativement court [Salah *et al.*, 2006].

De nombreuses approches de modélisation ont été adoptées en vue de décrire les

transferts thermiques et de parvenir à une estimation satisfaisante de la température de fonctionnement de la PàC. Les méthodes fondées sur l'utilisation des équations aux dérivées partielles conduisent à une cartographie détaillée des températures en tout point du système étudié. Les méthodes basées sur la représentation par équivalence électrique focalisent sur des points comme c'est le cas de la méthode nodale.

Le but principal dans ce chapitre est de montrer que partant d'une approche nodale simple appliquée à l'échelle microscopique, on parvient à décrire le comportement thermique de la PàC. Les résultats de la simulation sont similaires à ceux obtenus à partir des équations aux dérivées partielles. Cependant, les temps de calcul sont réduits. Ceci est rendu possible grâce à un découpage de la PàC qui prend en considération à la fois la géométrie de celle-ci et le type d'échange thermique entre la partie solide de la pile que représente les cellules et les plaques bipolaires, et la partie fluide représentée par les canaux des gaz d'alimentation et le circuit de refroidissement. En effet, la notion de conductance thermique équivalente entre deux types d'échanges différents nous dispense de résoudre deux types d'équations comme c'est le cas lors de l'utilisation des équations aux dérivées partielles.

### **3.3 Système considéré**

Dans ce chapitre, nous appliquerons la technique nodale pour la modélisation du phénomène thermique au sein d'un stack composée de plusieurs cellules assemblées en série, représentant une PàC fonctionnant avec de l'hydrogène et de l'air.

Rappelons que le stack d'une PàC est composé d'un empilement de cellules et que chaque cellule comporte une MEA (Membrane Electrode Assembly) et un circuit de gaz d'alimentation (c'est-à-dire hydrogène et air). Un échangeur de chaleur à eau est placé entre deux cellules.

### **3.4 Formulation mathématique du problème thermique**

L'approche nodale est inspirée de l'analogie électrique/thermique. Elle consiste à diviser la cellule de la PàC en plusieurs volumes, dans lesquels on suppose que la température est homogène. Ensuite ces éléments de volumes sont connectés entre eux par des conductances dont l'expression dépendra de la nature de l'échange thermique. Chaque volume est représenté par un nœud placé en son centre. Sa capacité thermique  $C$  est

donnée par l'expression suivante

$$C = \rho c p V \quad (3.1)$$

Ainsi en appliquant un bilan thermique à chaque nœud nous obtenons l'écriture généralisé suivante

$$\underbrace{C_i \frac{dT_i}{dt}}_{\text{Accumulation}} = \underbrace{\sum_j G_{ij}^{cond} (T_j - T_i)}_{\text{Conduction}} + \underbrace{\sum_j G_{ij}^{conv} (T_j - T_f)}_{\text{Convection}} + \underbrace{G_{ij}^{ref} (T_i - T_{ref})}_{\text{Conditions aux limites}} + \underbrace{P_i}_{\text{Terme source}} \quad (3.2)$$

## 3.5 Modèle nodal global

### 3.5.1 Description du modèle

Rappelons que la PàC est constituée d'un empilement de cellules et que chaque cellule contient deux électrodes (c'est-à-dire anode et cathode) et une membrane. Les électrons libérés par la réaction d'oxydation de l'hydrogène sont collectés à l'aide d'une plaque bipolaire. Ces plaques servent aussi de séparation entre les cellules. Elles contiennent les canaux des gaz d'alimentations et parfois des canaux d'eau de refroidissement.

Le transfert thermique dans les plaques bipolaires est représenté par la conduction et la convection. Cependant, un nœud du réseau nodal appartenant au canal (c'est-à-dire nœud fluide) échange avec un nœud de la plaque bipolaire de la chaleur par convection. Par une conductance de type mouvement de fluide, de la chaleur est échangée entre deux nœuds du canal. Par ailleurs, la conduction thermique prend effet d'une part, entre les électrodes et la membrane et d'autre part, entre les électrodes et les plaques bipolaires. Les nœuds de la zone réactive de la cellule reçoivent la chaleur produite par les réactions exothermiques aux électrodes et notamment la chaleur de la sorption/désorption de l'eau à l'interface membrane/électrodes (voir [FIGURE 3.1](#)). Cette chaleur produite représente le terme source qui est affecté à chaque nœud de la zone réactive de la cellule.

Plus précisément, l'échange de chaleur entre deux nœuds voisins (c'est-à-dire solide-solide, fluide-fluide et solide-fluide) est donné par une conductance thermique. Les conditions aux limites sont décrites par une conductance de référence. Cette conductance représente le couplage thermique de conduction-convection entre la partie solide et la partie

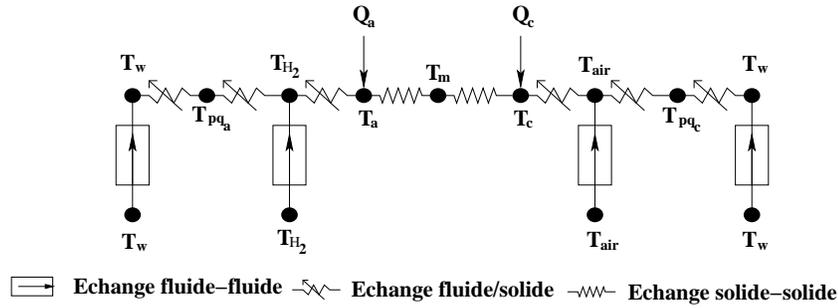


FIGURE 3.1 – Circuit analogie thermique/électrique d’une cellule PEMFC incluant les gaz d’alimentations et le circuit eau.

fluide de la pile.

Il est important de noter que l’échange thermique entre les différents nœuds du réseau nodal (c’est-à-dire solide-solide, fluide-fluide et solide-fluide) est décrit par le système linéaire (3.3)

$$C \frac{dT}{dt} = GT + B \quad (3.3)$$

Il est dès lors possible de déterminer le champ des températures dans la PàC en effectuant une seule opération, inverser la matrice  $G$  par exemple.  $T$  est le vecteur températures,  $G$  est la matrice des conductances,  $C$  la matrice diagonale des capacités thermiques et  $B$  représente le vecteur des termes sources ainsi que les conductances de référence donnant les conditions aux limites.

Par ailleurs, il convient de préciser qu’une récente étude sur le comportement thermique de la PàC a fait l’objet de l’utilisation de l’approche nodale [Dumercy, 2004]. Cependant, cette approche a été couplée avec une autre technique de discrétisation par différences finis. Plus précisément, la partie gaz dans le poreux de la cellule a été traitée par la discrétisation des équations par les différences finis. Pour la partie solide et circuit de refroidissement, les auteurs ont appliqué l’approche nodale.

Il est important de noter que ce type de couplage entre deux approches de modélisation présente l’inconvénient de ralentir les calculs et en particulier pour les problèmes de grandes tailles. En effet, la nature de convergence des algorithmes ne sont pas similaires. Le choix d’une seule stratégie de modélisation, la méthode nodale par exemple, peut s’avérer pertinent

Dans l’approche nodale, un nœud  $i$  du réseau, et quelque soit sa position, peut échanger de la chaleur avec un autre nœud  $j$  pas forcément de même nature (c’est-à-

dire solide-fluide) grâce à une conductance qui exprime la nature du transfert (FIGURE 3.2). Ainsi, le recours aux équations aux dérivées partielles pour exprimer le couplage hétérogène (c'est-à-dire solide-fluide) est évité.

En effet, la conductance fluide représente un caractère particulier lié à la nature même de l'écoulement, lequel impose un sens au mouvement du fluide, et donc au transfert calorifique [Saulnier, 1980, Bastos, 1988, Kilindjian, 1998].

L'apport quantifié par  $\dot{m} cp T_1$ , en provenance du nœud amont est compensé par l'apport, exprimé par  $\dot{m} cp T_2$ , vers l'aval (voir FIGURE 3.3).

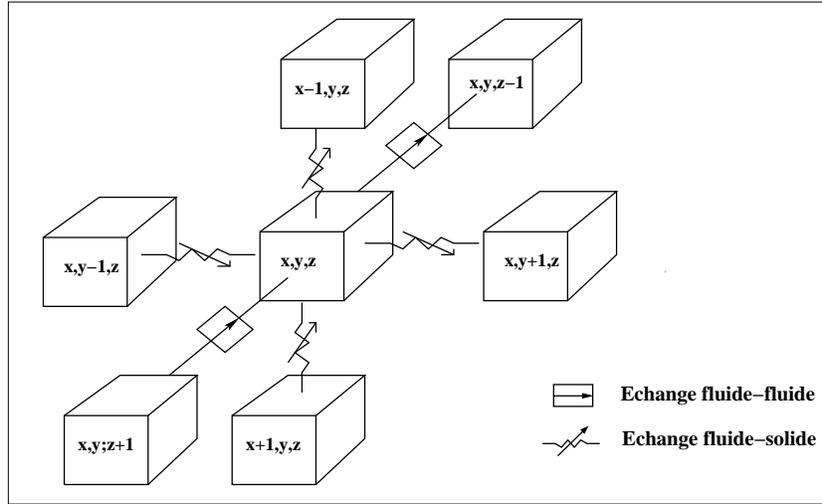


FIGURE 3.2 – Echange entre un nœud  $(x,y,z)$  et ses voisins.

Par ailleurs, le couplage entre les nœuds en présence d'écoulement ne prend en considération dans l'écriture du bilan que les nœuds amont soit

$$\rho cpSL\dot{T}_2 = \dot{m}cp(T_1 - T_2) + hS(T_t - T_1) \quad (3.4)$$

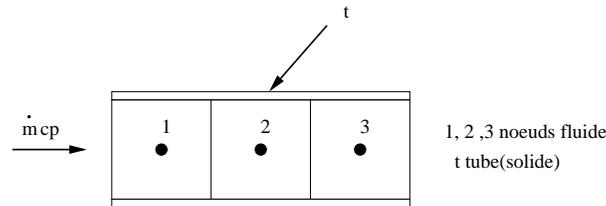


FIGURE 3.3 – Écoulement dans un tube.

Lors d'une modélisation nodale, la conservation de l'énergie est assumée être égale à la contribution des différents échanges entre les nœuds et la production interne de chaque

nœud. La variation de la températures en chaque nœud  $i$  est alors exprimée par le système d'équation linéaire suivant

$$C\dot{T} = (G^{solide} + G^{fluide})T + B \quad (3.5)$$

La matrice  $G^{solide}$  et  $G^{fluide}$  désignent respectivement l'échange thermique dans la partie solide et la partie fluide de la PàC. A partir de maintenant, on utilise  $G_{ij}$  ( $i \in 1\dots n$  et  $j \in 1\dots n$ ) pour définir les éléments de la matrice  $G$  à la  $i^{em}$  ligne et  $j^{em}$  colonne.  $G_{ij}$  représente la conductance thermique entre un nœuds  $i$  et ses voisins  $j$ .

Pour définir les valeurs  $G_{ij}$  de la matrice  $G$ , on utilise l'équation donnant le bilan thermique de la PàC et, on distingue deux cas selon la nature du matériau de la pile à combustible.

- Pour les nœuds appartenant à la partie solide de la PàC (c'est-à-dire MEA et plaques) on obtient

$$G_{ij}^{solide} = \begin{cases} -\sum_j (G_{ij}^{cond} + G_{ij}^{conv} + G_{ij}^{ref}) & \text{si } i=j \\ \sum_j (G_{ij}^{cond} + G_{ij}^{conv}) & \text{si } i \neq j. \end{cases} \quad (3.6)$$

- Pour les nœuds appartenant à la partie fluide de la PàC (c'est-à-dire canal fluide), on obtient

$$G_{ij}^{fluide} = \begin{cases} -G_{ij}^f & \text{si } i=j \\ G_{ij}^f - \sum_j G_{ij}^{conv} & \text{si } i \neq j. \end{cases} \quad (3.7)$$

L'échange de chaleur par conduction est représenté par la matrice de conductance  $G^{cond}$  (c'est-à-dire, solide-solide). On note par  $G^{conv}$  (c'est-à-dire, solide-fluide) la matrice de conductance par échange convectif et par  $G^f$  (fluide-fluide) la matrice de conductance résultante du mouvement du fluide (mouvement air, Hydrogène, eau, etc.).

Le vecteur  $B$  est exprimé pour les parties solide et fluide comme suit

$$B = \begin{cases} \sum_j G_{ij}^{amb} T_j^{amb} + P_i & \text{pour la partie solide} \\ G_{ref}^f T_f^{amb} & \text{pour la partie fluide.} \end{cases} \quad (3.8)$$

$P_i$  représente le terme source de la cellule.  $C$  est une matrice diagonale des capacités thermiques de chaque élément de nœud (c'est-à-dire solide ou fluide) donnée par

$$C_i = \rho_i c p_i V_i \quad (3.9)$$

où  $\rho_i$  est la densité du matériau,  $c p_i$  sa chaleur spécifique et  $V_i$  son volume.

Par ailleurs, étant donné que la PàC est un système non homogène composé d'une partie solide représentant la cellule elle-même, et une partie fluide qui représente les canaux des gaz d'alimentation ainsi que le circuit de refroidissement, l'équation (2.5) s'écrira de deux façons différentes pour chaque partie solide et fluide.

### 3.5.2 Bilan sur le solide

En appliquant l'équation (2.5) sur la partie solide de la PàC, nous obtenons

$$C_i \frac{dT_i}{dt} = - \left( G_d^{cond} + G_d^{conv} + G_d^{ref} \right) T_i + \sum_j \left( G_d^{cond} + G_d^{conv} \right) T_j + P_i + G_d^{ref} T_{ref}^{solid} \quad (3.10)$$

où l'indice  $d$  donne le sens de l'échange (c'est-à-dire  $i, i, k$ ).

La discrétisation par rapport au temps de cette équation avec un schéma explicite stable, nous donne

$$\begin{aligned} C_{i,j,k}^s \frac{T_{i,j,k}^{n+\Delta t} - T_{i,j,k}^n}{\Delta t} &= - \left( G_d^{cond} + G_d^{conv} + G_d^{ref} \right) T_i^n + \left( G_d^{cond} + G_d^{conv} \right) T_{i-1,j,k}^n \\ &+ \left( G_d^{cond} + G_d^{conv} \right) T_{i+1,j,k}^n + \left( G_d^{cond} + G_d^{conv} \right) T_{i,j-1,k}^n \\ &+ \left( G_d^{cond} + G_d^{conv} \right) T_{i+1,j,k}^n + \left( G_d^{cond} + G_d^{conv} \right) T_{i,j+1,k}^n \\ &+ \left( G_d^{cond} + G_d^{conv} \right) T_{i,j,k-1}^n + \left( G_d^{cond} + G_d^{conv} \right) T_{i,j,k+1}^n \\ &+ G_d^{ref} T_{ref}^{solid} + P_{i,j,k} \end{aligned} \quad (3.11)$$

### 3.5.3 Bilan sur le fluide

Les conductances relatives aux nœuds de la partie fluide dans les canaux de circulation des gaz sont évaluées en assumant que pour un nœud quelconque du canal (FIGURE 3.4), le débit entrant est égal au débit sortant. Ainsi nous appliquons la règle suivante

pour la détermination de l'expression de la conductance du nœud  $(i, j, k)$

$$G^{fluide}(i, j, k) = G^{fluide}(i + 1, j, k) + G^{fluide}(i, j + 1, k) + G^{fluide}(i, j, k + 1) - G^{fluide}(i, j - 1, k) - G^{fluide}(i, j, k - 1) \quad (3.12)$$

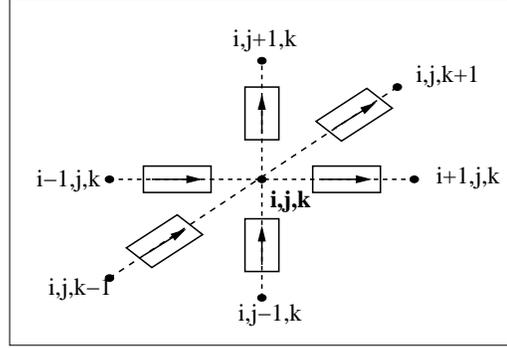


FIGURE 3.4 – Schéma des conductances fluides pour le nœud  $(i,j,k)$ .

Par ailleurs, on distingue les deux cas suivants

1. Pour les nœuds n'ayant pas de voisins avec la partie solide, on obtient

$$T_{i,j,k}^{n+1} = \left[ 1 - \frac{\Delta t}{C_{i,j,k}} (\dot{m}_{f_x} + \dot{m}_{f_y} + \dot{m}_{f_z}) \right] T_{i,j,k}^n + \frac{\Delta t}{C_{i,j,k}} \dot{m}_{f_y} cp_f T_{i+1,j,k}^n + \frac{\Delta t}{C_{i,j,k}} \dot{m}_{f_x} cp_f T_{i,j-1,k}^n + \frac{\Delta t}{C_{i,j,k}} \dot{m}_{f_z} cp_f T_{i,j,k-1}^n \quad (3.13)$$

2. Pour les nœuds ayant des voisins avec la partie solide, on distingue de nouveau deux cas.

a - La température des nœuds situant au milieu du canal est calculée par la relation suivante

$$T_{i,j,k}^{n+1} = \left[ 1 - \frac{\Delta t}{C_{i,j,k}} \dot{m}_{f_x} \right] T_{i,j,k}^n + \left[ G_{d_x}^{conv} T_{i+1,j,k}^n + G_{d_y}^{conv} T_{i,j-1,k}^n \right] \frac{\Delta t}{C_{i,j,k}} + \left[ \dot{m}_{f_x} - (G_{d_x}^{conv} + G_{d_y}^{conv}) \right] \frac{\Delta t}{C_{i,j,k}} T_{ref}^f \quad (3.14)$$

b - La température des nœuds situés au coin haut et coin bas du canal est calculée par la relation suivante

$$\begin{aligned}
 T_{i,j,k}^{n+1} &= \left[ 1 - \frac{\Delta t}{C_{i,j,k}} (\dot{m}_{f_x} + \dot{m}_{f_y} + \dot{m}_{f_z}) \right] T_{i,j,k}^n + \dot{m}_z \frac{\Delta t}{C_{i,j,k}} T_{i,j,k-1} \\
 &+ (G_{d_y}^{conv} + \dot{m}_y) \frac{\Delta t}{C_{i,j,k}} T_{i+1,j,k}^n - (G_{d_y}^{conv} + G^{ref}) \frac{\Delta t}{C_{i,j,k}} T_{i-1,j,k}^n \\
 &+ (\dot{m}_{f_x} - G_{d_x}^{conv}) \frac{\Delta t}{C_{i,j,k}} T_{i,j-1,k}^n + (G_{d_x}^{conv} - G^{ref}) \frac{\Delta t}{C_{i,j,k}} T_{i,j+1,k}^n \\
 &+ 2 G^{ref} \frac{\Delta t}{C_{i,j,k}} T_{ref}^f
 \end{aligned} \tag{3.15}$$

Les expressions des conductances  $G_{d_x}$ ,  $G_{d_y}$  et  $G_{d_z}$ , sont données par les relations suivantes

$$\begin{aligned}
 G_{d_x} &= H_{gaz} \times Y \times Z \\
 G_{d_y} &= H_{gaz} \times X \times Z \\
 G_{d_z} &= H_{gaz} \times X \times Y
 \end{aligned} \tag{3.16}$$

Notons que le problème de couplage entre le champ thermique et le champ dynamique a été traité par l'établissement d'un réseau de conductances dépendantes du champ de températures pariétales. Ainsi, à chaque pas de simulation, la température calculée sert à l'expression de la nouvelle masse du fluide du volume (nœud) isotherme.

### 3.5.4 Calcul des conductances

Les conductances  $G_d$  traduisent l'échange de chaleur entre les différents élément du système physique étudié. Plusieurs cas peuvent se présenter quand au calcul de chacune de ces conductances. La conductance conductive peut être considérée comme constante lorsque le domaine de variation de la température est faible. En revanche la conductance convective dépendra de l'écoulement du fluide lui même.

On distingue donc deux types de conductances : les conductances de conduction et les conductances dues à l'écoulement du fluide. Si celles-ci sont placées en parallèle, la conductance équivalente est la somme de toutes ces conductances. En revanche, la conductance équivalente de deux conductances placées en série est obtenue en faisant le produit des conductances.

Les conductances sont associées respectivement en série ou en parallèle selon que le milieu est homogène ou hétérogène.

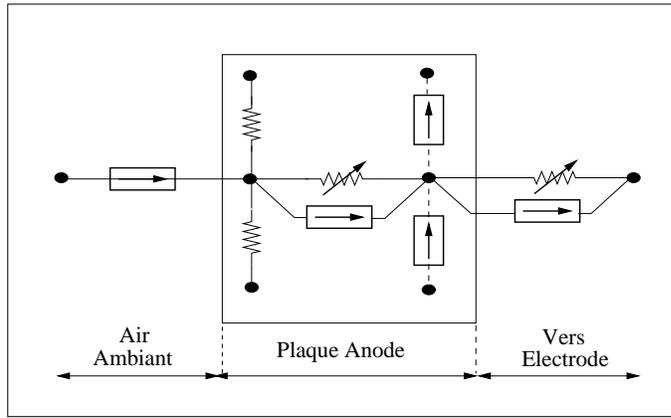


FIGURE 3.5 – Réseau nodal pour un niveau donné.

### 3.5.4.1 Les électrodes

Dans les électrodes, la chaleur est transportée par conduction, et elle dépend de la conductivité thermique du milieu. Deux cas peuvent se présenter.

1. **Milieu homogène.** La conductance prend la forme suivante

$$G_d^{cond} = \frac{k S_d}{D_d} \quad (3.17)$$

2. **Milieu hétérogène.** Le transfert est représenté par une conductance équivalente désignant deux phénomènes en série, soit

$$G_d^{cond} = G_{d1}^{cond} + G_{d2}^{cond} \quad (3.18)$$

ou encore

$$G_d^{cond} = \frac{2k_{d1}k_{d2}}{k_{d1}d_2 + k_{d2}d_1} S_d \quad (3.19)$$

### 3.5.4.2 Les canaux des gaz

Dans les canaux des gaz on observe également deux types de transfert : une convection résultant du mouvement des fluides et une convection pure décrite par la loi de Newton.

- Entre la partie solide de la PàC (électrodes) et la partie fluide (Hydrogène, air et eau), on prend en considération le phénomène de conduction. Celui-ci est pris en compte dans la méthode nodale par la notion de conductance convective. Elle

met en jeu le coefficient d'échange  $H$  et la surface de contact paroi-fluide  $S$  selon la relation

$$G_d^{conv} = H_d^{fluide} S_d \quad (3.20)$$

- De la chaleur est aussi transmise suite au mouvement des gaz dans les canaux et de l'eau dans l'échangeur de chaleur. La conductance associé  $G_d^{diff}$  à ce type de transfert est donnée par

$$G_d^{diff} = \dot{m}c_p \quad (3.21)$$

### 3.5.5 Calcul des débits

#### 3.5.5.1 Débit du gaz

Pour le calcul des débits des fluides (c'est-à-dire gaz et eau de refroidissement), il est assumé que leur variation est indépendante de la dimension de la conduite, il vient alors que  $\dot{m}_x = \dot{m}_y = \dot{m}_z$ . Cette hypothèse est réaliste quand les pertes dans les canaux en régime d'écoulement laminaire sont négligées. Ces débits sont calculés par la relation suivante

$$\dot{m}_x = \dot{m}_y = \dot{m}_z = \dot{m}_f \frac{V_{nud}}{V_{canal}} \quad (3.22)$$

Il convient de préciser que le flux (débit) des gaz est une fonction du courant débité par la PàC. Ce flux est imposé par un contrôleur de débit. On peut par exemple avoir la configuration utilisant un automate programmable. Ce dernier gère les consignes et mesures les facteurs d'utilisations ( $ut_{air}, ut_{H_2}$ ) pour fixer les débits d'air et d'hydrogène. Ces flux sont donnés, selon la nature du canal, par la relation suivante

1. **Anode.** Le flux d'hydrogène est exprimé par la relation suivante

$$\dot{m}_{H_2}^{total} = \frac{M_{H_2} 10^{-3}}{2F} ut_{H_2} I \quad (3.23)$$

2. **Cathode.** Le flux d'oxygène est donné par

$$\dot{m}_{air}^{total} = \frac{M_{air} 10^{-3}}{4F} \frac{ut_{air}}{x_{o_2}} I \quad (3.24)$$

En outre, si on suppose la présence d'un humidificateur, au moment de la saturation des gaz en eau, la relation donnant le flux molaire des gaz en fonction de son humidité est

$$q_v = \phi_f \frac{P_{sat}}{P_f} q_f \quad (3.25)$$

où  $q_v$  et  $q_f$  désignent respectivement les flux volumique et massique du fluide.

Par ailleurs, la conservation des flux molaires permet d'écrire

$$q_v^{total} = q_f + q_v \quad (3.26)$$

Ainsi, en introduisant le débit de vapeur d'humidification de l'anode on a

$$\dot{m}_{H_2} = \left( \phi_a \frac{P_{sat}}{P_a} \frac{M_{H_2}}{M_{H_2O}} + 1 \right) \dot{m}_{H_2}^{total} \quad (3.27)$$

Et en introduisant le débit de vapeur d'humidification de la cathode on obtient

$$\dot{m}_{air} = \left( \phi_c \frac{P_{sat}}{P_c} \frac{M_{air}}{M_{H_2O}} + 1 \right) \dot{m}_{air}^{total} \quad (3.28)$$

Il est à noter qu'afin de suivre l'évolution des débits avec les variations de températures, il convient d'abord de calculer les débits des gaz à partir des relations données par les équations (3.27) et (3.28). Puis, et à partir de la deuxième itération, nous calculons les nouvelles masses d'hydrogène et d'air en appliquant la loi des gaz parfaits, soit

$$\dot{m}_f = \frac{PM}{R} \frac{Sv}{T} \quad (3.29)$$

où  $v$  représente la vitesse du fluide supposée constante et invariante selon les trois directions.

### 3.5.5.2 Débit d'eau de refroidissement

Afin de refroidir la cellule de la PàC, il est important d'intégrer un circuit de refroidissement. Pour ce faire, une quantité d'eau circule dans les canaux. Le débit de cette eau est obtenu par la formule suivante

$$\dot{m}_{eau} = \rho_{eau} S_{eau} v_{eau} \quad (3.30)$$

La vitesse  $v$  d'eau est calculée à partir du nombre de Reynolds, soit

$$v = \frac{Re\nu_{eau}}{D_h} \quad (3.31)$$

où  $D_h$  représente le diamètre hydraulique de la conduite du canal d'eau et il est donné par

$$D_h = \frac{4S}{p} \quad (3.32)$$

avec  $S$  est la section de la conduite, et  $p$  le périmètre mouillé. Le nombre de Reynolds est obtenu par corrélation, pour un écoulement laminaire dans une conduite, soit

$$Re = \left( \frac{Nu_{eau}}{0.023Pr^{0.4}} \right)^{\frac{1}{0.8}} \quad (3.33)$$

$Pr$  est un nombre adimensionnel, il est donné par l'expression suivante

$$Pr = \frac{\nu_{eau}c_{p_{eau}}}{k_{eau}} \quad (3.34)$$

où  $\nu_{eau}$  est la viscosité dynamique de l'eau.

### 3.5.6 Conditions aux limites

Lors de la mise en place du réseau nodal, il est nécessaire de tenir compte des conditions aux limites pour la fermeture du problème thermique de la PàC. Celles-ci sont des grandeurs intensives, appelées conditions aux limites de Dirichlet, soit des grandeurs extensives comme c'est le cas des conditions aux limites de Neumann [Saulnier, 1980].

Cependant, comme la PàC opère dans les conditions d'ambiances, on impose une température aux nœuds situés sur les frontières du réseau nodal. La condition aux limites de Dirichlet est donc représenté par une conductance de référence notée  $G_d^{ref}$ .

On note respectivement par  $S^{ref}$  et  $D_d$  la surface et la distance commune entre un nœud de la PàC et un nœud appartenant au volume l'entourant, dans lequel la température ambiante est supposée homogène. Les conductances de référence concernant les nœuds appartenant à ce volume représentent les conditions aux limites. Elles sont représentées suivant chaque direction  $d$  par l'expression suivante

$$G_d^{ref} = \frac{2k_d H_d S_d}{2k_d + H_d D_d} \quad (3.35)$$

### 3.6 Calcul des termes sources

Les termes sources  $P_i$  représentent la chaleur libérée par les réactions aux électrodes à laquelle s'ajoute la chaleur de la vaporisation de l'eau. Ainsi, l'apport en chaleur dans l'anode est

$$P_a = LV_{H_2O} \alpha \frac{I}{2F} V_{node} \quad (3.36)$$

et dans la cathode

$$P_c = \left[ LV_{H_2O} ((1 + 2\alpha) + T\Delta S) \frac{1}{2F} + b_{O_2} \ln \left( \frac{I}{I_{O_2}^0} \right) \right] V_{node} \quad (3.37)$$

Un autre type de chaleur s'ajoute aux électrodes. Il s'agit de la chaleur produite dans la membrane suite à la résistance au transfert des protons. Ce phénomène est la conséquence d'une sous hydratation de la membrane. En effet, la non maîtrise du paramètre d'hydratation (c'est-à-dire  $\lambda$ ) entraîne une augmentation de la température de la membrane et par conséquent conduit à son assèchement.

Notons aussi que ce type de production de chaleur est volumique. Autrement dit, lors du fonctionnement de la pile, chaque élément de volume du réseau nodal appartenant à la zone de réaction de la PàC produit une quantité de chaleur. Cette quantité de chaleur est exprimée par la relation suivante

$$P_m = \frac{I^2}{\sigma_m} V_{node} \quad (3.38)$$

où  $\sigma$  représente la conductivité protonique de la phase membrane, elle est donnée (voir [Springer *et al.*, 1991]) par la corrélation suivante

$$\sigma_m(T) = (\zeta_1 \lambda_m - \zeta_2) \exp \left[ \zeta_3 \left( \frac{1}{\xi_4} - \frac{1}{T_m} \right) \right] \quad (3.39)$$

où  $\zeta_1 = 0.005139$ ,  $\zeta_2 = 0.00326$ ,  $\zeta_3 = 1268$  et  $\zeta_4 = 303$ .

Cependant la contenance en eau dans la membrane  $\lambda_m$  dépend de la concentration de l'eau, elle est exprimée par la relation suivante

$$\lambda_m = \frac{C_{H_2O}^m / M_{H_2O}}{\rho_m / M_m - b C_{H_2O}^m / M_{H_2O}} \quad (3.40)$$

où  $M_m$  et  $M_{H_2O}$  représentent les masses molaires de la membrane et de l'eau respectivement,  $\rho_m$  est la densité de la membrane,  $C_{H_2O}^m$  est la concentration en eau, et  $b = 0.00126$  représente le coefficient d'extension de la membrane défini expérimentalement.

Le facteur d'hydratation  $\lambda_m$  est un paramètre adimensionnel qui n'est pas nécessairement homogène dans toute la membrane. Il dépend de la concentration de l'eau [Shan et Choe, 2006]. Il prend la valeur quatorze lorsque la membrane est bien hydratée et il peut atteindre la valeur vingt deux dans les conditions de supersaturation.

La concentration en eau dans la membrane peut être obtenue de la façon suivante. D'après Verbrugge [Verbrugge et Hill, 1990] on a

$$\frac{dm_{H_2O}}{dt} = \frac{d(C_{H_2O}A_{fc}\sigma_m)}{dt} = DW_{el} + DW_{diff} \quad (3.41)$$

ou encore

$$A_{fc}\sigma_m \frac{dm_{H_2O}}{dt} = DW_{el} + DW_{diff} \quad (3.42)$$

$DW_{el}$  et  $DW_{diff}$  représentent respectivement la migration des ions et la diffusion d'eau dans la membrane.

La migration de l'eau suivant le déplacement des ions  $H^+$  est donné en fonction de l'humidité de la membrane aux interfaces des électrodes [Verbrugge et Hill, 1990]

$$DW_{el} = M_{H_2O}A_{fc} [(\lambda_c - \lambda_a)(\zeta_5 + \zeta_6(\lambda_c - \lambda_a))] \frac{I}{F} \quad (3.43)$$

où  $\zeta_5 = 0.0029$  et  $\zeta_6 = 0.05$ .

Les  $\lambda_a$  et  $\lambda_c$  sont calculées fonction de l'activité de l'eau à l'anode et à la cathode respectivement.

$$\lambda_i = \begin{cases} 0.043 + 17.81a_i - 39.85a_i^2 + 36a_i^3 & 1 \geq a_i \geq 0 \\ 14 + 1.4(a_i - 1) & 3 \geq a_i \geq 1 \\ 16.8 & a_i \geq 3 \end{cases} \quad (3.44)$$

où  $i = a$  ou  $c$ . « a » pour l'anode et « b » pour la cathode.

La diffusion de l'eau dans la membrane se fait selon Verbrugge, suivant un profil linéaire selon la formule suivante [Bernardi et Verbrugge, 1991]

$$DW_{diff} = M_{H_2O}A_{fc}D_w \frac{C_c - C_a}{\delta_m} \quad (3.45)$$

Cependant, les concentrations sont données en fonction des activités, on retrouve ainsi les relations suivantes

$$C_{H_2O}^a = a_a \frac{A \exp(-B/T_a)}{RT_a} \quad \text{et} \quad C_{H_2O}^c = a_c \frac{A \exp(-B/T_c)}{RT_c} \quad (3.46)$$

Les activités à l'anode et à la cathode sont exprimées par la relation suivante

$$a_{a,c} = \frac{100 \times 10^{(A-B/C+T_i-273.15)}}{\rho_{H_2O}/M_{H_2O}RT_i} \quad (3.47)$$

où  $i = a$  ou  $c$ .

Par ailleurs, le coefficient  $D_w$  est donné par des corrélations

$$D_w = \begin{cases} 10^{-6} & \lambda < 2 \\ 10^{-6}(1 + 2(\lambda - 3)) & 3 \geq \lambda \geq 2 \\ 10^{-6}(3 - 1.67(\lambda - 3)) & 4.5 \geq \lambda \geq 3 \\ 1.25 \cdot 10^{-6} & \lambda \geq 4.5 \end{cases} \quad (3.48)$$

Il est à noter et vu que la diffusion d'eau dans la membrane résulte de sa concentration en vapeur d'eau, le coefficient de transport  $D_w$  est évalué à la cathode pour  $\lambda_c$ .

En régime dynamique, et en vertu des équations (3.42), (3.45) et (3.46) la variation de la concentration d'eau dans la membrane est donnée par l'expression suivante

$$\begin{aligned} \frac{dC_{H_2O}^m}{dt} &= \frac{M_{H_2O}}{\delta_m} [(\lambda_c - \lambda_a) (0.0029 + 0.05 (\lambda_a + \lambda_c))] \frac{I}{F} \\ &+ \frac{M_{H_2O}}{R} \frac{D_w}{\delta_m^2} \left[ \frac{a_c}{T_c} \exp\left(\frac{-B}{T_c}\right) - \frac{a_a}{T_a} \exp\left(\frac{-B}{T_a}\right) \right] \end{aligned} \quad (3.49)$$

où  $C_{H_2O}$  et  $M_{H_2O}$  désignent respectivement la concentration et la masse d'eau dans la membrane.

### 3.7 Conclusion

La propriété la plus intéressante de l'approche nodale est de modéliser des phénomènes physiques sans avoir recours aux équations aux dérivées partielles. Dans le cas thermique, tous les phénomènes d'échange sont décrits par des conductances thermiques traduisant le type d'échange considéré.

Il est à noter que le phénomène thermique dans la pile peut être décrit d'une part, par la conductance fluïdique qui décrit le mouvement des particules du fluide dans les canaux des gaz et notamment le circuit de refroidissement et, d'autre part, par une conductance équivalente représentant le couplage entre la conduction et la convection entre la partie solide et fluide de la pile. Il est dès lors possible d'utiliser cette approche seule pour décrire le comportement thermique de la PàC sans avoir recours au couplage entre deux types de modélisation. Autrement dit, on peut traiter en même temps la conduction et la convection thermique par une simple représentation par conductance thermique équivalente. C'est le principe que nous avons adopté dans ce chapitre.

Le chapitre suivant, sera dédié au calcul parallèle. On fera un tour d'horizon sur les langages et les machines parallèles.



# Chapitre 4

## Taxonomie des langages et machines parallèles

### 4.1 Introduction

La simulation numérique des phénomènes physiques complexes nécessite la manipulation de grands volumes de données. On entend par calcul intensif, la résolution à l'aide de plusieurs unités de calcul des problèmes nécessitant de ressources de traitement importants et de capacités de mémoires suffisantes pour le stockage des données.

Le calcul intensif peut être mis en oeuvre soit à l'aide de machines parallèles dotées de plusieurs processus élémentaires, soit par l'association de plusieurs stations de travail éventuellement hétérogènes. Ces dernières peuvent communiquer à l'aide d'un réseau local (Local Area Network, LAN), ou bien à l'aide d'un réseau étendu (Wide Area Network, WAN) s'ils sont éloignés géographiquement.

La mise en oeuvre d'un algorithme parallèle consiste à accélérer l'exécution des calculs à l'aide de plusieurs processus ou plusieurs stations de travail. Pour ce faire, il faut décomposer le problème en plusieurs tâches qui peuvent être dépendantes ou non les unes des autres, ou bien appliquer simultanément à plusieurs données différentes un même programme.

En d'autres termes, le but principal de la programmation parallèle est de réduire le temps de calcul des simulations obtenues avec la programmation séquentielle. Afin d'atteindre cet objectif, il est nécessaire de répartir équitablement la charge de travail (Load Balancing) entre les différentes machines tout en minimisant les coûts des communications inter-machines. Ceci permet de réduire les délais des communications et d'optimiser

l'usage de la bande passante du réseau.

Un programme de calcul parallèle peut être développé à l'aide de bibliothèques spécialisées qui permettent d'appeler des sous-programmes spécialisés ou des routines d'échanges de messages. Dans la catégorie des bibliothèques d'échanges de messages, nous avons PVM (Parallel Virtual Machine) et MPI (Message Passing Interface) qui sont les plus populaires aujourd'hui et qui peuvent être utilisés d'une manière portable sur les machines parallèles actuelles. Dans la catégorie des bibliothèques dédiées au calcul numérique, nous avons à titre d'exemple, BLACS (Basic Linear Algebra Subprograms), sa version parallèle PBLAS (Parallel Basic Linear Algebra Subprograms) ou encore ScaLAPACK pour la résolution des problèmes d'algèbre linéaire.

Par ailleurs, parmi les langages parallèles disponibles aujourd'hui, nous avons le langage UPC (Unified Parallel C) récemment développé comme l'extension parallèle du langage C standard par un consortium d'industriels (IBM, HP, ...) et d'universités telles que l'université de Floride et l'université de George Washington. Dans le cadre de cette thèse, nous avons travaillé en étroite collaboration avec le laboratoire HPCL<sup>5</sup>.

## 4.2 Paradigmes de la programmation parallèle

Dans ce chapitre, nous présenterons les paradigmes de la programmation parallèle qui permettent de mettre en oeuvre et d'exécuter un algorithme parallèle sur des machines contenant plusieurs unités de calcul ou sur un réseau de stations de travail. Pour simuler le comportement thermique de la pile à combustible, nous utiliserons le calcul parallèle pour optimiser le temps d'exécution tout en améliorant la qualité des solutions en terme de précision.

La programmation parallèle s'appuie sur le modèle de processus communiquant. Un processus d'un programme parallèle est soit à mémoire commune ou bien à mémoire distribuée, ou encore à mémoire virtuellement partagée (voir [FIGURE 4.1](#)).

Dans la catégorie de modèles à mémoire partagée (commune), plusieurs processus sont exécutés de façon imbriquée dans le temps par une même unité centrale, le passage d'un processus à un autre étant le fait des interruptions. Plus précisément dans ce modèle, on partage le calcul entre plusieurs processus ayant accès indépendant à la mémoire commune [El-Ghazawi, 2001, William *et al.*, 2001, William *et al.*, 2003]. Ce type de modèle requière des multi-processeurs et des voies multiples d'accès à la mémoire.

---

5. HPLC : High Performance Computing Lab à l'université de George Washington.

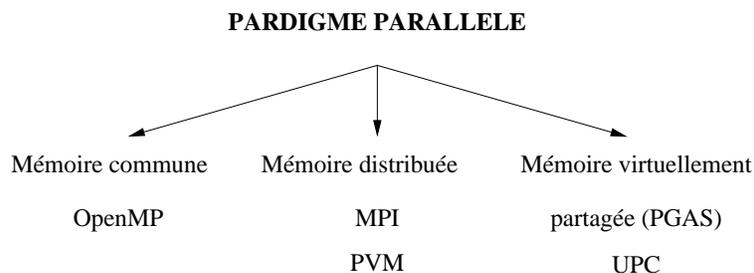


FIGURE 4.1 – Paradigme de la programmation parallèle.

Le langage le plus utilisé basé sur ce modèle est OpenMP (Open Multi Processing) qui se caractérise par l’aisance de son utilisation. Les accès mémoire distants ne nécessitent pas une écriture particulière de la part des développeurs, c’est le compilateur qui génère le code parallèle.

Dans ce type de modèles à mémoires distribuées, la lecture d’un emplacement mémoire distant peut être provoquée par une simple opération d’évaluation d’une expression quelconque. De même, une écriture dans un emplacement mémoire distant peut être effectuée par une simple opération d’affectation, même si la variable de destination est située physiquement sur une autre machine.

Par ailleurs, OpenMP permet l’exécution parallèle du modèle à mémoire distribuée par des processus légers appelés « threads ». Un « thread » est une partie du code d’un processus qualifié de processus léger à cause de son contexte réduit. Il exécute en concurrence avec les autres threads du processus et partage avec eux l’espace mémoire du processus à travers laquelle ils communiquent.

Cependant, ceci peut engendrer des excès d’accès distants, qui conduisent à une baisse des performances. En effet, ce modèle de mémoire partagée offre des performances minimales sur les architectures à mémoire distribuée. Pour palier à ce problème, on dispose d’un nouveau type de programmation appelé communément la programmation multithreadée. Le coût de manipulation et de gestion de processus sur une même machine ou un même processus est donc réduit.

Dans le modèle à mémoire distribuée, plusieurs processus partagent un même espace mémoire. Autrement dit, plusieurs tâches sont distribuées entre plusieurs processus ayant des espaces mémoire réservés, où chaque processeur s’occupe de son processus.

Nous trouvons dans ce type de modèles, des systèmes à échange de messages comme PVM (Parallel Virtual Machine), MPI (Message Passing Interface) ou encore LANDA (Local Area Network for Distributed Application) ont été développés pour offrir des environnements facilitant les applications parallèles sur des machines à mémoire distribuées

[Pachero, 1997, Vandekan *et al.*, 1994].

Notons enfin que ce type de configuration nécessite des multiprocesseurs où les clusters d'ordinateurs sont liés par un réseau local.

La troisième catégorie de la programmation parallèle concerne le modèle à mémoires virtuellement partagées (Distributed Shared Memory ou DSM), qui est connue également sous le nom de modèle d'espace d'adressage mémoire global partitionné (Partitioned Global Address Space ou PGAS). Ce modèle allie les avantages des deux modèles précédents, en bénéficiant d'un équilibre entre l'aisance d'utilisation et l'exploitation de la distribution des données. Plus précisément, l'espace de mémoire partagée est divisé en un certain nombre de partitions logiques correspondantes à des zones d'affinité associées aux threads, [El-Ghazawi, 2001, William *et al.*, 2001, William *et al.*, 2003].

Dans ce modèle, une thread peut accéder à la totalité de la mémoire partagée et peut aussi accéder de façon efficace aux objets partagés qui se trouvent dans sa zone d'affinité. Le concept d'affinité est particulièrement efficace car les différentes implementations des langages associés à ce modèle veillent à maintenir une thread avec sa zone d'affinité au sein d'une même machine physique. Ainsi, le développeur peut contrôler la distribution des données et les traitements de son application en se basant sur l'affinité des données. Plusieurs langages parallèles émergeant utilisent ce modèle, comme UPC, CoArray Fortran et Titanium. Unified Parallel C (UPC) est une extension parallèle du langage ISO-C, CoArray Fortran (CAF) étend le langage Fortran, et enfin Titanium est basé sur Java.

Dans ce qui suit, nous présenterons dans la section 4.3, les architectures parallèles, ensuite nous donnerons dans la section 4.4 les différents langages du calcul parallèle et nous citerons dans la section 4.5 quelques bibliothèques spécifiques au calcul d'algèbre linéaire. Enfin dans la section 4.6, nous donnerons les moyens d'évaluation d'un programme parallèle.

## 4.3 Architectures parallèles

Les machines parallèles sont composées de manière générale, de plusieurs nœuds de calcul reliés entre eux par un réseau d'interconnexion. Un nœud peut être un processus dont la structure peut être proche que celle d'un ordinateur séquentiel ou un processus spécifique ou encore un processus beaucoup plus simplifié.

Néanmoins, on peut noter trois principales caractéristiques d'une machine parallèle.

- Le nombre de processus et leurs architectures (nature, taille, vitesse, etc.).

- L'organisation de la mémoire : mémoire partagée, distribuée ou virtuellement partagée.
- La topologie du réseau d'interconnexion : comment les réseaux sont inter-connectés.

Une machine dotée de  $n$  processus doit être idéalement  $n$  fois plus rapide qu'une machine dotée d'un seul processus. Ce n'est pas le cas en pratique pour des raisons se situant à tous les niveaux de l'exploitation. Parmi ces raisons, on trouve des paramètres liées à l'accélération des machines en parallèles. A ce paramètre s'ajoute le problème d'équilibre des charges. En effet, pour exploiter pleinement la puissance des calculs des machines parallèles, il faut que les tâches soit partagées le plus équitablement possible entre les différents processus. Un troisième paramètre à ne pas négliger est relatif au communications entre processus. En effet, les communications constituent les aspects les plus limitatifs du calcul parallèle. Il ne suffit pas de disposer de processus qui calculent vite, mais de processus qui communiquent aussi rapidement entre eux.

Cependant, il existe trois principaux groupes de calculs parallèles. On trouve les machines SIMD (Single Instruction Multiple Data Stream), les machines MIMD (Multiple Instruction Multiple Data Stream) et les machines MIMD avec mémoire partagée.

### 4.3.1 Architectures SIMD

les machines parallèles SIMD sont des machines synchrones et se caractérisent par un nombre élevé d'unités de traitement. Chaque unité de traitement exécute la même instruction au même instant. En d'autres termes, il y a un seul compteur ordinal contrôlant l'exécution du programme. Chaque unité de traitement est réduite à une Unité Arithmétique et Logique (UAL) et une Mémoire Locale (ML). Les couples (UAL, ML) sont généralement appelés Processus Élémentaires (PE). Ainsi un processus (appelé contrôleur ou séquenceur) génère le flux de contrôle et envoie les instructions à tout les PE. Chacun de ces PE contient un bit de contexte qui indique s'il est actif ou non pour l'exécution d'une instruction.

Par ailleurs, les processus élémentaires sont reliés entre eux par un réseau d'interconnexion. L'ensemble des PEs est relié à l'ordinateur frontal qui joue le rôle du "Host" à travers le contrôleur. La machine hôte supporte le développement et la compilation des programmes. Le contrôleur communique les instructions et les données de la machine hôte vers tous les PEs et rassemble les résultats provenant des PEs. Il a accès au réseau d'interconnexion, aux canaux d'entrée/sortie et à sa propre mémoire (voir [FIGURE 4.2](#)).

La puissance des calculs des machines SIMD vient du fait que chaque instruction

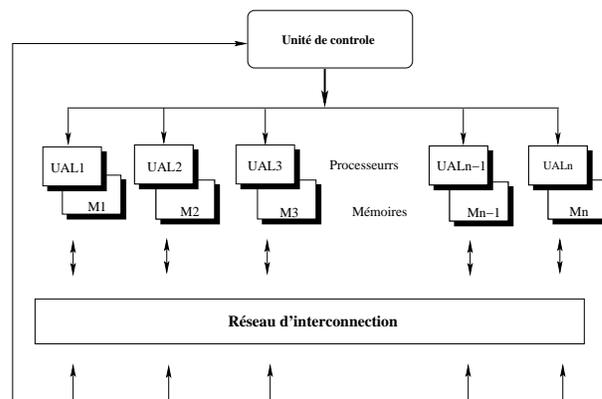


FIGURE 4.2 – Le modèle d’exécution SIMD.

est exécutée simultanément sur un grand nombre de données.

En effet, l’algorithmique parallèle SIMD consiste tout d’abord à représenter les données par des instructions mathématiques simples et répétitives, puis à trouver l’algorithme qui applique les instructions souhaitées sur chaque élément de ces structures. Et ce faisant, on explicite le parallélisme en établissant une correspondance spatiale des données et de l’architectures SIMD.

## 4.3.2 Architectures MIMD

Dans les machines de type MIMD, plusieurs instructions pouvant être différentes sont exécutées parallèlement par plusieurs processus sur des données propres à chaque processus. Les machines de ce type n’ont pas d’horloge globale et opèrent donc en mode asynchrone. On distingue deux types d’architectures parallèles : les architectures à mémoire commune et les architectures à mémoire partagées.

### 4.3.2.1 Architectures MIMD à mémoire partagée

Dans les architectures à mémoire partagées, tous les processus partagent un même espace de données global. Dans ce cas, tous les processus peuvent accéder à n’importe quel banc mémoire via un réseau d’inter-connection, chaque processus ayant le même temps d’accès en l’absence de conflits (voir [FIGURE 4.3](#)).

La mémoire joue un double rôle, d’une part, le rôle classique de la mémoire contenant les instructions et les données, et d’autre part, un rôle de communication entre les processus par le biais des variables partagés.

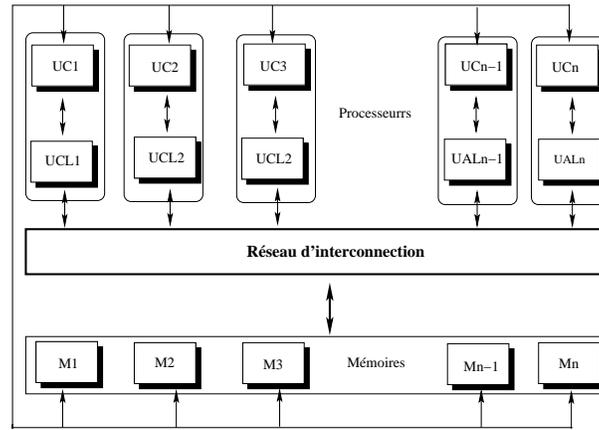


FIGURE 4.3 – Modèle d'exécution MIMD à mémoire partagée.

#### 4.3.2.2 Architectures MIMD à mémoire distribuée

Dans les architectures parallèles MIMD à mémoire distribuée, chaque Unité de Traitement (UT) a sa propre mémoire locale et privée, et exécute les instructions indépendamment des autres unités de traitement (voir [FIGURE 4.4](#)). Les UT n'ont pas accès à la mémoire des autres unités de traitement. Lorsque une unité a besoin d'accéder aux données d'une autre UT, une requête explicite doit être émise à travers le réseau d'interconnexion, on parle alors de communication par message par opposition à la communication par variables partagés dans les architectures à mémoire commune. Cependant, le mécanisme de communication par échanges de messages se traduit par un grain de parallélisme moins fin pour les architectures à mémoires distribuées, contrairement aux architectures à mémoires partagées. Le grain de parallélisme d'une application est défini comme étant le rapport entre la charge en calcul et la charge en communication. Notons cependant que les échanges d'informations les plus fréquents (acquisition de l'information et manipulation de données locales) s'effectuent entre mémoires et processus qui résident sur le même nœud et n'utilisent pas le réseau pour communiquer entre eux. Ainsi, le délai introduit par la transmission à travers le réseau ne pénalise que les échanges entre les processus parallèles [[Gaber, 1998](#)].

## 4.4 Les langages parallèles

Le calcul parallèle fait appel à deux types d'implantations. Dans l'implantation SPMD (Single Program Multiple Data), tous les processus exécutent le même code mais sur des données différentes (plutôt MPI). Alors que pour les implantations MPMD (Mul-

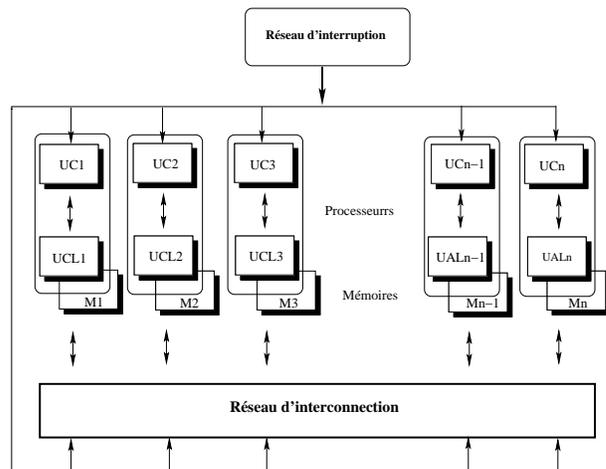


FIGURE 4.4 – Modèle d'exécution MIMD à mémoire distribuée.

multiple Program Multiple Data), on fait appel à PVM pour la gestion dynamique des processus et notamment à la version 2.0 de MPI.

Dans tous les cas, la phase la plus importante dans le calcul parallèle est le traitement des communications. Il existe plusieurs implantations. A titre d'exemple, pour calculer la solution approchée des particules d'un fluide en mouvement, on n'a besoin que des points voisins (variable, selon la précision des schémas numériques). On utilise alors la technique de décomposition de domaines. Le domaine initial est partagé en neuf sous-domaines. Pour simplifier on se place dans le cas d'un maillage structuré avec une dépendance nord, sud, est, ouest (voir [FIGURE 4.5](#)). Pour les points appartenant à l'intérieur d'un sous-domaine, il n'y a pas de différence avec le cas mono-domaine.

Cependant, les points appartenant à une interface voisine à un sous-domaine ne disposent pas de toutes les informations nécessaires pour faire les calculs. On a donc besoin des valeurs que possède ce sous-domaine voisin. Il y a alors communication point à point, autrement dit, entre un sous-domaine expéditeur et un sous-domaine destinataire bien identifié.

Dans ce qui suit, nous présenterons les langages de programmation utilisés dans le cadre de ce travail en vue de la simulation du comportement thermique du stack d'une PEMFC. Il s'agit des langages PVM, MPI et l'UPC.

#### 4.4.1 L'API PVM

La bibliothèque PVM (Parallel Virtual Machine) est un ensemble de fonctions réunies dans une librairie permettant d'assembler un ensemble de machines hétérogènes

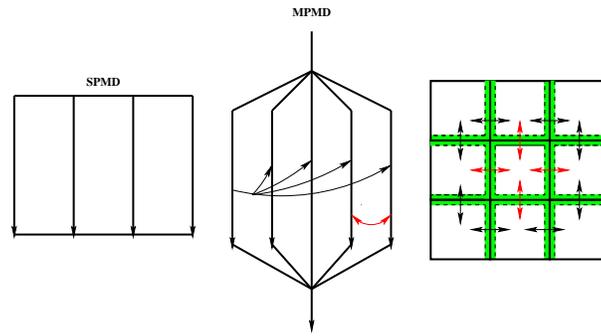


FIGURE 4.5 – Différentes implantations possibles.

afin de construire une machine parallèle virtuelle. La machine virtuelle peut être composée de machines séquentielles et parallèles. L'assemblage de ces différents processeurs est effectué par le biais d'un réseau local (Ethernet, FDDI, etc.), ce qui constitue cependant le point faible de la machine ainsi créée. En effet, un réseau local classique est cent fois plus lent qu'un réseau d'interconnexions [Leduc, 1994]. Une attention particulière de minimisation des échanges d'informations entre processus devra donc être apportée. Mais, toutefois, cette bibliothèque présente l'avantage de créer une machine parallèle avec les sources existantes.

Pour créer une machine virtuelle, un démon PVM doit être présent sur chaque machine de la machine virtuelle. L'ensemble des démons constituant chaque machine doivent ensuite s'enregistrer pour former la machine virtuelle (MV). Les tâches se connectent aux démons de la machine sur laquelle ils sont lancés pour appartenir à la MV. Ces mêmes tâches une fois connectées peuvent créer d'autres tâches sur tous les composants de la MV. Elle peuvent aussi communiquer avec les autres tâches de la MV.

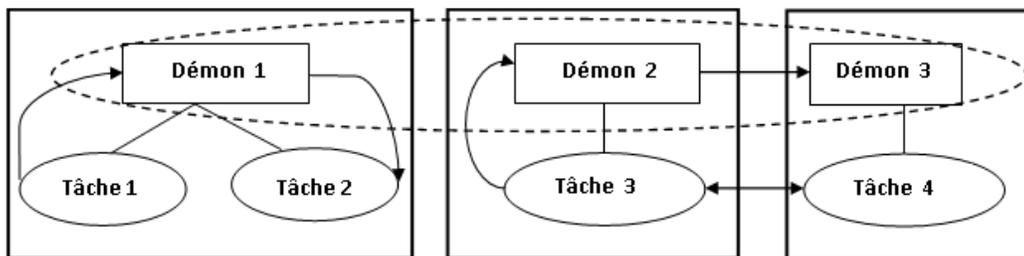


FIGURE 4.6 – La machine PVM.

## 4.4.2 L'API MPI

La programmation par passage de messages est principalement caractérisée par son adressage mémoire distribuée et par son parallélisme exprimé de façon explicite.

L'adressage mémoire distribuée entraîne deux implications immédiates. La première implication exige que chaque élément des données doit impérativement appartenir à l'une des partitions de la mémoire. Autrement dit, toute donnée doit être explicitement positionnée. La seconde implication exige la coordination entre le processus émetteur convoitant les données et le processus récepteur voulant accéder à ces données. Cette coopération est nécessaire pour toute lecture et/ou écriture provenant ou allant vers une partition mémoire autre que celle du processus considéré.

Il est à noter que ce modèle nécessite que le parallélisme soit explicitement exprimé par le développeur, le rendant ainsi responsable quant à la distribution des données, la décomposition des calculs et la réduction des dépendances entre les processus. Ceci rend le modèle de programmation non trivial et difficile à maîtriser.

### 4.4.2.1 Passage de messages

Le paradigme de programmation MPI (Message Passing Interface) est une bibliothèque d'échanges de messages pour machines parallèles homogènes. Chaque processus travaille sur un programme écrit dans un langage séquentiel (C/C++ ou Fortran). Ce programme est typiquement le même sur chaque processus (SPMD). Les variables de chaque processus ont le même nom et des emplacements mémoire (c'est-à-dire à mémoire distribuée) et des données différentes (voir [FIGURE 4.7](#)). Toutes les variables sont privées. Les processus communiquent via des routines d'envoi et de réception (passage de messages).

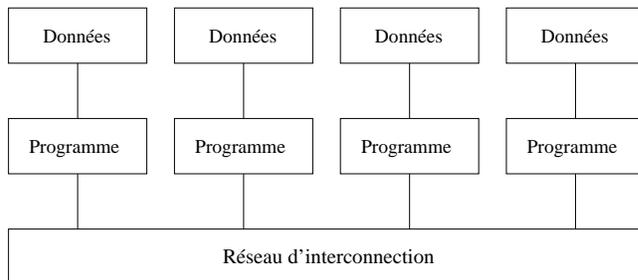


FIGURE 4.7 – Paradigme de passage de messages.

### 4.4.2.2 Distribution des données

Dans un programme MPI, on commence par affecter une valeur de `myrank` à l'aide d'une routine de bibliothèque. Ensuite un programme d'initialisation MPI démarre un système de `size` processus. Les décisions de distribution sont alors basées sur `myrank` (voir [FIGURE 4.8](#)).

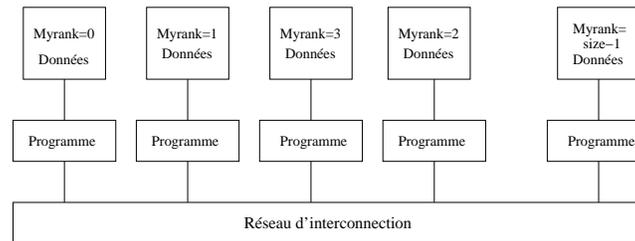


FIGURE 4.8 – Distribution des données.

### 4.4.2.3 Les messages

Les messages sont des paquets de données entre programmes qui jouent le rôle d'envoi de l'information nécessaire entre un processus émetteur et un processus récepteur.

Dans le processus émetteur on trouve une adresse source, le type de ces données ainsi que leurs tailles. De la même façon, un processus récepteur doit contenir une adresse de destination, le type de données de destination et la taille du tampon destination (voir [FIGURE 4.9](#)).

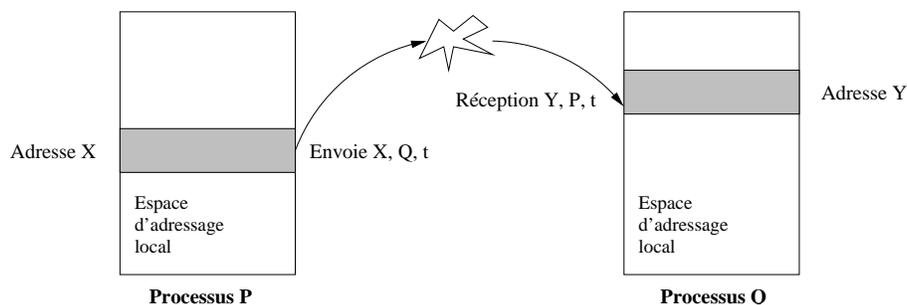


FIGURE 4.9 – Échanges de messages entre processeurs.

## 4.4.3 L'API UPC

Le paradigme de programmation en parallèle tels que les échanges de messages et les mémoires partagées, sont développées pour profiter pleinement du degré élevé du

parallélisme des multi-processus à grande échelle, des faisceaux de PC, et des faisceaux des multi-processus de mémoires partagées.

Bien que ces deux paradigmes de programmation représentent l'état d'art aujourd'hui, en revanche l'échange de messages souffre du coût de communications élevé et de la difficulté pour l'utilisation, tandis que le paradigme de mémoire distribuée et partagée souffre de son incapacité d'exprimer la localité des données.

La mémoire distribuée et partagée (DSM) suscite une attention particulière puisqu'elle est conçue pour accroître la facilité de la programmation du paradigme de la mémoire partagée. Elle permet aussi d'obtenir un rendement élevé en exprimant la localité des données comme c'est le cas du modèle de l'échange de messages [El-Ghazawi *et al.*, 2005, Cantonnet, 2006]. UPC (Unified Parallel C) est un nouveau langage du calcul parallèle basée sur ce modèle. C'est une prolongation à la norme ANSI C qui est développée par le consortium du milieu universitaire, de l'industrie et du gouvernement. Ainsi, toutes les structures du langage C sont déjà incorporées dans l'UPC [El-Ghazawi *et al.*, 2005].

L'UPC est un langage explicite partitionné de l'espace d'adressage global (PGAS). Dans ce type de langages [El-Ghazawi *et al.*, 2005], chaque processus constituant le programme peut accéder à un espace privé ou partagé. L'espace partagé est logiquement divisé et les processus ont l'affinité d'une partie de l'espace laissant exploiter la localité des données.

L'UPC a beaucoup de dispositifs qui la rendent facile à programmer. C'est une prolongation du C et qui représente une syntaxe très simple. La programmation avec l'UPC ne nécessite pas des bibliothèques de base ce qui élimine l'utilisation de beaucoup de fonctions d'appel complexes et d'argument d'échange. C'est une application de décomposition en un domaine conforme, ce qui facilite considérablement l'effort conceptuel [El-Ghazawi *et al.*, 2005, Cantonnet *et al.*, 2004, Cantonnet, 2006].

## 4.5 Les bibliothèques spécifiques

Nous présenterons dans cette section quelques librairies communément utilisées dans résolution des problèmes d'algèbre linéaire.

### 4.5.1 ScaLAPACK

Comme la simulation de phénomènes physiques nécessite d'importants calculs, il peut donc être très utile de les distribuer sur de multiples machines en utilisant des

bibliothèques telles que BLACS et ScaLAPACK.

ScaLAPACK (the Scalable Linear Algebra Package) est une bibliothèque composée d'un ensemble de sous-programmes Fortran permettant de résoudre en parallèle des problèmes d'algèbre linéaire par des méthodes numériques directes. Elle permet de faire de nombreux calculs d'algèbre linéaire distribués. ScaLAPACK dépend elle-même en particulier des bibliothèques parallèles PBLAS (Parallel BLAS) et BLACS (Basic Linear Algebra Communication Subprograms) sur lesquelles elle s'appuie pour réaliser en parallèle respectivement les opérations matricielles élémentaires et les communications inter-processus, via MPI par exemple (voir [FIGURE 4.10](#)).

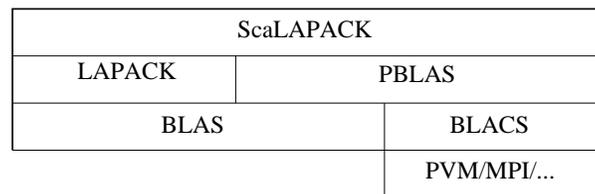


FIGURE 4.10 – Structure de ScaLAPACK.

#### 4.5.1.1 Blas

Blas (Basic Linear Algebra Subprograms) est une bibliothèque permettant de faire des calculs sur des vecteurs et des matrices. Blas est divisée en trois niveaux : le niveau un qui permet d'effectuer des opérations entre vecteurs, le niveau deux pour les opérations entre vecteurs et matrices et le niveau trois pour des opérations sur des matrices. Blas est efficace, portable et disponible sur de nombreuses plates-formes. Blas est souvent utilisée comme brique de base pour tout ce qui est calcul numérique, notamment par PBLAS et LAPACK.

#### 4.5.1.2 LAPACK

LAPACK (Linear Algebra PACKage) est une collection de routines écrite en Fortran<sup>77</sup> permettant de résoudre de nombreux problèmes d'algèbre linéaire

- Résoudre des équations linéaires.
- Trouver les moindres carrés.
- Rechercher de valeurs propres.
- Décomposer en valeurs singulières.
- Factoriser des matrices : LU, Cholesky, QR, SVD, Schur, etc.

LAPACK est conçue pour utiliser au maximum Blas pour effectuer les calculs, ce qui permet de bénéficier de toutes les optimisations que Blas possède.

#### 4.5.1.3 BLACS

BLACS (Basic Linear Algebra Communication Subprograms) est une interface de passage de messages orientée algèbre linéaire. BLACS est conçue pour être efficace sur un grand panel de machines à mémoire distribuée. Il permet aussi d'utiliser dans un même cluster des machines avec des architectures très différentes. Les principaux concepts utilisés dans BLACS sont

- Interface standard.
- Communication à travers toute la grille de calculs ou à travers une partie seulement.
- Utilisation de contexte.
- Communication basée sur des matrices.
- Communication sans ID.

BLACS peut utiliser différentes bibliothèques de communication pour l'envoi de messages, les plus courantes sont MPI et PVM. Elles permettent de faire communiquer des machines très hétérogènes.

## 4.6 Evaluation d'un programme parallèle

L'analyse d'un programme parallèle<sup>6</sup> se réalise en fonction de deux grandeurs : son efficacité et sa scalabilité.

### 4.6.1 Calcul du speed up

Afin de quantifier la performance d'une machine parallèle, on introduit le speed up. Il s'agit du temps séquentiel, donc le temps qu'il aurait fallu à un seul processus ( $p$ ) de la machine parallèle pour résoudre le problème, divisé par le temps parallèle réellement nécessité par la machine.

La loi d'Amdahl (voir [Gaber, 1998]) stipule que l'accélération sur toute machine parallèle est limitée par la fraction séquentiel du code. En d'autres termes, la puissance

---

6. En informatique, le calcul parallèle consiste en l'exécution simultanée d'une même tâche, partitionnée et adaptée afin de pouvoir être répartie entre plusieurs processeurs en vue de traiter plus rapidement des problèmes plus grands.

crête ne peut être atteinte que sur des programmes complètement parallélisés. La loi d'Amdahl permet donc de donner une estimation de ce speed up. Elle suppose qu'une partie  $\alpha$  du travail à effectuer n'est pas parallélisable, alors qu'une autre partie  $(1 - \alpha)$  l'est complètement. Ceci permet d'affirmer que le temps nécessaire par processus ayant une puissance de calcul  $R$  est de

$$T_{seq} = \frac{W}{R} \quad (4.1)$$

Le temps utilisé par la machine parallèle est donné par la relation suivante :

$$T_{par} = \alpha \frac{W}{R} + (1 - \alpha) \frac{W}{p \times R} \quad (4.2)$$

### 4.6.2 Calcul du travail

Un autre paramètre important de mesure de la performance d'un algorithme en parallèle est le travail fourni par celui-ci. Plus précisément, le travail  $W$  d'un algorithme parallèle est défini comme étant le produit de son temps d'exécution et le nombre de processus utilisés, soit

$$W = T \times p \quad (4.3)$$

Autrement dit, la notion du travail mesure tout l'effort requis par un algorithme. Il traduit les inefficacités causées par un ou plusieurs processus pendant les calculs.

### 4.6.3 Calcul de l'efficacité

La notion du travail peut être aussi utilisée pour mesurer l'efficacité. Plus précisément, l'efficacité  $E$  d'un algorithme parallèle est définie comme étant le rapport du meilleur temps d'exécution obtenu sur un calcul séquentiel, au travail de l'algorithme parallèle, soit

$$E = \frac{S}{P} \quad (4.4)$$

Alternativement, l'efficacité peut être exprimée comme le rapport du speedup au nombre de processus employés.

## 4.7 Conclusion

La propriété la plus intéressante du calcul parallèle est le temps d'exécution relativement court en comparaison avec le calcul séquentiel. Cependant, le choix de l'algorithme utilisé sur la machine devra jouer un rôle important sur la minimisation des échanges de données par messages, et par conséquent sur le temps d'exécution.

Dans PVM, les communications entre processus sont réalisées en mode point à point direct ou en utilisant la redirection et le routage des messages par l'intermédiaire du démon. PVM oblige l'utilisateur à utiliser des tampons de communication, dont la gestion n'est pas toujours aisée. Sa version 3.3 résout en partie ce problème en autorisant l'émetteur à ne plus utiliser de tampons d'émission (In Place Packing).

Cependant, dans MPI, les communications sont réalisées en mode point à point ou vers un groupe. Les envois et les réceptions de messages, comme dans PVM, peuvent être bloquants ou non bloquants.

Il faut noter aussi que PVM s'applique aux réseaux de machines hétérogènes ce qui n'est pas le cas de MPI-1. Avec la version MPI-2, les fonctionnalités de la bibliothèque MPI sont proches de celles de PVM tout en étant plus stables.

Enfin, l'UPC se présente comme une synthèse qui combine les avantages du paradigme de la programmation à mémoire partagée, du contrôle de la disposition des données et des performances du paradigme de programmation par échange de messages.

Dans le prochain chapitre, nous aborderons la mise en parallèle de l'approche nodale. Pour illustrer les performances de la méthode développée, nous donnerons les résultats de la simulation. Une comparaison entre l'approche nodale et la discrétisation par différences finies fera aussi l'objet de ce chapitre.

# Chapitre 5

## Mise en œuvre parallèle de l’approche nodale

### 5.1 Introduction

Comme il a été annoncé au début de ce mémoire, un objectif principal de cette thèse est la simulation du comportement thermique d’une cellule de la PàC puis du stack complet en utilisant l’approche nodale. Nous avons obtenu ainsi un système que nous avons résolu avec une méthode directe en utilisant un réseau de stations de travail qui sont reliées par un bus Eternet sur le compilateur de Berkeley relié par un réseau Myrinet <sup>7</sup>.

Il est à noter que lors de la simulation du modèle thermique de la PàC, nous avons appliqué une méthode itérative pour la résolution du modèle parallèle. Cependant, pour le modèle séquentiel nous avons utilisé le code commercial MATLAB pour inverser la matrice  $G$  du système à résoudre (voir Chapitre 3).

Dans ce chapitre nous présenterons la parallélisation de l’approche nodale ainsi que les résultats de la simulation thermique de PàC avec les trois types de bibliothèques du calcul parallèle que nous avons utilisées. Nous commencerons par analyser les performances de chacun de ces types de parallélisation, pour ensuite analyser les courbes donnant les champs des températures dans la PàC. Par ailleurs, une comparaison avec la méthode des différences finies sera aussi proposée.

---

7. Nous avons utilisé le cluster disponible à l’université de George Washington USA.

## 5.2 Parallélisation avec PVM

La PàC a été divisée en éléments de volume dans lesquels il est assumé que la température reste constante [Salah *et al.*, 2007a]. Afin d'obtenir un découpage homogène, nous avons procédé comme suit (voir FIGURE 5.1)

- Suivant l'horizontale, on distingue deux types de découpages. D'une part, on subdivise la cellule de la PàC suivant la hauteur des canaux des gaz, et d'autre part, la pile est subdivisée suivant le voile intermédiaire entre les canaux,
- La pile est subdivisée suivant son épaisseur par un découpage en prenant en considération l'hétérogénéité du matériaux, autrement dit, un élément de volume ne peut appartenir à deux matériaux différents de la cellule,
- Dans la profondeur de la pile, le découpage peut être choisi en fonction de la précision souhaitée.

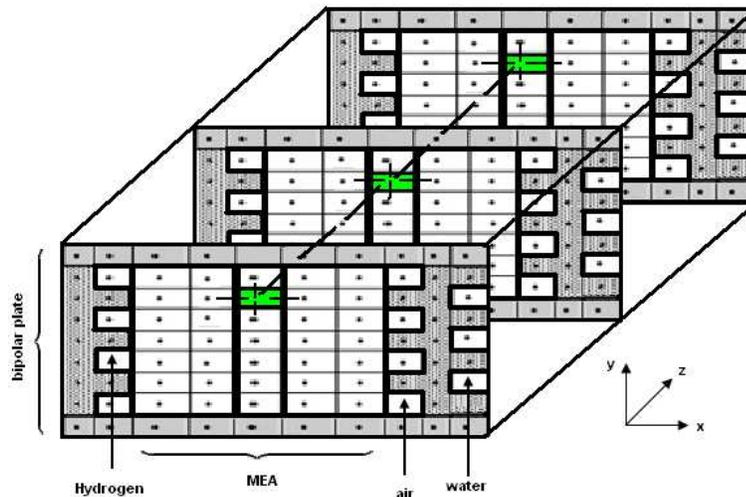


FIGURE 5.1 – Découpage de la cellule de la PàC.

Notons que chaque élément de volume  $V$  échange avec ses voisins de la chaleur qui est traduite par des conductances  $G$  définissant le mode d'échange qui peut être de type conduction ou bien convection.

### 5.2.1 Découpage

Le programme de simulation de la PàC sous PVM est constitué d'un programme principal appelé maître et des programmes secondaires appelés esclaves. Comme la PàC est un ensemble de cellules identiques composées de plusieurs couches (cf. Chapitre 1), on a affecté au programme maître la tâche de découpage en blocs en tenant en compte l'architecture de la pile. Cependant les esclaves assureront la fonction de calcul des échanges thermiques entre les différents blocs (matrices) où chaque cellule ou couche est représentée par une matrice de conductances.

Autrement dit, le maître procède à un découpage de la PàC suivant la dimension du problème à traiter. Nous aurons ainsi comme paramètres  $n$  et  $m$  désignant le nombre de blocs suivant les directions  $\mathbf{X}$  et  $\mathbf{Y}$  respectivement. Le paramètre  $q$  nous donne le nombre de découpage suivant la dimension  $\mathbf{Z}$ .

Par ailleurs, étant donnée que les cellules de la PàC constituent un ensemble non homogène, nous avons décidé de découper la cellule suivant la colonne où chaque matrice représente une zone de la cellule elle même. Cependant, le code de simulation aura comme paramètre d'entrée un nombre de processeurs qui correspondra au nombre de découpages procédés dans les matrices, avec comme limite un minimum de trois colonnes à calculer par processeur. Ceci nous permettra également de limiter les échanges inutiles de messages entre machines. En effet, chaque processeur a une zone précise de calcul qui est automatiquement déterminée par le programme maître qui se charge de découper la matrice pour ensuite la distribuer aux esclaves (voir l'algorithme de découpage soit **Algorithm 1**.)

On obtient ainsi des limites hautes et des limites basses destinées aux esclaves qui leur seront transmises durant l'exécution.

La section suivante est dédiée aux calculs, au niveau esclaves, des valeurs des matrices donnant les échanges thermiques dans la pile.

---

**Algorithm 1** Algorithme de découpage avec PVM

---

**Require:**  $Q$ ; \\* nombre de colonnes

**Require:**  $NBPROC$ ; \\* nombre de processus

```

1: CUT=Q/NBPROC; \* découpage
2: if CUT < 3 then
3:   "ERREUR : Trop de processus, 3 colonnes minimum par processus... ARRET";
4:   Return -1;
5: end if
6: LimiteBasse=0;
7: LimiteHaute=-1;
8: for i to  $NBPROC$  do
9:   if i < NBPROC-1 then
10:    LimiteHaute=LimiteBasse+CUT-1
11:    Limite[i][0]=LimiteBasse;
12:    Limite[i][1]=LimiteHaute;
13:    LimiteBasse=LimiteHaute+1;
14:  else
15:    LimiteBasse=LimiteHaute+1;
16:    LimiteHaute=Q-1;
17:    Limite[i][0]=LimiteBasse;
18:    Limite[i][1]=LimiteHaute;
19:  end if
20: end for

```

---

### 5.2.2 Calcul des points

Pour le calcul des matrices d'échanges à l'instant  $t + \Delta t$ , les formules de calcul imposent de connaître la valeur des voisins directs du point calculé à l'instant  $t$ . Le calcul des points qui ont au moins un voisin ne pose aucun problème. Cependant, pour les points dont le voisin est calculé par un autre processeur il est nécessaire de communiquer entre les processeurs la valeur des points manquants. Pour ce faire, de la mémoire de chaque processeur contenant les matrices à l'instant  $t$  utiles aux calculs ainsi que les matrices contenant les résultats des calculs correspondants à l'état de la matrice à  $t + \Delta t$ . Ainsi avant de procéder aux calculs, les colonnes manquantes sont communiquées aux autres processeurs (les processeurs voisins de gauche et de droite) à l'instant  $t$ . L'algorithme

utilisé est donné par **Algorithm 2**.

---

**Algorithm 2** Algorithme de calcul avec PVM

---

**Require:**  $k$ ; \\* nombre de plans dans chaque cellule

**Require:**  $S$ ; \\* nombre de matrices de sauvegarde à t

**Require:**  $C$ ; \\* ensemble de matrices de calcul à  $\Delta t + t$

```

1: LimiteGauche=LimiteGauche \* pour processeur courant ;
2: LimiteDroite=LimiteDroite \* pour processeur courant ;
3: for i to k do
4:   Send (VoisinGauche, ColonneGauche(S,i,LimiteGauche));
5:   Send (VoisinDroite, ColonneDroite(S,i,LimiteDroite));
6:   for j to LimiteDroite-1 do
7:     Compute(Colonne(j));
8:   end for
9:   Receive (VoisinGauche, ColonneGauche(S,i,LimiteGauche));
10:  Receive (VoisinDroite, ColonneDroite(S,i,LimiteDroite));
11:  Compute (Colonne(LimiteGauche));
12:  Compute (Colonne(LimiteDroite));
13:  Reverse(S,C);
14: end for

```

---

### 5.2.3 Performances des calculs

Comme il a été mentionné dans le chapitre précédent, il y a plusieurs manières de mesurer l'efficacité d'un algorithme en parallèle. En particulier, le speedup  $S$  d'un algorithme parallèle qui est défini comme étant le rapport entre le temps d'exécution  $T_s$  le plus rapide de l'algorithme séquentiel et le temps d'exécution  $T_p$  de l'algorithme parallèle [Ananth *et al.*, 2002], soit

$$S = \frac{T_s}{T_p} \quad (5.1)$$

Pour effectuer la simulation du modèle thermique de la PàC, nous exécutons l'algorithme parallèle sur un système de PVM constitué d'un ensemble de postes de travail reliés par un réseau de LAN d'Ethernet.

Les résultats des simulations, nous ont permis de tracer la courbe de l'accélération (speedup) en fonction de la taille du problème à traiter. **FIGURE 5.2** donne le speedup

pour une taille de matrice de  $210 \times 17 \times 30$ . Cette figure montre aussi la valeur théorique de l'accélération donnée par l'équation (5.1).

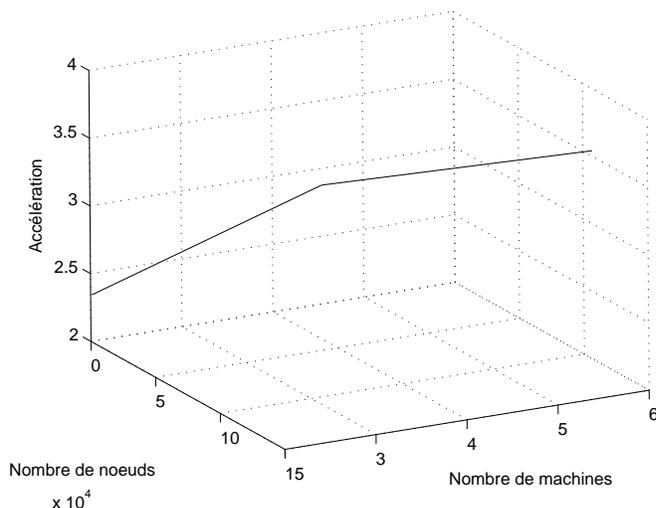


FIGURE 5.2 – Evolution de l'accélération suivant le nombre de machines.

Afin de suivre l'évolution de l'accélération de l'algorithme PVM en fonction des différentes tailles de matrices du réseau nodal, nous avons tracé la courbe représentée par FIGURE 5.3. Ainsi, l'exécution en parallèle du modèle basé sur le réseau nodal montre

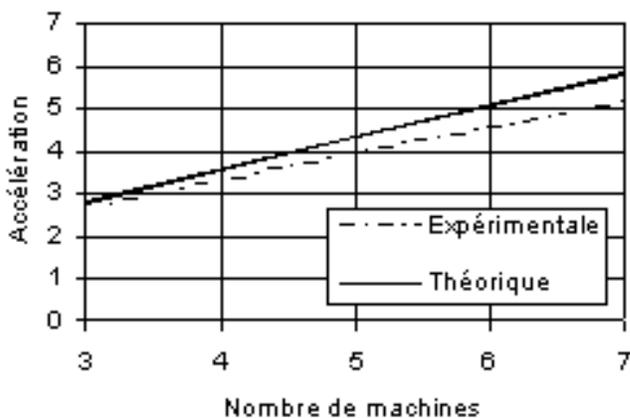


FIGURE 5.3 – Evolution de l'accélération suivant la taille du réseau nodal et le nombre de machines.

une amélioration significative par rapport au même modèle résolu en séquentiel. En effet, l'algorithme parallèle atteint une accélération linéaire qui est optimale comme il est montré

dans [FIGURE 5.2](#) et [FIGURE 5.3](#).

De l'analyse des coûts des simulations du model nodal sous PVM, il y a lieu de noter que l'accélération s'améliore considérablement avec l'augmentation du nombre de machines de la station de travail. Par exemple, pour un réseau nodal de taille de l'ordre d'un million, le temps d'exécution est de l'ordre de **12 heures** avec le séquentiel. Cependant, ce temps peut être vu en baisse à 3 heures si on utilisait 6 machines. Avec 50 machines on pourrait baisser ce temps à **7 minutes**. L'accélération passe de 4 pour 6 machine à 25 pour 50 machines.

En conclusion, nous pouvons affirmer qu'on terme du temps de simulation, l'exécution en parallèle sur PVM du modèle basé sur le réseau nodal présente de meilleurs performances lorsque l'on augmente le nombre de machines et la taille du réseau nodal en même temps.

## 5.3 Parallélisation avec MPI

### 5.3.1 Découpage en bloc

La PàC est composée d'éléments en forme de parallélépipèdes rectangles. Ces éléments correspondent aux différents blocs de la PàC comme l'anode, la cathode et les plaques séparant les cellules. On range dans un fichier **params** les informations sur la structure de la pile. On trouve tout d'abord, toutes les dimensions de la PàC. La taille des éléments, au travers des listes **blockSizeX**, **blockSizeY** et **blockSizeZ**. Ces listes permettent de définir la taille des éléments respectivement selon **X**, **Y** et **Z**. A l'aide de ces listes, on peut faire n'importe quel découpage en éléments de forme parallélépipède rectangle.

Par ailleurs, les dimensions de chaque bloc sont définis par des macros, cela permet de changer plus facilement les dimensions de chaque élément.

### 5.3.2 Composition des blocs

La composition de ces éléments est ensuite définie dans un tableau à trois dimensions. Chaque bloc est ainsi associé à un matériau spécifique. Les propriétés de chacun des matériaux utilisés sont définies dans un tableau **tMaterial**. La fonction **InitFuelCell** construit ce tableau en faisant alterner deux types de lignes pour la PàC. Le premier type de lignes concerne le plan traversé par les canaux des gaz et notamment celui de

l'eau de refroidissement. Le deuxième type de lignes est relatif au plan qui sépare deux canaux consécutifs. Notons par ailleurs, qu'afin de prendre en considération l'influence de l'environnement extérieur sur le comportement thermique de la PàC, celle ci est supposée entourée d'un volume fictif soumis à une température constante. Cette température est considérée comme condition aux limites du système PàC servant au calcul des conductances de références données dans Chapitre 3.

### 5.3.3 Découpage en volumes

La PàC est divisée en éléments de volumes dans lesquels on suppose que la température est identique en tout point du volume. Plus les volumes sont petits plus la précision obtenue est importante. Par contre la complexité est proportionnelle à la taille du problème d'où l'intérêt du calcul parallèle. Afin de pouvoir découper très finement le problème, on procède par un découpage paramétrable, c'est-à-dire que le découpage peut être plus important au niveau des endroits sensible, la membrane par exemple. Les tableaux **blockNBNodesX**, **blockNBNodesY** et **blockNBNodesZ** définissent la finesse de ce découpage. Notons que les propriétés de chaque matériau de la PàC sont stockées dans un tableau **tMaterial**.

## 5.4 Précalculation des coefficients d'échanges

### 5.4.1 Principe

La PàC est divisée en plusieurs blocs où chaque bloc représente une partie de la cellule (c'est-à-dire électrodes et membrane) et aussi les plaques bipolaires qui sont traversées par les canaux des gaz et notamment par le circuit de refroidissement à eau.

Pour chaque élément (c'est-à-dire bloc), la nouvelle température est calculée à partir de la formule suivante

$$\begin{aligned}
 T'_{x,y,z} &= T_{x,y,z}C_{self} + T_{x-1,y,z}C_{transfertXM} + T_{x+1,y,z}C_{transfertXP} \\
 &+ T_{x,y-1,z}C_{transfertYM} + T_{x,y+1,z}C_{transfertYP} \\
 &+ T_{x,y,z-1}C_{transfertZM} + T_{x,y,z+1}C_{transfertZP}
 \end{aligned} \tag{5.2}$$

On construit alors un fichier "Fuel\_cell\_infos" pour calculer les différents coefficients de transfert, à savoir C\_self, C\_transfertXM, C\_transfertXP, C\_transfertYM,

`C_transfertYP`, `C_transfertZM`, `C_transfertZP`.

### 5.4.2 Structure de stockage

Pour ne stocker que les coefficients utiles au calcul, une structure de données a été définie. Lorsque l'on est au sein d'un même matériau, il n'est pas nécessaire de stocker tous les coefficients pour chaque volume. A chaque interface entre deux blocs seuls deux coefficients seront stockés et pour désigner respectivement un seul au sein d'un bloc.

Il y a donc trois systèmes de coordonnées

- Le bloc.
- Les coefficients.
- Le volume.

Et on a aussi les différentes listes suivantes :

- Les listes **PackedListX**, **Y** et **Z** désignant le nombre de blocs concernés par chaque coefficient.
- Les listes **ReversePackedListX**, **Y** et **Z** qui permettent à la fonction "Packed-CoordToBlockCoord " de passer des coordonnées de coefficients en des coordonnées de blocs.
- Les listes **PackedListX**, **Y** et **Z** qui sont utilisées pour passer rapidement de coordonnées de volumes à celles des coefficients.

Une fois que ces listes sont constituées, un tableau à trois dimensions est alloué pour stocker les coefficients qui sont calculés par la fonction **ComputeBlockCoeff**.

## 5.5 Calcul distribué

Suite au pré-calcul des coefficients, le calcul de la simulation proprement dit peut commencer. Pour cela des tableaux contenant les températures doivent d'abord être alloués.

### 5.5.1 Allocation des tableaux

Un tableau à trois dimensions est attribué à chacun des nœuds afin de contenir les températures des volumes. La PàC est subdivisée selon l'axe **X**. Chaque nœud en reçoit

une partie de ce tableau. Ce sont les fonctions **ComputeLocalMatrixOffset** et **ComputeLocalMatrixSize** qui calculent la position et la taille du tableau de température alloué à chaque nœud. Afin d'avoir des indices cohérents à travers tout le cluster, des fonctions d'allocation de tableaux à trois dimensions avec un décalage ont été créés. Ces fonctions utilisent l'arithmétique des pointeurs afin d'avoir des tableaux qui ne commencent pas à l'indice "0". Ce principe est étendu sur les tableaux à trois dimensions.

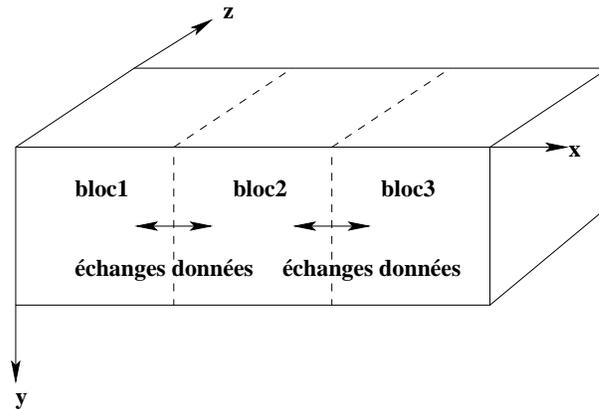


FIGURE 5.4 – Répartition des données sur les nœuds et système de données.

Une fois le tableau de températures alloué, il est initialisé avec les températures définies dans la table **tMaterial**.

### 5.5.2 Transfert et Calcul parallèle

Lorsque les températures sont initialisées à la valeur de fonctionnement de la PàC, le calcul parallèle peut commencer. Afin de pouvoir effectuer les transferts de données entre les nœuds en même temps que les calculs sont effectués, les données à transférer sont calculées en priorité dans la fonction **ComputeDataToExchange**. Lorsqu'elles sont calculées, le transfert débute à l'aide de la fonction **ExchangeResults**. Cependant, le reste des données est calculé par la fonction **ComputeStandart**. Avant d'entamer une future itération, une vérification est faite pour s'assurer que les transferts nécessaires sont terminés. Cette vérification s'effectue à l'aide de la fonction **ExchangeResultsWait**.

### 5.5.3 Transfert sans recopie

Le tableau des températures a été découpé selon l'axe **X** afin que les données à transmettre (tranche **(Y,Z)** du tableau) soient contiguës en mémoire. Ainsi il est possible de faire l'envoi sans avoir à recopier les données au préalable dans un buffer.

### 5.5.4 Echange des données durant le calcul

De la même façon pour éviter des recopies inutiles après une itération, seul le pointeur vers les anciennes valeurs est échangé avec celui pointant vers les nouvelles valeurs. Ainsi le calcul peut continuer sans que les nouvelles valeurs soient recopiées dans le tableau des anciennes valeurs.

### 5.5.5 Réduction du nombre de transfert

Dans le cas des matrices de petites dimensions, une itération est très rapidement calculée. La fréquence des transferts sur le réseau devient donc très importante et elle limite les performances du système. Il devient donc nécessaire de réduire le nombre de transfert sur le réseau. Afin de réduire ce nombre de transfert, une restriction des échanges entre processeurs aux seuls instants **ExchangeDiviser** (le nombre d'itération nécessaire pour faire l'échange entre les différents bloc de la cellule). Pour cela, il est nécessaire que chaque nœud calcule  $\frac{\text{ExchangeDiviser}(\text{ExchangeDiviser}+1)}{2}$  plans (y, z) en plus, cela augmente la charge du processeurs mais permet de lever la limitation imposée par le réseau.

## 5.6 Optimisation de la simulation

### 5.6.1 Répartition de la charge

Rappelons que la performance de la simulation est liée directement à la vitesse d'exécution de la simulation elle-même. Un problème de convergence peut alors prendre place dans le cas où le système physique est régi par deux phénomènes qui n'évoluent pas forcément à la même échelle de temps. Concernant la pile, les calculs sont plus importants quand il s'agit de certaines zones comme c'est la membrane et les gaz d'alimentation. En effet, le processeur de transfert de masse et de chaleur dans la partie fluide de la PàC est plus lent en comparaison avec le processus de la conduction thermique dans la partie solide de la pile. Ce déphasage de propagation de la chaleur rend les calculs plus lents car le cluster est limité par le nœud le plus lent du réseau nodal. Les nœuds liés à ces parties sont donc plus lents et ralentissent l'ensemble du système. Une façon d'y remédier consiste à allouer un tableau de températures plus grand que nécessaire. Ainsi, les nœuds calculeraient leur charge sur un certain nombre d'itérations et le problème serait redistribué de façon plus équilibrée.

### 5.6.2 Changement de granularité

Une autre façon d'accélérer la convergence des calculs, consiste à changer progressivement la taille des éléments de volumes durant les calculs. La démarche consiste à initialiser les simulations avec un maillage grossier. Ainsi on associe un nœud par bloc pour obtenir une approximation de la solution (c'est-à-dire la valeur de la température) qui sera utilisée pour le reste des calculs (voir FIGURE 5.5).

Nous pouvons ainsi résumer le déroulement de cette procédure par les étapes suivantes

- **Etape 1** : Initialiser les calculs avec un maillage grossier.
- **Etape 2** : Effectuer les calculs jusqu'à convergence.
- **Etape 3** : Réaliser une interpolation des résultats pour un maillage fin grain.
- **Etape 4** : Reprendre les calculs à partir de l'étape 2.

L'interpolation de la température est donnée par la formule suivante

$$T' = \frac{\sum_i (T_i \times V_i)}{V} \tag{5.3}$$

où  $V$  désigne le volume du nœud fin grain et il est calculé par la formule suivante

$$V = \sum_i V_i \tag{5.4}$$

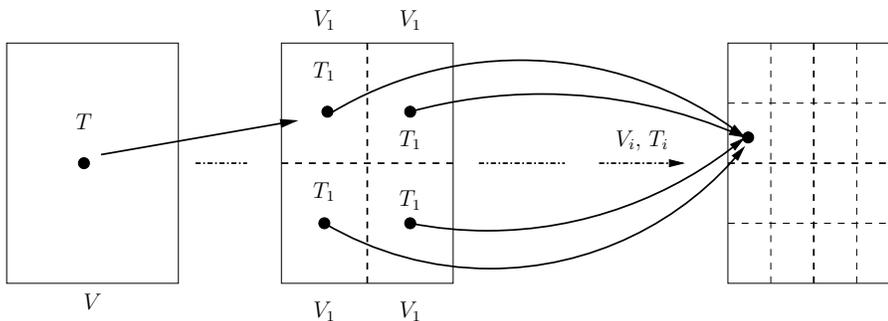


FIGURE 5.5 – Changement de granularité.

## 5.7 Interface de simulation dédié

### 5.7.1 Description de l'interface

Afin de concevoir une cartographie de la température de la PàC, nous avons élaboré un outil que nous avons appelé J-CELL. Cet outil programmé sous JAVA nous donne la possibilité de visualiser et d'extraire en tout point et suivant le nombre d'itérations la température du stack y compris celle des gaz d'alimentation. Cette interface est composée des modules suivants (voir [FIGURE 5.6](#))

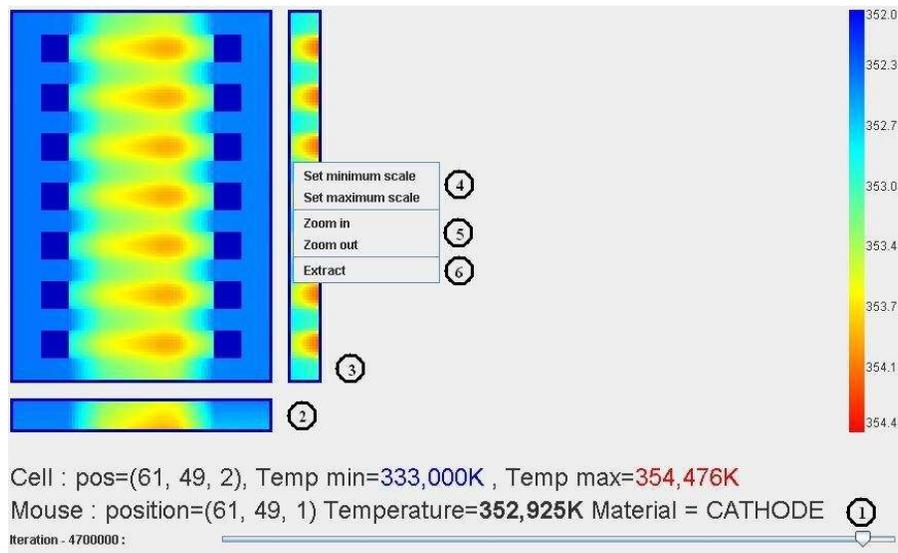


FIGURE 5.6 – Modules de l'interface J-CELL.

#### 1- Module barre de defilement

A l'aide de la barre de defilement ①, on peut suivre le comportement thermique de la PàC sur l'interface en fonction du nombre d'itérations ce qui donne un aspect dynamique aux champs des températures. Ce moyen nous permettra aussi de voir l'évolution de la température du stack avec les réactions exothermiques dans les zones réactives.

#### 2- Modules plan (x,y) et plan (y,z)

Ces modules ② et ③ permettent avec un simple click avec la souris du clavier de visualiser le champ des températures pour une coupe des plans indiqués à une position donnée.

### 3- Set minimum scale et Set maximum scale

Cette option ④ permet de changer l'échelle des températures afin de mieux voir les comportements des températures des gaz d'alimentation et de l'eau de refroidissement.

### 4- Zoom in et Zoom out

L'option ⑤ permet de changer la taille de la cellule pour une meilleure visualisation.

### 5- Extract

Ce module ⑥ est très important, il nous permet d'extraire les valeurs des températures en n'importe quel point de la PàC en vue de tracer des courbes.

## 5.7.2 Exploitation des résultats

Au bout d'un certain nombre d'itérations, toutes les données sont rassemblées sur le nœud principal pour pouvoir être exploitées. Afin de visualiser la température en chaque point de la PàC, nous avons généré un module d'images. Chaque volume de la pile est traduit par un pixel sur une image. Par ailleurs, la température est codée à l'aide d'une échelle de température.

Comme le montre [FIGURE 5.6](#), on peut visualiser n'importe quel point du stack de la PàC en se servant de la souris. Ainsi, pour chaque cellule de la PàC, nous pouvons obtenir les informations suivantes

#### 1- Cell : pos

Définit la position de cellule dans le stack et notamment la position du point par rapport à la profondeur suivant l'axe z.

#### 2- Mousse : position

Donne les valeurs de la température à l'endroit où la souris est pointée. Ceci nous permettra de cibler les points chauds de la PàC.

#### 3- Material

Avec le pointeur de la souris, nous pouvons aussi nous situer dans la cellule (plaque, électrodes, membrane, gaz, eau).

#### 4- Temp min et Temp max

l'interface affiche aussi la valeur minimale et la valeur maximale de la température dans le stack.

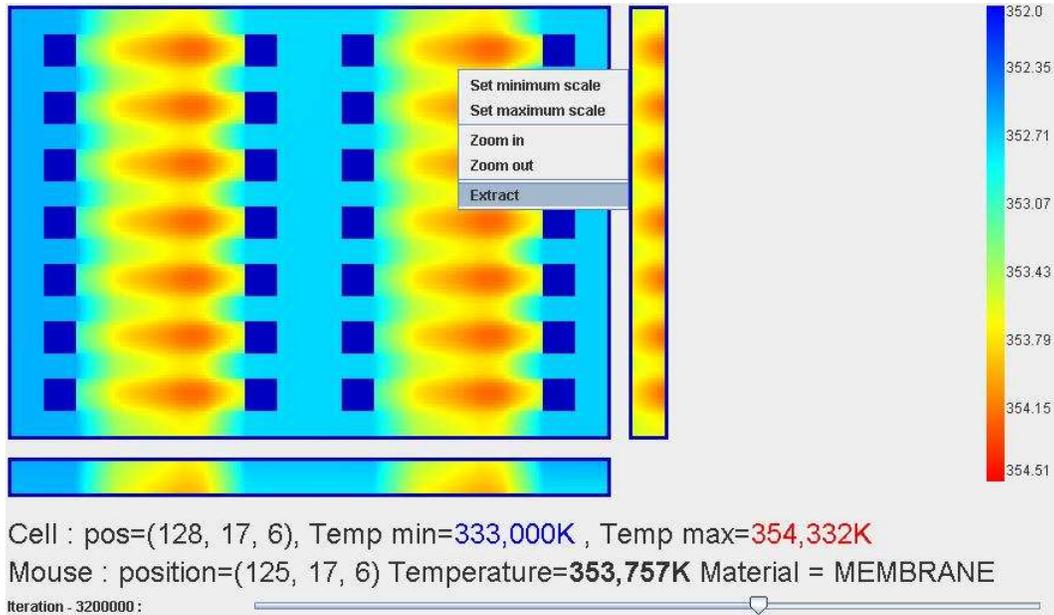


FIGURE 5.7 – Interface J-CELL : cas d’un stack à deux cellules séparées par un canal à eau.

## 5.8 Performances du modèle nodal global

### 5.8.1 Simulation en séquentiel

#### 5.8.1.1 Transformation du modèle

Le modèle décrivant le comportement thermique de la PàC est écrit sous la forme du système d’équations (3.3). La matrice  $G(i, j)$  est une matrice carrée creuse et à bandes, dont le nombre de bandes dépend du nombre de voisins que peut avoir un nœud du réseau nodal.

La PàC est supposée être composée en éléments de volume de températures supposées homogènes. Une matrice 3D a été construite représentant les échanges thermiques entre les différents éléments de volumes suivant les trois directions ( $\mathbf{X}, \mathbf{Y}, \mathbf{Z}$ ). La PàC est donc assumée être constituée d’un nombre de couches  $\mathbf{N}$  suivant la coordonnée  $\mathbf{Z}$  où chaque plan est représenté par une matrice de nœud  $\mathbf{G}(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ . On désigne par  $\mathbf{p}$  le nombre de nœuds suivant l’axe  $\mathbf{X}$  et par  $\mathbf{q}$  le nombre de nœuds suivant  $\mathbf{Y}$ .

Afin de simplifier les calculs, nous avons transformé la matrice 3D obtenue en une matrice 2D. Cette nouvelle matrice est construite en respectant les étapes suivantes

- Si  $|i-j|=1$  on place le nœud voisin suivant l’horizontale ( $\mathbf{X}$ ).
- Si  $|i-j|=\mathbf{p}$  on place le nœud voisin suivant la verticale ( $\mathbf{Y}$ ).

- Si  $|i-j|=p \times q$  on place le nœud voisin suivant la profondeur ( $\mathbf{Z}$ ).
- Un élément de la diagonale de la matrice  $G$ , représente la somme des éléments de chaque ligne de celle-ci.

Pour illustrer cette transformation, considérons l'exemple d'une cellule divisée suivant l'axe ( $\mathbf{Z}$ ) en trois couches. A chaque couche on affecte trois nœuds suivant l'axe ( $\mathbf{X}$ ) et trois nœuds suivant l'axe ( $\mathbf{Y}$ ). Pour chaque nœud on affecte un chiffre. On obtient ainsi la matrice montrée par [FIGURE 5.8](#).

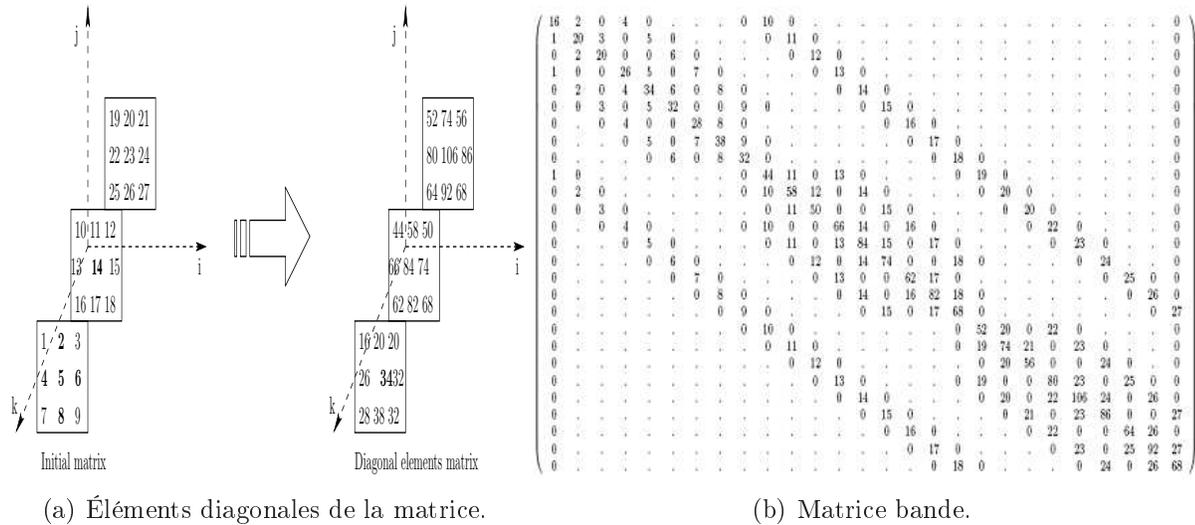


FIGURE 5.8 – Exemple de transformation.

### 5.8.1.2 Modèle sous forme compacte

Un raisonnement directe montre que la matrice ainsi obtenue est inversible. On peut alors écrire

$$\dot{T} = C^{-1}GT + C^{-1}B.$$

en posant

$$\begin{cases} C^{-1}G &= G_1 \\ C^{-1}B &= B_1, \end{cases}$$

nous obtenons

$$\dot{T} = G_1T + B_1$$

et en considérant le changement de variables suivant

$$T_1 = T + G_1^{-1}B_1,$$

Nous déduisons le système linéaire suivant

$$\dot{T}_1 = G_1 T_1. \quad (5.5)$$

### 5.8.1.3 Résolution par la méthode séquentielle

Il convient de préciser que la résolution numérique de ce système à l'aide d'un logiciel commercial classique par exemple MATLAB, devient plus coûteuse en terme de temps de calcul et nécessite un espace mémoire machine plus important, et en notament pour les matrices de grandes tailles. Ceci justifie notre recours au calcul parallèle comme nous le montre les résultats des simulations en séquentiel résumés dans TABLE 5.1. On constate l'accroissement du temps de simulation avec la taille de la matrice  $G_1$ .

TABLE 5.1 – Temps de simulation en séquentiel pour des matrices de différentes tailles.

Taille matrice (n*m*1)	104*32*4	155*47*5	311*107*9	425*165*11	429*223*10
Temps d'exécution	19 min	0h54 min	4 h 20 min	10 h 50 min	1 jour 15 h

## 5.8.2 Simulation avec MPI

### 5.8.2.1 Calcul du speedup

Considérons le réseau nodal  $N(n, m, \ell)$ , pour une phase de simulation donnée, on notera par  $t_{cp}$  le temps moyen de calcul en  $\mu s$  pour chaque opération. Pour les communications, nous assumons que chaque machine met  $t_c$  pour transférer les messages. L'algorithme exécute un nombre d'itérations et à chaque itération un nœud calcule la valeur de la température reliée aux voisins qui l'entourent. Le temps d'exécution sur une seule machine est calculé par la relation suivante

$$t_s = n.m.\ell.t_{cp} \quad (5.6)$$

Sur  $p$  machines, le réseau nodal  $N(n, m, \ell)$  est partagé en blocs qui sont distribués sur ces  $p$  machines. En chaque itération, la charge de travail par machine est  $n.m.\ell/p$ .

Chaque machine doit obtenir  $m.\ell$  valeurs de ses voisines, donc pour  $p$  machines le temps d'exécution est approximativement donné par la relation suivante

$$t_p = \frac{n.m.\ell.t_{cp}}{p} + 2.m.\ell.t_c \quad (5.7)$$

Le facteur 2 vient du fait que chaque machine  $i$  doit envoyer un message contenant les valeurs aux limites et à en recevoir un de chacun des deux voisines  $i - 1$  et  $i + 1$ . Pour la première et la dernière machine, cette constante vaut 1.

Par conséquent, le speedup prendra la forme suivante

$$S_p = \frac{p}{1 + 2 \cdot \frac{p}{n} \cdot \frac{t_c}{t_{cp}}} \quad (5.8)$$

L'équation (5.8) montre que le speedup ne peut pas excéder la valeur max  $p$  puisque nous considérons des réseaux nodaux de grandes tailles. Plus précisément, cette limite supérieure dépend seulement du rapport du nombre de machines  $p$  et de la taille  $n$  du réseau nodal, et nous avons  $n \gg p$ .

### 5.8.2.2 Performances de l'algorithme

Dans cette section, nous présentons les résultats de la simulation de la PaC obtenus en exécutant en parallèle l'algorithme MPI. Nous avons utilisé un réseau de 12 machines (Athlon XP 2800+) reliés ensemble par un réseau Ethernet LAN de 100 Mb.

L'algorithme de la simulation exécute un certain nombre d'itérations avec un pas donné. Dans chaque étape  $k$ , chaque nœud  $i$  du réseau nodal calcule la température liée à ses nœuds voisins selon l'équation (5.9), dérivée de l'équation (3.3)

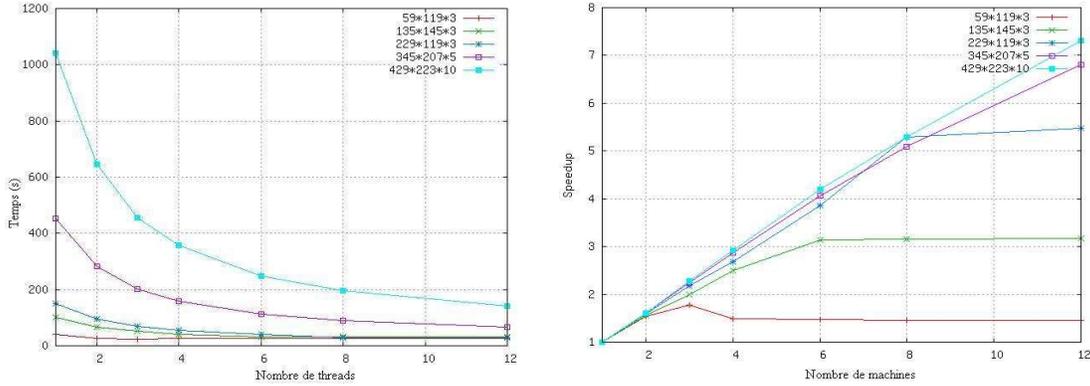
$$\frac{T_i[k + \delta t] - T_i[k]}{\delta t} = \sum_j g_{ij} T_j[k] + b_i[k] \quad (5.9)$$

où  $g_{ij}$  sont les entrées de la matrice  $G$ .

Notons que les mesures du temps sont réalisées à l'intérieur du code. Les performances sont évaluées en comptant le nombre d'opérations flottantes pour chaque processeur. L'accélération (speedup) et l'efficacité se calculent à partir des temps du code séquentiel et du code parallèle considéré.

FIGURE 5.9-a donne le speed up obtenu pour différentes tailles de la matrice du réseau nodal, exprimées en kB. Les résultats de cette courbe montrent qu'avec l'utilisation

de douze processeurs (machines), la simulation en parallèle met 39.2 heures. Cependant, le même réseau nodal simulé en séquentiel met 287.7 heures pour un speed up de 7.3 soit une efficacité  $E$  ( $E = S/P$ ) de 61 %. Ceci montre l'apport et l'intérêt de l'exécution de l'algorithme en parallèle qui atteint un speed up linéaire donc optimal (voir [FIGURE 5.9-b](#)).



(a) Temps des simulations sur un cluster de processeurs avec MPI.

(b) Speedup des simulations sur un cluster de processeurs avec MPI

FIGURE 5.9 – Performances de MPI sur un cluster Athlon XP 2800+.

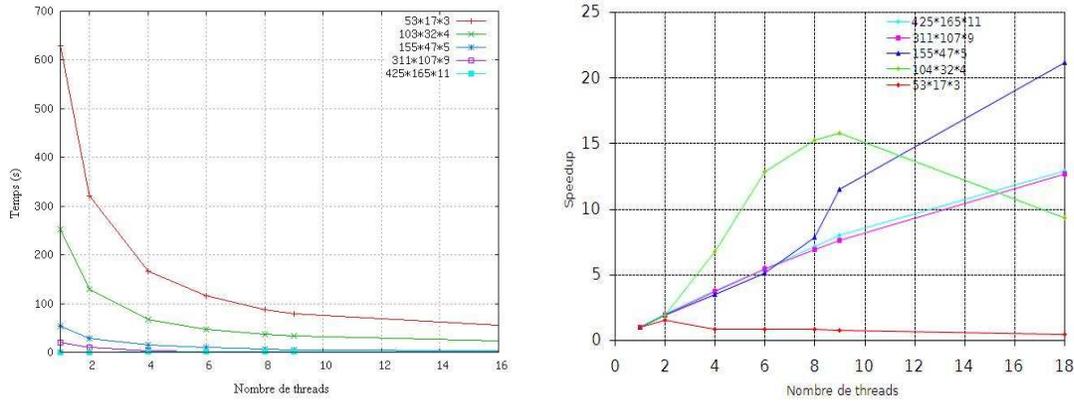
Il est à noter que la convergence des simulations est obtenue après 3670 000 itérations. Cependant, pour les matrices de petites tailles (ici,  $59 \times 119 \times 3$ ), la convergence est atteinte beaucoup plus rapidement que dans le cas des matrices de grandes tailles (ici,  $429 \times 223 \times 10$ ). Pour cette raison, et en vue de la comparaison des résultats obtenus pour les différentes tailles du problème, les courbes des performances (voir [FIGURE 5.10-b](#)) ont été tracées après 20 000 itérations.

Par conséquent, en terme du temps d'exécution, l'exécution parallèle du réseau nodal présente de meilleurs résultats d'autant plus quand le nombre de processeurs augmente avec la taille du réseau nodal. Cependant, l'utilisation d'un nombre important de processeurs pour des réseaux nodaux de petite taille dégrade les performances dès lors que les communications entre les processeurs deviennent plus coûteuses que les calculs eux mêmes (voir [FIGURE 5.10-b](#)).

Notons aussi, qu'afin d'améliorer les performances, nous avons réalisé des simulations sur un réseau plus rapide constitué de 9 processeurs de  $1.8\text{GHz}$  Xeon et de 512 MB de RAM [[Salah et al., 2007b](#)]. Ces processeurs sont reliés par un réseau Myrinet de grande vitesse, d'une fréquence de  $2.6\mu\text{s}$  et d'une bande de  $2\text{GB/s}$ .

Les résultats provenant des [FIGURE 5.10-a](#) et [FIGURE 5.10-b](#) sont intéressants. En effet, pour les matrices de tailles  $(155 \times 47 \times 5)$  et  $(104 \times 32 \times 4)$ , nous constatons que le

speed up est plus important que le nombre de processeurs. Ce speed up (accélération) s'appelle un super linéaire speedup. Il se produit parce que les blocs associés à chaque nœud se placent dans le cache mémoire du processeur (processors' cache). Ceci réduit le temps des calculs (c'est-à-dire  $T_{cp}$ ) et permet ainsi d'obtenir un speedup supérieur au nombre de processeurs impliqués.



(a) Temps des simulations pour différentes tailles de matrice sur le cluster Myrinet avec MPI.

(b) Speedup pour différentes tailles de matrice sur le cluster Myrinet avec MPI.

FIGURE 5.10 – Performances de MPI sur le cluster Myrinet.

### 5.8.2.3 Apport de la granularité

On constate bien qu'en changeant de granularité, l'ordre de grandeur des températures varie de quelques centièmes de degrés. Il passe de  $354.56 K$  pour une granularité de 1 à une valeur de température de  $354.79 K$  pour une granularité de treize soit une différence de  $0.43 K$  comme nous le montre [FIGURE 5.11](#). Néanmoins, la convergence est atteinte pour chaque type de granularité.

## 5.9 Simulation avec UPC

### 5.9.1 Distribution du réseau nodal sur les machines

Afin de traiter le réseau nodal en parallèle, la structure de la PàC est distribuée sur des machines où chaque machine a l'affinité d'un ensemble de plans contiguës. Pour améliorer l'équilibre de la charge, la partition est non homogène, autrement dit, le nombre de machines associé à chaque plan dépend de la charge de calcul que l'on souhaite attribuer

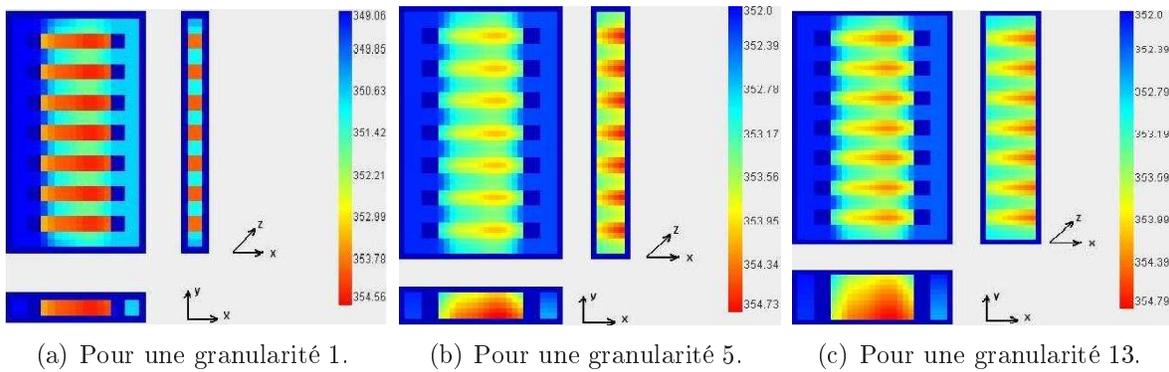


FIGURE 5.11 – Evolution de la température avec les variations de la granularité.

à ce plan. L'échange thermique entre ces plans est assuré par un simple accès aux plans voisins grâce à l'espace partagé entre ces différents plans.

Notons que la répartition 1D n'encoure pas un coût de temps de simulation important du moment que les plans sont contiguës dans la mémoire de transfert. Cette répartition nous offre une bonne exécution même pour un nombre limité de machines (processeurs).

Cependant, pour les clusters de grande échelle, les répartitions 2D ou 3D doivent être considérées afin de réduire la taille et la quantité de données échangées lors des communications entre les processeurs voisins et par conséquent réduire les coûts des communications.

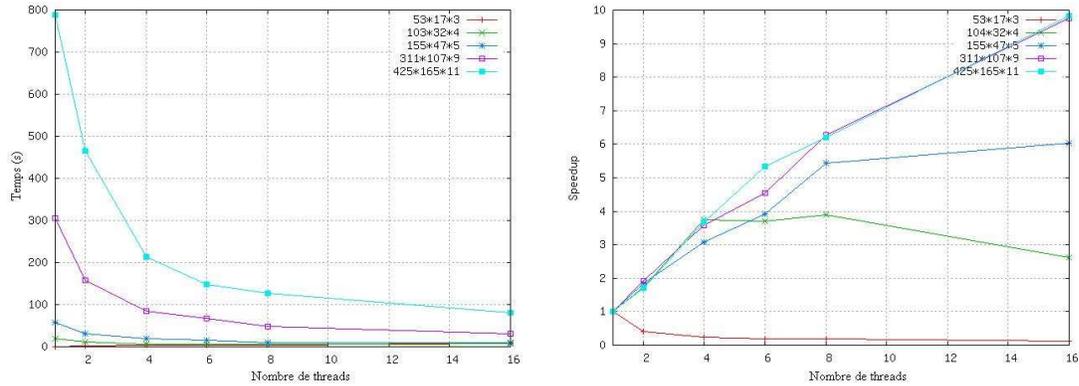
### 5.9.2 Performances de la simulation

Notons que les tests ont été réalisés en utilisant le compilateur de Berkeley UPC sur un faisceau de 8 nœuds. Chacun des deux, compilateur et faisceau, contient un processeur de 1.8 Ghz Xeon et 512 mb de RAM. Les nœuds sont reliés ensemble avec un réseau Myrinet à grande vitesse qui fournit une fréquence de  $2.6 \mu s$  et une bande de largeur de  $2 GB/s$  [Salah *et al.*, 2007b].

Notons aussi que pour améliorer l'exécution du programme en parallèle sur UPC, les codes ont été optimisés en privatisant les accès locaux à la mémoire partagée et en agrégeant les communications.

FIGURE 5.12-a montre le temps de calcul nécessaire pour l'exécution de 20000 itérations en fonction du nombre de machines (processeurs) utilisées et la taille du réseau nodal.

Le speedup est donné dans FIGURE 5.12-b. Pour de larges matrices, on constate que le speed up correspondant varie linéairement avec le nombre de machines. Un gain sur le speedup d'environ 10 fois sur ces matrices ainsi réalisé. Pour les matrices de plus petites tailles, les coûts de temps de communications se développent plus rapidement et limitent ainsi les performances.



(a) Temps des simulations pour différentes tailles de matrice sur le cluster Myrinet avec UPC.

(b) Speedup pour différentes tailles de matrice sur le cluster Myrinet avec UPC.

FIGURE 5.12 – Performances de l'UPC sur le cluster Myrinet.

## 5.10 Performances du modèle FDM

L'objectif de cette partie est de comparer l'efficacité de la méthode des différences finies avec l'approche nodale. Nous avons donc repris le même code de calcul appliqué à la méthode nodale auquel nous avons adapté l'approche des différences finis.

Par ailleurs, afin d'avoir des résultats comparables, nous avons effectué les calculs dans les conditions similaires à celles appliquées pour la méthode nodale (Structure de PàC, taille de matrice et  $\Delta t$  proches).

Il est à rappeler qu'avec la méthode des différences finies, le système est subdivisé suivant les dimensions du problème en nœuds, où la dérivée en chacun de ces nœuds est approchée par l'approximation de Taylor. La valeur de la variable recherchée est évaluée à l'instant  $n + 1$  par un schéma explicite connaissant la valeur à l'instant  $n$ , la convergence est obtenue après un temps relativement court, en revanche, elle exige un maillage régulier.

En outre, avec l'approche des différences finies, la résolution de deux types d'équations est nécessaire. D'une part, l'équation de la conduction thermique dans la partie

solide Eq. (5.10), et d'autre part l'équation donnant le transfert thermique suite aux mouvements du fluide dans les canaux des gaz et notamment dans le circuit de refroidissement Eq. (5.11).

$$\rho c p_s \frac{\partial T_s}{\partial t} = k_s \nabla^2 T_s + P_s \quad (5.10)$$

$$\rho c p_f \frac{\partial T_f}{\partial t} = \dot{m} c p_f \nabla T_f \quad (5.11)$$

La convergence de la solution est alors obtenue en équilibrant les flux aux interfaces solide-fluide soit

$$k_s \nabla T_s = H S (T_s - T_f). \quad (5.12)$$

La discrétisation selon un schéma explicite de l'équation (5.10) permet d'écrire

$$\begin{aligned} \rho c p_s \frac{(T_s^{n+1} - T_s^n)}{\Delta t} &= k_s \left( \frac{T_s^n(i+1) - 2T_s^n(i) + T_s^n(i-1)}{\Delta x^2} \right. \\ &+ \frac{T_s^n(j+1) - 2T_s^n(i) + T_s^n(j-1)}{\Delta y^2} \\ &\left. + \frac{T_s^n(k+1) - 2T_s^n(i) + T_s^n(k-1)}{\Delta z^2} \right) \end{aligned} \quad (5.13)$$

D'une façon analogue on discrétise l'équation (5.11), et on obtient

$$\begin{aligned} \frac{(T_f^{n+1} - T_f^n)}{\Delta t} &= \dot{m}_x c p_f \frac{T_f^n(i+1) - T_f^n(i-1)}{\Delta x} \\ &+ \dot{m}_y c p_f \frac{T_f^n(j+1) - T_f^n(j-1)}{\Delta y} \\ &+ \dot{m}_z c p_f \frac{T_f^n(k+1) - T_f^n(k-1)}{\Delta z} \end{aligned} \quad (5.14)$$

### 5.10.1 Simulation du comportement thermique d'une cellule

Il est à noter que les calculs ont été effectués sur un seul PC possédant un processeur Intel (R) Pentium (R) M processor 1.86 GHz. On désigne par **diff**, la somme des différences de températures relative au réseau nodal. Celui-ci converge bien avec l'approche

des différences finis et les résultats de simulation obtenus sont similaires à ceux obtenus avec la méthode nodale (FIGURE 5.13). Néanmoins, il converge relativement moins vite que celui obtenu par l'approche nodale. En effet, au bout de 108 minutes, nous avons obtenu un **diff** total de 7805.02 K. La taille de la matrice étant  $101 * 225 * 9 = 204525$ . Ceci nous donne un **diff** par point de  $7805.02/204525 = 0.00382$ . Finalement, pour obtenir un **diff** de 0.001, il faudrait  $3.62 * 104$  min soit 25 jours. Cette valeur est obtenu par une fonction d'approximation (voir Eq. (5.15)) donné par le tracé de la courbe du **diff** (voir FIGURE 5.14).

$$y = 13834.3 - 1298.48 \ln(x - 2.10725) \quad (5.15)$$

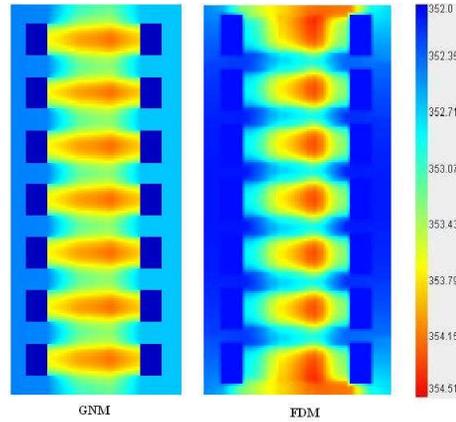


FIGURE 5.13 – Champs des températures dans une cellule.

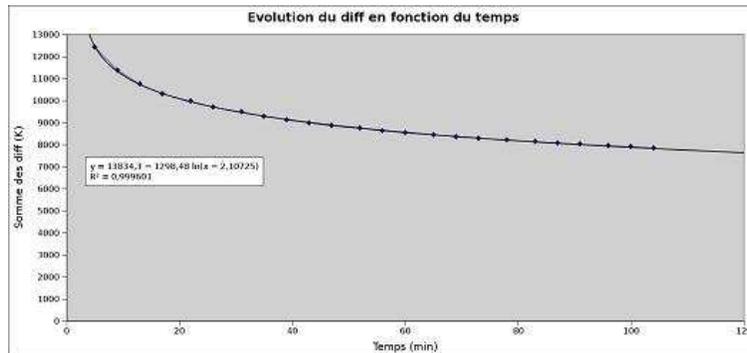


FIGURE 5.14 – Evolution du **diff** en fonction du temps.

### 5.10.2 Simulation du stack

Sur la courbe donnée par [FIGURE 5.15](#), on peut voir la tendance de la somme du **diff** de tous les points du réseau nodal en fonction du temps. On constate logiquement que le système converge de plus en plus lentement. Au bout de 1200 minutes (20 heures), nous avons obtenu un **diff** total de 21166.71 K. Or la taille de la matrice est de  $386 * 195 * 9 (= 677430 \text{ points})$ . Le **diff** en chaque point est donc de  $21166.71/677430 = 0.031 \text{ K}$ . Pour obtenir le **diff** par point désiré ( $0.001 \text{ K}$ ), nous pouvons déterminer le temps de calcul à l'aide de l'équation suivante

$$y = 70589.9 - 7021.08 \ln(x - 14.035) \quad (5.16)$$

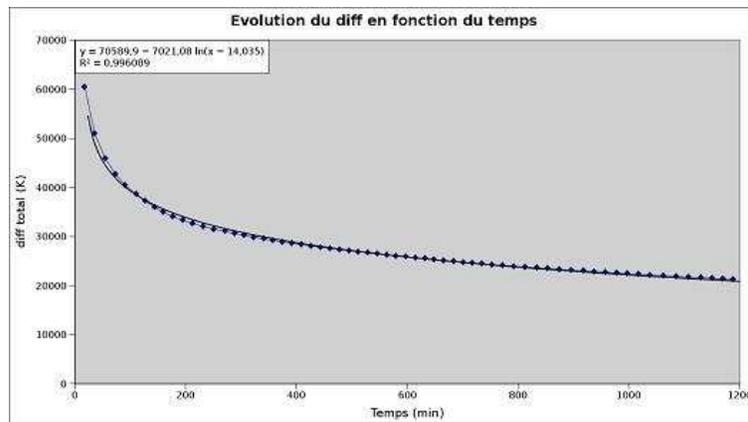


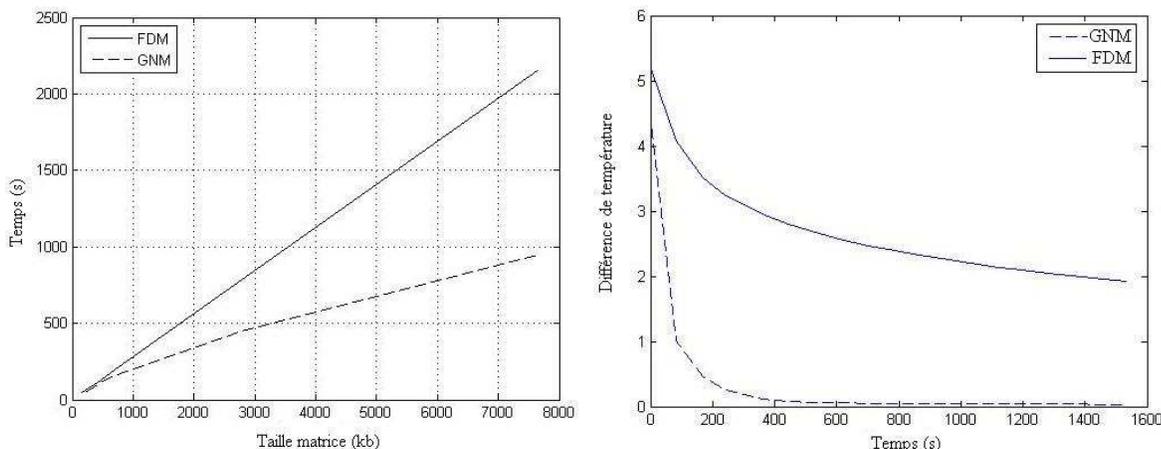
FIGURE 5.15 – Evolution du **diff** en fonction du temps : cas d'un stack de 4 cellules avec un refroidissement au milieu.

Nous devrions obtenir le **diff** désiré de 0.001 au bout de 352 heures soit environ un peu moins de 15 jours. On constate de la méthode des différences finies est peu plus lente que la méthode nodale. En effet, avec l'approche nodale, on est parvenu au même résultat en 12 jours seulement.

En conclusion, le niveau de précision est atteint plus rapidement avec la méthode nodale et on visualise le phénomène beaucoup plus rapidement. Avec la méthode des différences finies, il est nécessaire d'attendre que les échanges se produisent au niveau des interfaces. Un autre inconvénient de la méthode des différences finies est qu'elle nécessite de positionner des points au niveau de toutes les interfaces entre les différents matériaux alors que la méthode nodale est moins restrictive sur ce point.

## 5.11 Comparaison entre le modèle nodale et le modèle des différences finies

Les figures [FIGURE 5.16-a](#) et [FIGURE 5.16-b](#) montrent bien que les simulations convergent plus rapidement avec l'approche nodale (GNM) adaptée qu'avec la méthode des différences finies (FDM). En effet, avec la méthode des différences finies, la précision souhaitée sur la température (c'est-à-dire 0.001) est obtenue approximativement après 352 heures, légèrement inférieur à 15 jours. Cependant, avec l'approche nodale on atteint ce résultats seulement après 12 jours (voir [FIGURE 5.16-b](#)).



(a) Temps des simulations en fonction de la taille de la matrice pour GNM et FDM. (b) Evolution du **diff** en fonction du temps avec GNM et FDM.

FIGURE 5.16 – Comparaison entre GNM et FDM.

## 5.12 Comportement thermique de la pile

### 5.12.1 Comportement d'une cellule

Comme il a été mentionné dans le premier chapitre, la température de la cellule évolue lors du fonctionnement de la PàC. Les résultats de simulation (voir [FIGURE 5.17](#), [FIGURE 5.18](#), [FIGURE 5.21](#)) montrent l'existence d'un gradient de température et en particulier dans la zone de réaction côté cathode. Ce résultat a été obtenu par Djilali [[Djilali et Lu, 2002](#)] et Ramousse [[Ramousse et al., 2005](#)] en utilisant les techniques courantes de la résolutions de l'équation de la chaleur.

Cependant, il y a lieu de noter l'existence de deux types courbes de températures dans la cellule. Comme le montre [FIGURE 5.17](#)<sup>8</sup>, la section longitudinale de la cellule représentée par la ligne  $C_1$  surface est plus chaude par rapport à la section traversée par la ligne  $C_2$ . La zone de l'interface membrane/électrodes représente la zone la plus chaude. Ce phénomène est due à la chaleur libérée par les réactions. Donc, nous constatons que la surface  $A'$  (resp  $A$ ) est plus chaude que la surface  $B$  (resp  $C$ ).

Ce phénomène déjà observé par la microscopie infrarouge comme le montre l'étude donnée en [[Mayer, 2004](#)] et qui prouve que ceci revient principalement à la nature du matériau de la cellule et est lié principalement à la conductivité thermique des plaques. Il est à noter que les plaques bipolaires présentent une bonne conductivité électrique ce qui les rend de bons conducteurs thermique. Par ailleurs, la surface d'échange entre les gaz et les plaques est relativement supérieur à celle entre la cellule et les gaz. Ces deux facteurs permettent de créer deux lignes de températures comme il est illustré par les résultats de la simulation (voir [FIGURE 5.17](#)).

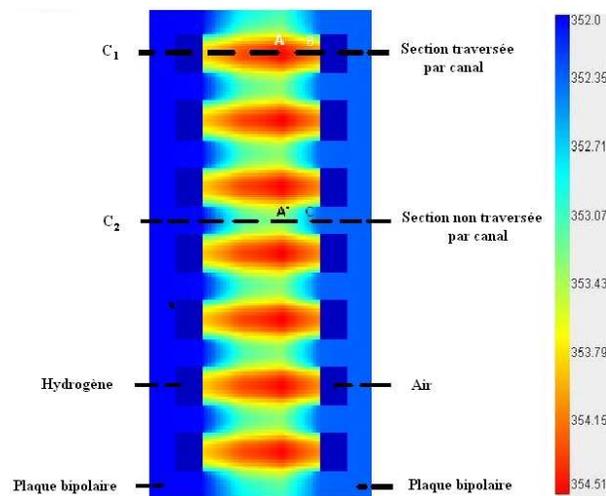


FIGURE 5.17 – Visualisation du champs de température dans une cellule (logiciel J-CELL).

### 5.12.2 Effet du courant

Il a été mentionné dans le premier chapitre que les surtensions résultant des réactions exothermiques aux électrodes sont liées à l'intensité du courant débité par la PàC. Il est à noter que la simulation effectuée dans le cadre de ce travail confirme les résultats donnés dans la littérature (voir par exemple [[Djilali et Lu, 2002](#)] et [[Ramousse et al., 2005](#)]). Le

8. Cette figure a été générée par un programme réalisé sur l'interface J-CELL

fait de varier le débit des gaz, donc l'intensité du courant, induit une augmentation de la température de la PàC. Ainsi, la PàC qui doit répondre aux variations de charge voit sa température augmenter. L'intérêt de d'analyser le lien entre la température et la charge débitée par la pile est de pouvoir la maîtriser. FIGURE 5.18 montre bien cette dépendance courant-température. En effet, augmenter l'intensité du courant revient à augmenter la température du stack.

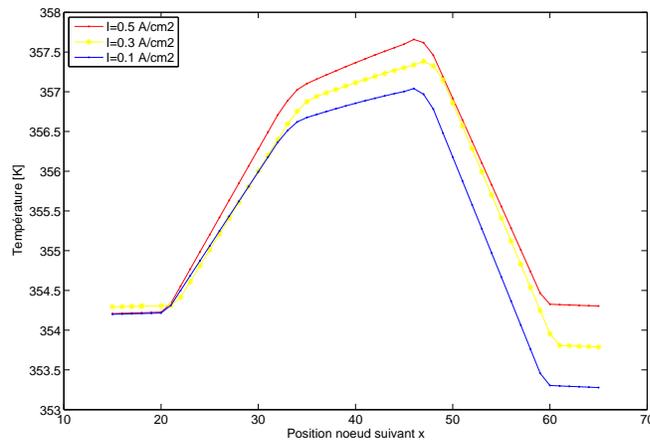


FIGURE 5.18 – Champ de températures pour une cellule lorsque les gaz sont préchauffés et humidifiés :  $\phi_a = 0.5$ ,  $\phi_c = 0.5$ ,  $T_{eau} = T_{H_2} = T_{H_{air}} = 343.K$ ,  $I$  de 1.5 à  $3Acm^{-2}$ .

### 5.12.3 Comportement du stack

On ne dispose pas de modèles dans la littérature qui traitent le stack complet. Récemment, dans [Shan et Choe, 2006] un modèle est proposé pour décrire le comportement thermique de chaque cellule de la PàC en régime dynamique. Ce type de modèle peut s'avérer pertinent vu que le contrôle du le fonctionnement thermique du stack revient à contrôler le fonctionnement de chaque cellule à part.

Les résultats de la simulation montrent bien que toutes les cellules ne fonctionnent pas thermiquement de la même façon. Ceci est dû principalement aux conditions sur les frontières de la cellule de la pile elle même. Ce constat a été aussi relevé par Gwang-Soo [Promislow *et al.*, 2005]. Le travail de Dumercy [Dumercy *et al.*, 2003, Dumercy, 2004] illustre bien ce fait. Par ailleurs, la position des canaux de refroidissement dans le stack peut avoir une influence sur la régulation de la température de fonctionnement de la pile à combustible. A ces deux paramètres s'ajoute la chaleur produite par perte de concentration

des réactifs principalement à la cathode. Cette quantité d'énergie perdue est transformée en chaleur qu'il faudra évacuer pour assurer un bon fonctionnement de la PàC.

Nous avons simulé le comportement thermique d'un stack d'une PàC formé par six cellules. Entre deux cellules voisines, un circuit à eau assure le refroidissement. Sur [FIGURE 5.19](#), la cartographie de la température du stack est visualisée. Celui-ci est soumis aux conditions de l'ambiance, et la première cellule du stack est soumise aux mêmes conditions que la dernière cellule. Par ailleurs, l'analyse du contour (voir [FIGURE 5.20](#))

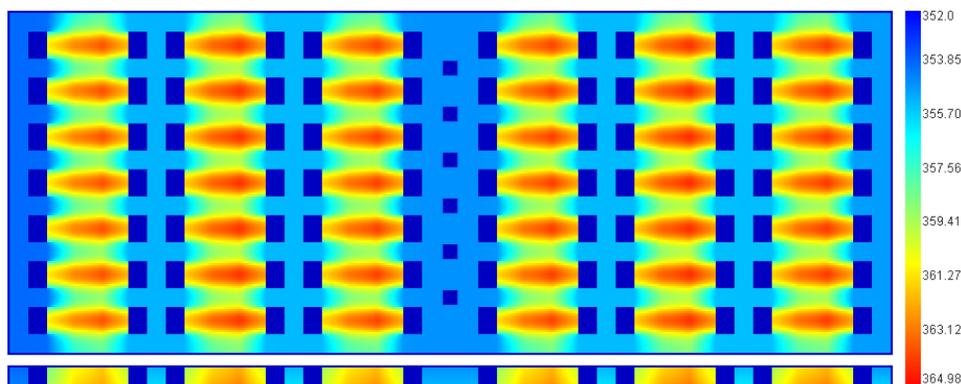


FIGURE 5.19 – Visualisation du comportement thermique d'un stack formé par six cellules séparées par un refroidissement à l'aide du logiciel J-CELL.

des températures du même stack conduit à des remarques suivantes. On constate que la première cellule est moins chaude que la dernière cellule du stack. Ceci est dû à la présence du refroidissement du côté cathode de cette cellule qui a tendance à évacuer le flux de chaleur vers le centre du stack où l'eau du refroidissement circule.

Tandis que la dernière cellule se voit son côté cathode soumis aux conditions de l'ambiance, la convection naturelle ne suffit plus pour la maintenir à la même température que la première. Par conséquent, la tension délivrée par la première cellule est plus élevée que celle produite par la dernière cellule.

Cependant, les cellules 3 et 4 délivrent une bonne tension si on les compare aux cellules 2 et 5. Ceci est dû à la présence du refroidissement (voir [FIGURE 5.21](#)).

Il est à noter que la température des cellules peut être baissée en variant la quantité d'eau qui circule dans le refroidissement et/ou en changeant la position de celui-ci.

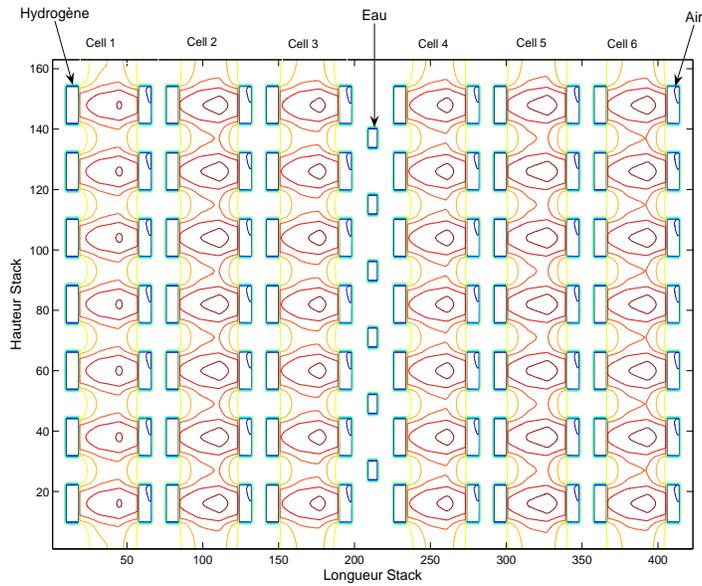


FIGURE 5.20 – Contour des températures pour un stack formé de 6 cellules séparées par un refroidissement.

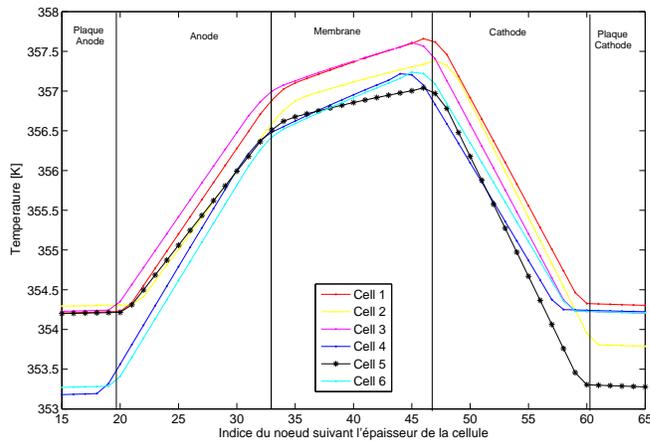


FIGURE 5.21 – Variation des températures dans le stack.

### 5.12.4 Température des gaz d'alimentation

Dans la simulation, nous nous sommes intéressés en particulier au rôle de la convection des gaz dans les canaux d'alimentation. Il existe plusieurs configurations de conduite d'alimentation allant de la configuration d'armature plate à la configuration ondulée ou encore à tubes endulés en 3D. Dans ce travail, nous avons adopté la configuration la plus simple pour des raisons de découpage de la cellule. Il s'agit de la configuration du type

d'armature plane. Il est à noter que s'agissant d'une géométrie de canaux constante, on traite le cas d'un écoulement stable, par conséquent le coefficient de convection global  $H$  est constant. Ce coefficient est obtenu par corrélation pour un écoulement laminaire dans une conduite.

Un des effets directs sur la cellule de la PàC, est le mouvement des gaz dans les canaux d'alimentation. La collision entre les molécules et les parois libère une quantité d'énergie faisant ainsi augmenter la température des gaz.

Par ailleurs, un gradient de température plus élevé est localisé à proximité des plaques bipolaires (voir [FIGURE 5.23-a](#)). Ceci peut s'expliquer par le fait que la conductivité thermique des plaques est supérieure à celle de la cellule. La quantité de chaleur produite dans la zone de réaction traverse la cellule par conduction.

L'air du canal cathode se comporte de la même façon que l'hydrogène du canal anode. Cependant, la température de l'air est plus grande que celle de l'hydrogène car la chaleur produite à la cathode est plus importante que celle produite à l'anode comme le montre [FIGURE 5.23-a](#) et [FIGURE 5.23-b](#).

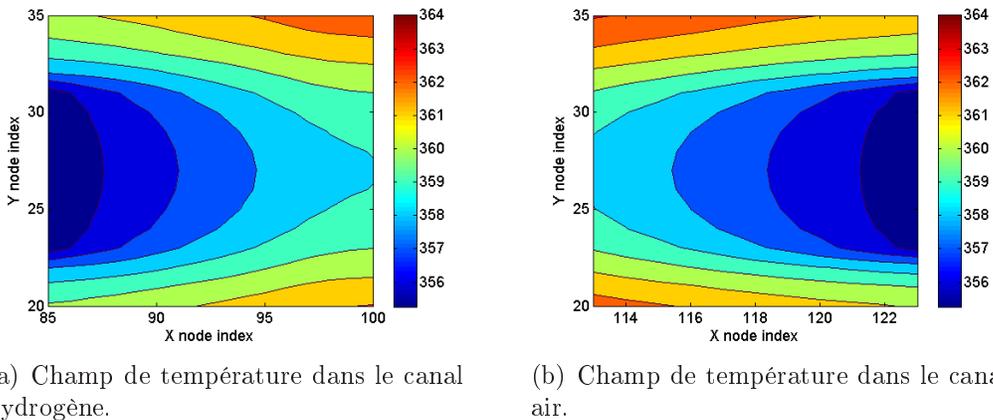
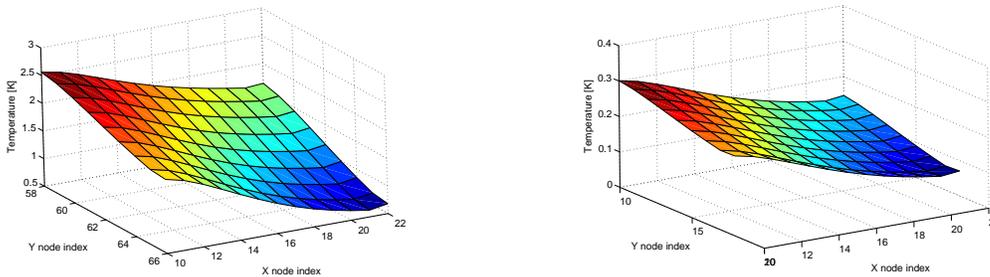


FIGURE 5.22 – Champ des températures dans les canaux d'alimentation.

Une autre conséquence de l'échange convectif est illustrée par la différence de température entre la ligne traversé par le canal de gaz  $C1$  et celle non traversée  $C2$ . On note ainsi un gradient de température entre l'entrée et la sortie du canal de 0.3 à l'anode et 2.5 à la cathode respectivement (voir [FIGURE 5.23](#) ).



(a) Différence de température entre l'entrée et la sortie du canal d'hydrogène. (b) Différence de température entre l'entrée et la sortie du canal d'air.

FIGURE 5.23 – Différence de température entre l'entrée et la sortie des canaux des gaz.

### 5.12.5 Intégration du refroidissement

Pour le refroidissement du stack de la PàC, il a été défini un cahier des charges. Ce cahier de charges respecte les contraintes suivantes

1. Température maximal de membrane.
2. Nombre de passage de circuit de refroidissement dans le stack, problème d'optimisation du circuit, coût de fabrication.
3. Quantité d'eau qui circule dans les canaux de refroidissement, dimensionnement des canaux, régulation de la pompe à eau, etc.

Notons par ailleurs, qu'afin de maintenir les cellules du stack à une température de fonctionnement raisonnable, entre deux cellules de la pile à combustible sont placés des canaux d'eau qui servent comme un fluide de refroidissement. [FIGURE 5.24](#) montre que cette stratégie est efficace pour baisser la température des cellules. En effet, en variant la quantité d'eau qui circule dans les canaux de refroidissement de  $2.5\text{ g/s}$  à  $4.5\text{ g/s}$ , la température des cellules passe de  $359\text{K}$  à  $358\text{K}$ . Ceci offre un gain de température de  $1\text{K}$ . Cette valeur peut être revue à la baisse en augmentant la quantité d'eau qui circule dans l'échangeur ; c'est le rôle de la commande du comportement thermique.

## 5.13 Conclusion

L'application de l'approche nodale, nous a permis de visualiser la distribution de la température dans le stack de la PEMFC. Les valeurs obtenues sont en concordance avec

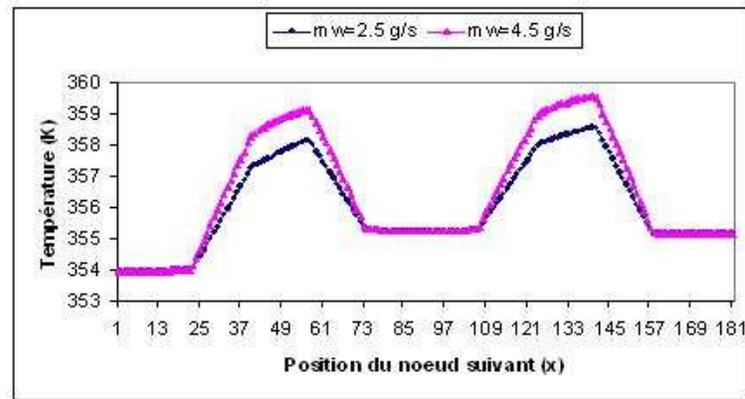


FIGURE 5.24 – Profils des températures pour deux cellules séparées par un canal eau :  $m_e = 2.5 \text{ g/s}$  et  $m_e = 4.5 \text{ g/s}$  respectivement.

les résultats de la littérature et traduisent bien l'effet exothermique des réactions aux électrodes. Nous avons ainsi pu décrire le phénomène thermique de la PàC sans passer par la représentation par les équations aux dérivées partielles (équation de la chaleur et équation de Navier-Stokes). Par ailleurs, la résolution de ces équations en utilisant la discrétisation par différences finies, donne des résultats identiques à ceux obtenus par l'approche nodale. Cependant, de point de vue coût de la simulation, l'approche nodale telle que nous l'avons appliquée, s'avère plus performante et plus adaptable au calcul parallèle. En effet, avec MPI, le coût d'exécution est relativement réduit par rapport au calcul séquentiel, avec MATLAB par exemple. Ce temps de calcul diminue avec l'augmentation du nombre de processeurs. Un autre élément que nous devrions tenir compte concerne la dépendance de la température au débit d'eau qui circule dans le circuit de refroidissement. Ceci relève de la régulation de la température du stack, autrement dit de la commande thermique de la PàC qui fera l'objet du chapitre 6.



# Chapitre 6

## Contrôle du comportement thermique de la pile

### 6.1 Introduction

Ce chapitre est dédié au problème du contrôle du comportement de la pile à combustible. L'objectif du contrôle est de commander le système par rétroaction. Il s'agit de réguler la température de la pile à une valeur de consigne désirée. La démarche adoptée est celle de l'utilisation de modèles sous forme d'équations différentielles. Plus précisément, on considère des modèles dont le principe est détaillé dans le chapitre 2. Puis, en développant explicitement l'expression de la capacité thermique on aboutit à des systèmes bi-linéaires de la forme

$$\dot{z} = Az + \sum_{i=1}^m u_i (B_i z + b_i) \quad (6.1)$$

$z \in \mathcal{R}^n$  est l'état du système,  $u = (u_1, \dots, u_m)^T \in \mathcal{R}^m$  est la commande,  $A$ ,  $B_i$  ( $i=1\dots m$ ) sont des matrices de dimensions convenables et  $b_i$  ( $i=1\dots m$ ) des vecteurs de  $\mathcal{R}^n$ .

La stabilisation par retour d'état du système (6.1) a suscité l'intérêt de plusieurs auteurs (voir [Mohler et Eds, 1973], [Chen et Tsao, 2000], [Bacciotti et Ceragioli, 2006], [Gutman, 1981], [Longchamp, 1980]). L'intérêt est dû au fait qu'un grand nombre de procédés réels peuvent être décrit par des modèles de nature bi-linéaire. En effet, cela concerne des processus tels des procédés nucléaires, thermiques, biologiques, socio-économiques, immunologiques ou chimiques (voir par exemple [Espana et Landau, 1978], [Mohler, 1973], [Koivo et Cojocanu, 1977]). Cependant, la commande des systèmes bi-linéaires (6.1) et

malgré leur structure simple, reste une question ouverte dans la littérature même pour les petites dimensions, le cas de dimension trois par exemple, ou dans le cas homogène à savoir

$$\dot{z} = Az + \sum_{i=1}^m u_i B_i z \quad (6.2)$$

Un certain nombre de résultats ont été établis essentiellement dans le cas où la dynamique libre, à savoir  $\dot{z} = Az$ , est stable (voir par exemple [Rayan et Buckingham, 1983], [Schemrod, 1978], [Jacobson, 1977]). Il convient de préciser que concernant le cas de la pile à combustible les systèmes sont de grandes dimensions et le modèle est de nature non-homogène (c'est-à-dire  $b_i \neq 0$  pour  $i = 1 \dots 3$ ). Par exemple, dans le cas des grandes puissances, la dimension du vecteur d'état est d'ordre douze. Par ailleurs, le système est naturellement instable, c'est-à-dire que certains valeurs propres de la matrice  $A$  sont à partie réelle strictement positive. Finalement, trop peu de résultats de la littérature peuvent être exploités directement pour le problème du contrôle thermique de la pile.

Ainsi, dans ce travail on focalisera sur la classe des systèmes bi-linéaires qui est issue uniquement de la pile à combustible. Notre démarche consiste à restreindre l'étude aux seuls modèles bi-linéaires décrivant le comportement de la pile à combustible. Plus précisément, on procédera par un raisonnement fondée sur une analyse qui dépend des valeurs numériques des différentes paramètres de la pile à combustible et de la plage de fonctionnement des grandeurs physiques.

## 6.2 Généralités sur les modèles d'état

En thermique l'état d'un système est en générale fonction de la variable d'espace et les modèles sont dits à paramètre répartis. Les équations qui décrivent la transition de l'état du système sont donc des équations aux dérivées partielles. La résolution de ces équations ne peut s'obtenir sans l'introduction des conditions aux limites sur la totalité des frontières du système. Malgré le caractère naturellement réparti d'un champ de températures, et ou de la complicité des équations aux dérivées partielles, des modèles dits à paramètres localisés sont fréquemment utilisés. Les transitions d'état sont alors des équations différentielles ordinaires. Ainsi, nous avons deux classes de modèles : les modèles statiques par rapport à l'espace et dynamiques par rapport au temps où l'on retrouve les équations différentielles ordinaires, et les modèles dynamiques par rapport au temps régi

par des équations aux dérivées partielles.

### 6.2.1 Modèles à paramètres répartis

Bien que la structure des modèles à paramètres localisés convient pour décrire le comportement d'un processus en vue de la commande, il s'avère judicieux dans certain cas de conserver le caractère réparti des phénomènes étudiés. La structure prend alors la forme d'un système d'équations aux dérivées partielles. A chaque instant l'état du système est décrit par une ou plusieurs fonctions définies sur un domaine spatial. Dans ce cas, l'état du système est un élément d'un espace fonctionnel de dimension infini.

Les phénomènes thermiques sont généralement décrits par des modèles à paramètres répartis. Il s'agit de l'équation de la chaleur aux dérivées partielles paraboliques.

L'équation de la chaleur a été introduite au début du *XIX<sup>e</sup>* siècle par Joseph Fourier pour modéliser l'évolution de la température au cours du temps dans un milieu unidimensionnel (voir par exemple [Decrensefond et Maruani, 2005]). La résolution de cette équation fait l'objet de plusieurs études, souvent traitée avec des hypothèses simplificatrices vu la complexité de la solution recherchée. Par exemple, dans un problème unidimensionnel, l'équation considérée est la suivante

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} = - \frac{\partial J}{\partial x} \quad (6.3)$$

avec

$$\vec{J} = -k \vec{\nabla} T \quad (6.4)$$

où  $J[Wm^{-2}]$  représente le flux d'énergie thermique traversant une surface unitaire par unité de temps, et  $k$  est la conductivité thermique.

### 6.2.2 Modèles à paramètres localisés

Ce mode de représentation des systèmes est très général, et peut être adapté à la description des phénomènes thermiques de nature complexe. Un procédé thermique peut être considéré comme un système constitué par un ensemble de capacités thermiques en interaction, comportant des transferts conductif, convectif ou encore radiatif. L'équation de bilan d'énergie sur un volume fini de matière ayant une température moyenne et des

propriétés thermo-physiques constantes, s'écrit sous la forme

$$\begin{cases} C_i \frac{dT_i}{dt} = \sum_j^m G_{ij}(T_j - T_i) + U_{i,t} \\ y = C_0 T \end{cases} \quad (6.5)$$

où  $C_i$ ,  $U_{i,t}$  et  $G_{ij}$  désignent respectivement la capacité thermique, la source de flux thermique et la conductance.  $C_0 \in M_{m \times n}$ <sup>9</sup> est la matrice de mesure.

Les  $n$  nœuds désignés par leurs capacités dans  $M_{m \times n}$  toutes pourvues d'un capteur thermique. L'observation ne porte donc que sur  $m$  composantes parmi  $n$ , de sorte que l'équation d'observation qui relie l'état à la sortie du système peut s'écrire sous la forme matricielle suivante

$$C_0(i, j) = \begin{cases} 1 & \text{si le capteur } i \text{ est situé dans le nœud } j \\ 0 & \text{si le capteur } i \text{ est situé ailleurs.} \end{cases} \quad (6.6)$$

Ce modèle établit une relation causale entre l'ensemble de grandeurs constitués par les systèmes (6.5) et (6.46), c'est-à-dire les paramètres  $C_i$ ,  $G_{ij}$ , l'état initial  $T_{i0}$ , les termes sources qui définissent l'entrée du système  $U_i$ , l'état courant  $T_i$  et la sortie  $y$  du système.

## 6.3 Modèles d'état pour une pile PEMFC

### 6.3.1 Introduction

Dans cette section, nous présentons un modèle de description du comportement thermique en vue de la commande fondé sur une représentation nodale. La température de la cellule de la pile est contrôlée en chaque point grâce à un système de refroidissement à l'eau ou l'air selon la puissance de la pile. Partant de l'hypothèse de volume homogène, la cellule de la PàC est décomposée en plusieurs blocs (anode, membrane et cathode) en assumant que la température est homogène dans chacun de ces compartiments. Le modèle d'état ainsi obtenu est représenté par un vecteur d'état  $T$  qui représente les températures à des endroits de la pile que l'on souhaite contrôler.

---

9.  $M_{m \times n}$  désigne l'ensemble des matrices à  $m$  lignes et  $n$  colonnes.

### 6.3.2 Principe de la modélisation

Rappelons que la discrétisation nodale d'un système thermique a pour objectif de transformer les équations aux dérivées partielles en un système d'équations différentielles. Inspirée de la représentation par équivalences électriques (voir [FIGURE 6.1](#)), elle permet de transformer l'équation de la chaleur (6.3) en un système d'équations différentielles (6.5).

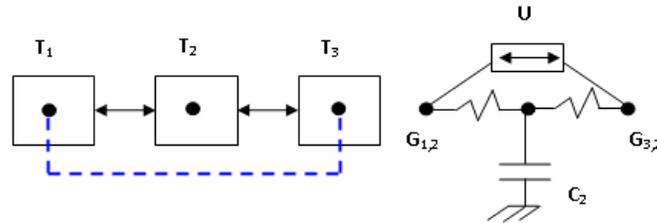


FIGURE 6.1 – Principe de l'analogie thermique-électrique.

Dans l'exemple de la [FIGURE 6.1](#), la chaleur produite au nœud 2 est traduite par l'équation suivante

$$C_2 \dot{T}_2 = G_{1,2}(T_1 - T_2) + G_{3,2}(T_3 - T_2) + U(T_3 - T_1) \quad (6.7)$$

En appliquant ce principe fondé sur l'analogie thermique/électricité, il est possible d'aboutir à un modèle pour décrire les phénomènes thermiques de la PEMFC (voir [FIGURE 6.2](#)).

Dans ce principe de modélisation, on représente les transferts entre les différents composants de la PàC par des conductances traduisant le mode du transfert thermique. Le transfert de chaleur dans la pile est alors décrit comme suit. Dans la plaque bipolaire se produisent deux phénomènes thermiques de conduction et de convection. La conduction résulte de la résistance au transfert thermique dans la partie solide de la cellule de la PàC. La convection est la chaleur échangée entre les gaz d'alimentations et la plaque bipolaire, cette quantité ne peut être négligée du moment que la surface de contact entre les gaz et les plaques est importante. Par ailleurs, il se produit un échauffement du fluide par son propre mouvement et par son mouvement sur les parois. Ces deux types de transfert de conduction et de convection se produisent en même temps et sont représentés par deux conductances en série.

Cependant, la chaleur produite suite au mouvement des gaz et de l'eau de refroidissement est traduite par une conductance de type convective placée en parallèle. Entre les

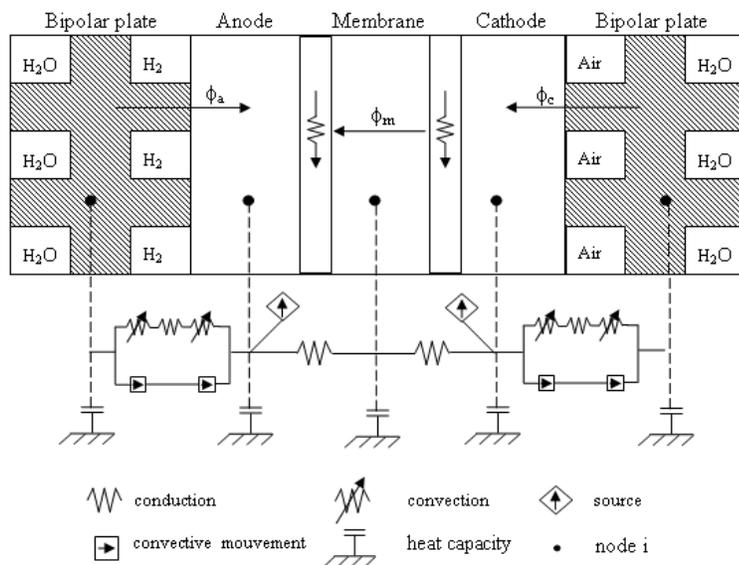


FIGURE 6.2 – Modèle thermique-électrique équivalent de la PàC.

électrodes et la membrane et, les électrodes et la plaque, le transfert est représenté par une conductance conductive.

Le principe consiste donc à placer un réseau de nœuds dans le système PàC que l'on relie à travers des conductances. Le réseau nodal est construit comme suit. On place un nœud dans la zone réactive des électrodes pour représenter la puissance thermique produite par les réactions exothermiques. Par ailleurs, un nœud est assigné à chaque canal de gaz afin de représenter l'échange entre les gaz et la cellule de la PàC. Ce nœud représente aussi le lieu où l'échange thermique entre les gaz se produit. Pour illustrer le rôle du refroidissement, un nœud est placé dans le circuit de refroidissement du stack (nœud 9). Par ailleurs, deux nœuds sont placés respectivement à l'entrée (nœuds 11) et à la sortie (nœuds 12) de l'échangeur de chaleur.

Il convient de préciser que la valeur de la température de l'eau dans la canalisation de retour du système de refroidissement est supposée être égale à la moyenne arithmétique de la valeur de la température de l'eau dans le canal anode et celle de l'eau dans le canal cathode.

### 6.3.3 Hypothèses de travail

Les hypothèses retenues tout au long de ce chapitre en vue d'élaborer le modèle décrivant le comportement thermique de la PàC, sont les suivantes

**(H1)** La température est supposée homogène dans chaque bloc d'une cellule.

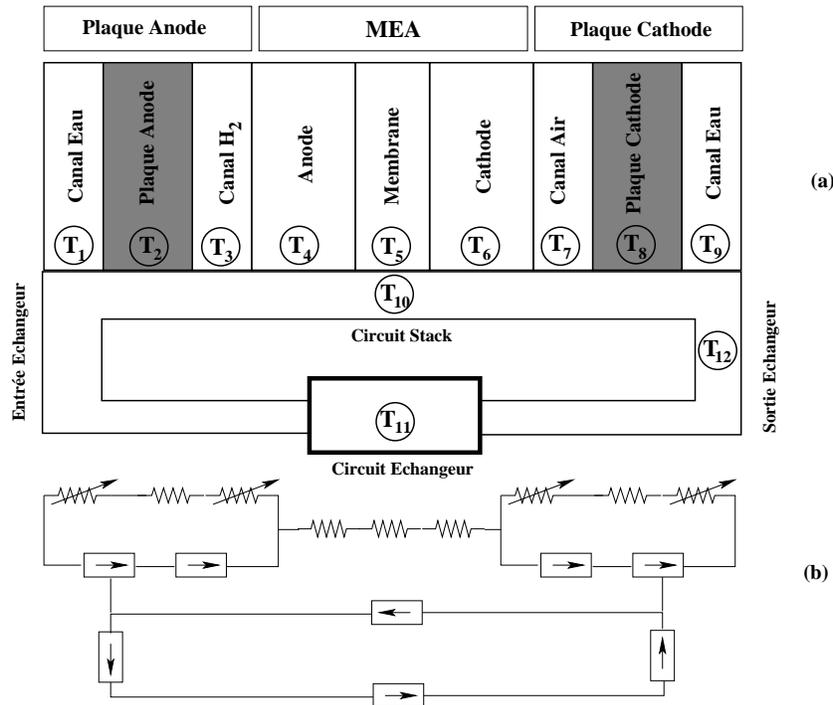


FIGURE 6.3 – Modélisation en vue de la commande.

- (H2) Le comportement thermique d'un compartiment donné est homogène pour toutes les cellules.
- (H3) Le taux d'utilisation des gaz ainsi que le pression des entrées sont identiques dans les deux compartiments.
- (H4) L'échange thermique entre les gaz et les électrodes ainsi que la chaleur résultante du mouvement des gaz dans le poreux et celle des molécules d'eau dans la membrane sont négligeables.
- (H5) Les conduites des gaz sont isolées ainsi les pertes de chaleur seront négligées.

## 6.3.4 Modèles considérés

### 6.3.4.1 Cas de grandes puissances

Comme il a été mentionné au Chapitre 1, dans le cas où la puissance délivrée par la pile est supérieur à 5 KW, le refroidissement à l'eau s'impose. Dans ce cas, un échangeur de chaleur est intégré dans le système pile PEMFC.

Le modèle dédié au contrôle de la température est constitué de douze nœuds par cellule comme cela est illustré par la FIGURE 6.3-a. La FIGURE 6.3-b représente les transferts de chaleur par conduction dans la partie MEA (c'est-à-dire membrane et électrodes)

et les plaques anode et cathode, ainsi que les transferts par convection entre les gaz et les plaques. Le modèle prend en compte l'interaction avec l'échangeur de chaleur, notamment l'énergie de déplacement des molécules d'eau et de gaz.

Étant donné la constitution hétérogène de la PàC, à chaque matériau de la cellule est associé un nœud du réseau nodal. Plus précisément, un noeud est attribué à chaque conduite d'amené des gaz. Un noeud est également associé à la sortie de la conduite d'eau. Par ailleurs, l'échangeur de chaleur est représenté par un noeud. L'ensemble de ces nœuds est lié par les conductances traduisant les transferts thermiques.

Il est à noter que le couplage entre deux phénomènes de transfert thermique donne lieu à une conductance équivalente grâce à l'analogie avec l'électricité. A titre d'exemple, un corps soumis à un couplage conduction-convection thermique peut être représenté par une conductance équivalente résultant de deux conductances connectées en série.

Finalement, et en appliquant le principe de modélisation illustré par l'équation (6.7) aux différents nœuds, nous déduisons le modèle ( $S_g$ ) décrivant le comportement thermique de la pile.

$$\left. \begin{aligned}
 C_a^e \frac{dT_1}{dt} &= \dot{m}_e c_{p_e}(T_{10} - T_1) + H_e S_{p,e}(T_2 - T_{H_2}^{in}) \\
 C_{pq} \frac{dT_2}{dt} &= G_{2,H_2} T_{H_2}^{in} + G_{3,2} T_3 - (G_{2,H_2} + G_{2,e} + G_{2,air} + G_{3,2}) T_2 + G_{2,e} T_1 + G_{2,air} T_{amb} \\
 C_{H_2,a} \frac{dT_3}{dt} &= \dot{m}_{H_2} c_{p_{H_2}} T_3 + \dot{m}_{v_{H_2}} c_{p_{H_2}} T_3 + H_{H_2} S_{p,H_2}(T_2 - T_3) \\
 C_a \frac{dT_4}{dt} &= G_{3,2} T_2 - (G_{3,2} + G_{3,4}) T_4 + G_{3,4} T_5 + \left( \alpha \frac{L_v}{2F} \right) I \\
 C_m \frac{dT_5}{dt} &= G_{3,4} T_4 - (G_{3,4} + G_{4,5}) T_5 + G_{4,5} T_6 + \left( L_v (1 + 2\alpha) + \frac{T \Delta S}{2F} + b_{O_2} \log \frac{i}{i_{O_2}^0} \right) I \\
 C_c \frac{dT_6}{dt} &= G_{4,5} T_5 - (G_{4,5} + G_{5,6}) T_6 + G_{5,6} T_8 + (\lambda_m / \zeta_1 - \zeta_2 e^{(1/303 - 1/T_m)}) I \\
 C_{air,c} \frac{dT_7}{dt} &= \dot{m}_{air,c} c_{p_{air}} T_7 + \dot{m}_{v_{air,c}} c_{p_{air}} T_7 + H_{air,c} S_{p,air}(T_8 - T_7) \\
 C_p \frac{dT_8}{dt} &= G_{6,air} T_7 + G_{6,5} T_6 - (G_{6,air} + G_{6,e} + G_{6,air,c} + G_{6,5}) T_8 + G_{6,e} T_9 + G_{6,air} T_{amb} \\
 C_{e,c} \frac{dT_9}{dt} &= \dot{m}_{e,p} c_{p_e}(T_{10} - T_9) + H_e S_{p,e}(T_8 - T_{air}^{in}) \\
 C_{e,p} \frac{dT_{10}}{dt} &= \dot{m}_{e,p} c_{p_e}(T_1 - T_{10}) + \dot{m}_{e,p} c_{p_e}(T_9 - T_{10}) - H_e S_e \left[ \left( \frac{T_1 + T_9}{2} \right) - \left( \frac{T_2 + T_8}{2} \right) \right] \\
 C_{e,ec} \frac{dT_{11}}{dt} &= \dot{m}_{e,ec} c_{p_e}(T_{10} - T_{11}) + H_e S_{ec}(T_{11} - T_{amb}) \\
 C_{e,sec} \frac{dT_{12}}{dt} &= \dot{m}_{e,ec} c_{p_e}(T_{11} - T_{12}) + H_e S_t(T_{12} - T_{amb})
 \end{aligned} \right\} (S_g)$$

Le modèle peut s'écrire de la façon compacte suivante

$$C\dot{T} = GT + (u_1G_1 + u_2G_2 + u_3G_3)T + Bd \quad (6.8)$$

ou encore

$$\dot{T} = C^{-1}GT + \sum_{i=1}^3 u_i G_i T + C^{-1}Bd \quad (6.9)$$

avec  $T^{10} = (T_1, T_2, T_3, T_4, T_5, T_6, T_7, T_8, T_9, T_{10}, T_{11}, T_{12})^T \in \mathcal{R}^{12}$ .

Les matrices  $G$  et  $G_i$  sont données par

$$G = \begin{pmatrix} 0 & g_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ g_2 & g_3 & g_4 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & g_5 & g_6 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & g_7 & 0 & g_8 & g_9 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & g_{10} & g_{11} & g_{12} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & g_{13} & g_{14} & 0 & g_{15} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & g_{16} & g_{17} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & g_{18} & g_{19} & g_{20} & g_{21} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & g_{22} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ g_{23} & g_{24} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & g_{25} & g_{26} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & g_{27} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & g_{28} \end{pmatrix},$$

$$G_1 = \begin{pmatrix} g_{29} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & g_{30} & 0 & 0 & 0 \\ g_{31} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & g_{32} & g_{33} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

10.  $a^T$  désigne le vecteur transposé de  $a$ .



La matrice  $B$  ainsi que le vecteur  $d$  s'expriment respectivement comme suit

$$B = \begin{pmatrix} 0 & b_1 & 0 & 0 & 0 \\ b_2 & b_3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & b_4 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & b_5 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & b_6 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & b_7 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ b_8 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & b_9 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ b_{10} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ b_{11} & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad d = \begin{pmatrix} T_{amb} \\ T_{H_2}^{in} \\ T_{eau} \\ T_{air,c}^{in} \\ I \end{pmatrix}.$$

Il est à noter qu'il est possible d'établir une relation entre la masse de vapeur apportée par humidification à l'anode et la masse de vapeur d'humidification des gaz à la cathode, nous obtenons la relation suivante

$$m_{vc} = 2x_{O_2}m_{va} \frac{ut_{air} P_c - P_{sat}}{ut_{H_2} P_a - P_{sat}} \quad (6.10)$$

Le vecteur de contrôle représente les débits d'eau traversant la pile PEMFC et l'échangeur de chaleur ainsi que la vapeur d'eau de l'humidification, soit

$$u_1 = \dot{m}_{e,pq}, \quad u_2 = \dot{m}_{e,ec}, \quad u_3 = \dot{m}_{va} \quad (6.11)$$

$u_i$  ( $i=1...3$ ) représentent les variables de commande et elles sont contraintes par

$$\boxed{\begin{array}{l} u_1 \in [u_1^{min} \quad u_1^{max}] = [5 \quad 10] \text{ (gs}^{-1}\text{)} \\ u_2 \in [u_2^{min} \quad u_2^{max}] = [3.8 \quad 7.5] \text{ (gs}^{-1}\text{)} \\ u_3 \in [u_3^{min} \quad u_3^{max}] = [0.07 \quad 0.15] \text{ (gs}^{-1}\text{)} \end{array}} \quad (6.12)$$

Dans la suite, on introduit le vecteur  $B_d$  défini par

$$B_d = \begin{pmatrix} -H_e S_{p,e} T_{H_2}^{in} \\ G_{2,air} T_{amb} + G_{2,H_2} T_{H_2}^{in} \\ 0 \\ \left( \alpha \frac{L_v}{2F} \right) I \\ (\lambda_m / \zeta_1 - \zeta_2 e^{(1/303-1/T_m)}) I \\ \left( L_v (1 + 2\alpha) + \frac{T \Delta S}{2F} + b_{O_2} \frac{\log i}{i_{O_2}^0} \right) I \\ 0 \\ G_{6,air} T_{amb} \\ -H_e S_{p,e} T_{air}^{in} \\ 0 \\ -H_{ext} S_{p,ec} T_{amb} \\ -H_{air} S_{tub} T_{amb} \end{pmatrix}$$

En vue d'alléger la présentation, les expressions des  $g_i$  ( $i=1...40$ ) et  $b_i$  ( $i=1...12$ ) sont données dans l'Annexe 1 de ce mémoire.

Notons que pour une densité de courant donnée, le vecteur  $B_d$  est constant.

Finalement, en introduisant les matrices  $A$ ,  $B_i$  ( $i=1...3$ ) et  $D$  définies par

$$\begin{cases} A = C^{-1}G \\ B_i = C^{-1}G_i & (i = 1...3) \\ D = C^{-1}Bd \end{cases} \quad (6.13)$$

le système (6.9) devient

$$\dot{T} = AT + \sum_{i=1}^3 u_i B_i T + D \quad (6.14)$$

### 6.3.4.2 Cas de petites puissances

Dans le cas des petites puissances (c'est-à-dire inférieur à 5 KW), il n'est pas généralement nécessaire d'intégrer un dispositif de refroidissement à l'eau ou à tout autre fluide colporteur.

La pile est refroidie à l'air par une convection forcée. Le modèle décrivant le comportement thermique de la PEMFC, et en vertu du principe de modélisation décrit dans paragraphe précédent, est donné par

$$(S_p) \left\{ \begin{array}{l} C_{pq,a} \frac{dT_{pq,a}}{dt} = H_{vent} S_{pq,a} (T_{pq,a} - T_{amb}) + H_{H_2} S_{pq,a} (T_{H_2}^e - T_{pq,a}) \\ C_{H_2} \frac{dT_{H_2}}{dt} = H_{H_2} S_{pq,a} (T_{H_2}^e - T_{pq,a}) + \dot{m}_{H_2} c_{pH_2} (T_{pq,a} - T_{H_2}) \\ C_a \frac{dT_a}{dt} = (H_{H_2} S_a (T_a - T_{H_2}) + k_a \frac{S_a}{d} (T_a - T_m) + \left( \alpha \frac{L_v}{2F} \right) I \\ C_m \frac{dT_m}{dt} = G_{3,4} (T_m - T_a) + G_{5,4} (T_c - T_m) + \left( L_v (1 + 2\alpha) + \frac{T \Delta S}{2F} + b_{O_2} \log \frac{i}{i_{O_2}^0} \right) I \\ C_c \frac{dT_c}{dt} = (H_{air} S_c (T_c - T_{air}) + k_c \frac{S_c}{d} (T_c - T_m) + (\lambda_m / \zeta_1 - \zeta_2 e^{(1/303 - 1/T_m)}) I \\ C_{air} \frac{dT_{air}}{dt} = H_{air} S_{pq,c} (T_{air}^e - T_{pq,c}) + \dot{m}_{air} c_{p_{air}} (T_{pq,c} - T_{air}) \\ C_{pq,c} \frac{dT_{pq,c}}{dt} = H_{vent} S_{pq,c} (T_{pq,c} - T_{amb}) + H_{air} S_{pq,c} (T_{air}^e - T_{pq,c}) \end{array} \right.$$

ou encore sous la forme compacte suivante

$$C_l \dot{T} = A_l T + u(B_l T + b_l) + d_l \quad (6.15)$$

avec

$$T = (T_{pq,a}, T_{H_2}, T_a, T_m, T_c, T_{air}, T_{pq,c})^T.$$

Les matrices  $C_l$ ,  $A_l$  et  $B_l$  ainsi que le vecteur  $b_l$  sont donnés par

$$C_l = \begin{pmatrix} C_{pq,a} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & C_{H_2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & C_a & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_m & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_c & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{air} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{pq,c} \end{pmatrix}$$

où  $C_l$  désignent les capacités thermiques à chaque nœud.

$$A_l = \begin{pmatrix} a_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ a_2 & a_3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & a_4 & a_5 & a_6 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & a_7 & a_8 & a_9 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & a_{10} & a_{11} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & a_{12} & a_{13} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & a_{14} \end{pmatrix}$$

où

$$\left\{ \begin{array}{l} a_1 = -H_{H_2} S_{pq,a} \\ a_2 = -H_{H_2} S_{pq,a} \dot{m}_{H_2} c_{pH_2} \\ a_3 = -H_{H_2} S_{pq,a} \\ a_4 = -H_{H_2} S_a \\ a_5 = H_{H_2} S_a + k_a \frac{S_a}{d} \\ a_6 = k_a \frac{S_a}{d} \\ a_7 = G_{3,4} - G_{5,4} \end{array} \right. , \left\{ \begin{array}{l} a_8 = -G_{5,4} \\ a_9 = G_{5,4} \\ a_{10} = -k_c \frac{S_c}{d} \\ a_{11} = k_c \frac{S_c}{d} \\ a_{12} = -\dot{m}_{air} c_{p air} \\ a_{13} = \dot{m}_{air} c_{p air} \\ a_{14} = -H_{air} S_{pq,c} \end{array} \right.$$

et

$$B_l = \begin{pmatrix} S_{pq,a} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & S_{pq,a} \end{pmatrix}, \quad b_l = \begin{pmatrix} -S_{pq,a}T_{amb} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ -S_{pq,c}T_{amb} \end{pmatrix}$$

Le vecteur  $d_l$  s'exprime comme suit

$$d_l = \begin{pmatrix} H_{H_2}S_{pq,a}T_{H_2}^e \\ H_{H_2}S_{pq,a}T_{H_2}^e \\ \left(\alpha \frac{L_v}{2F}\right) I \\ \left(L_v(1 + 2\alpha) + \frac{T\Delta S}{2F} + b_{O_2} \log \frac{i}{i_{O_2}^0}\right) I \\ (\lambda_m/\zeta_1 - \zeta_2 e^{(1/303-1/T_m)}) I \\ H_{air}S_{pq,c}T_{air}^e \\ H_{air}S_{pq,c}T_{air}^e \end{pmatrix}.$$

La variable de commande est le coefficient de convection  $u = H_{vent}$  qui est généré par la vitesse du ventilateur.

Finalement, en introduisant les matrices  $\bar{A}_l, \bar{B}_l, \bar{b}_l$  et  $\bar{d}_l$  définies par

$$\begin{cases} \bar{A}_l = C_l^{-1}A_l \\ \bar{B}_l = C_l^{-1}B_l \\ \bar{b}_l = C_l^{-1}b_l \\ \bar{d}_l = C_l^{-1}d_l \end{cases} \quad (6.16)$$

le système (6.17) devient

$$\dot{T} = \bar{A}_l = T + u(\bar{B}_l T + \bar{b}_l) + \bar{d}_l \quad (6.17)$$

### 6.3.5 Aspects technologiques de la pile

#### 6.3.5.1 Paramètres et plages de fonctionnement

##### A- Généralités

Le but de ce paragraphe est de définir les paramètres physiques et les paramètres géométriques de la pile PEMFC, afin d'identifier la classe des modèles bi-linéaires décrivant le comportement thermique des piles PEMFC. Pour ce faire, on commence par définir la plage de validité des coefficients de la matrice de commande  $A^\sigma$ . Plus précisément, les conductances d'échanges de conduction et de convection de  $A^\sigma$ . En fait, les grandeurs caractéristiques de la pile PEMFC sont importantes pour une évaluation des performances. Ces grandeurs sont classés selon deux catégories.

La première catégorie concerne les paramètres fixes communs à toutes les piles. La deuxième catégorie réunit les caractéristiques physiques et géométriques qui changent d'une conception à une autre. Par exemple, la taille de la pile est conditionnée par la taille de la surface active de la cellule qui participe à la réaction électrochimique. Celle-ci est par conséquent choisie selon la puissance souhaitée.

Par ailleurs, un facteur important est la nature du matériau de la cellule. En effet, les conductivités thermiques et électriques respectivement des électrodes et des plaques ont une grande influence sur le rendement global de la pile à combustible. Le fait de varier ces paramètres permet d'une part, d'agir sur la durée de vie de la pile et notamment celle de la membrane et, d'autre part, sur le rendement global du système pile à combustible. A titre d'exemple, réduire le poids et la taille de la pile permet de minimiser sa consommation.

Dans la deuxième catégorie, le calcul des conductances fait appel au mode d'écoulement des gaz dans les conduites d'alimentations et aussi du fluide de refroidissement. Le matériaux constituant la cellule de la pile doit répondre à la dynamique de l'écoulement des gaz. Les membranes Nafion à 200  $\mu\text{m}$  supportent jusqu'à 3 bars de pression contrairement aux membranes GORE qui sont plus fines et donc ne supportent pas une haute pression [Friede, 2004].

En plus, ces données permettent de calculer les coefficients d'échanges thermiques entre le fluide et la partie solide (c'est-à-dire électrodes, plaques, etc.). A titre d'exemple, la connaissance du régime d'écoulement de l'hydrogène et la dimension du canal anode permet de calculer le coefficient de transfert de convection nécessaire au calcul de la conductance de convection.

Les constantes utilisées dans les modèles sont de deux types. Le premier type concerne des caractéristiques intrinsèques de la pile (voir TABLE 6.1). Le deuxième type est celui des constantes physiques liées au fluide.

**a-** Coefficients constants et communs aux piles PEMFC <sup>11</sup>

TABLE 6.1 – Constantes communes aux différentes piles.

Coefficient	Valeur	Signification
$b_{O_2}$	$0.120 V.dec^{-1}$	Pente de tafel
$T\Delta S$	$-48.7 \cdot 10^3 J.kg^{-1}$	Entropie de production d'eau
$L_v$	$44 \cdot 10^3 J.mol^{-1}$	Chaleur latente de vaporisation
F	96485.33	Constante de Faraday
R	$8.314472 J/K/mol$	Constante des gaz parfaits
$k_p$	$110 W.m^{-1}.K$	Conductivité plaques bipolaires
$k_m$	$0.34 W.m^{-1}.K$	Conductivité membrane
$cp_a = cp_c$	$710 J.kg^{-1}K^{-1}$	Chaleur spécifique électrodes
$cp_m$	$68.175 J.kg^{-1}K^{-1}$	Chaleur spécifique membrane
$\rho_a = \rho_c$	$1300 Kg.m^{-3}$	Masse volumique électrodes
$\rho_M$	$2050 Kg.m^{-3}$	Masse volumique membrane
$M_{air}$	28.966	Masse molaire de l'air
$M_{H_2}$	2	Masse molaire de l'hydrogène
$M_{eau}$	18	Masse molaire de l'eau

Les coefficients d'échange par convection  $H$  et les nombres adimensionnels ( $N_u$ ,  $\nu$ ,  $\mu$ ), sont liés au régime de l'écoulement et donc indépendants de la pile. Les gaz circulent dans les canaux de la pile en régime laminaire, nous retiendrons alors les valeurs données par TABLE 6.2.

**b-** Paramètres dépendant de la pile considérée. Il s'agit des constantes liées aux matériaux (conductivité et densité de courant), les valeurs géométriques (hauteur, épaisseur des plaques, etc.) sont définies par TABLE 6.3 <sup>12</sup>.

11. Ces valeurs sont tirées de [Dumercy, 2004] et [Ramousse *et al.*, 2005].

12. Ces valeurs sont tirées de [Gerbraux, 1996].

TABLE 6.2 – Constantes liées au fluide.

$H_{air}$	$76.17 W.m^{-2}.K^{-1}$	Coefficient d'échange de chaleur de l'air
$H_{H_2}$	$73 W.m^{-2}.K^{-1}$	Coefficient d'échange de chaleur de l'hydrogène
$H_{ext}$	$10 W.m^{-2}.K^{-1}$	Coefficient d'échange de chaleur avec l'abiant
$Nu_{gaz}$	4.12	Nombre adimensionnel de Nusselt des gaz
$\nu_{eau}$	$0.44210^{-6}$	Viscosité dynamique de l'eau
$Nu_{eau}$	3.09	Nombre adimensionnel de Nusselt de l'eau
$\mu_{eau}$	$0.46610^3$	Viscosité cinématique de l'eau

TABLE 6.3 – Plage de fonctionnement des grandeurs physiques.

Coefficient	Valeur	Signification
$k_e$	[0.1, 1.6]	Conductivité électrodes ( $W.m^{-1}.K$ )
$e_p$	[1, 10]	Épaisseur plaque (mm)
$e_m$	[20, 200]	Épaisseur membrane Nafion( $\mu m$ )
$e_a = e_c$	[0.2, 1.5]	Épaisseur électrodes (mm)
$e_{ca}$	[0.1, 1]	Épaisseur canaux (mm)
$ut_{H_2}$	[1, 2]	Taux d'utilisation de l'hydrogène
$ut_{air}$	[1, 2]	Taux d'utilisation de l'air
$P_a$	[1,2]	Pression d'admission des gaz (bar)
$I$	[0.3, 1.1]	Densité de courant ( $A.cm^{-2}$ )

Notons que le courant d'échange  $I_{O_2}^0$  varie en fonction de la pression d'entrée des gaz (voir TABLE 6.4).

TABLE 6.4 – Valeur du courant d'échange en fonction de la pression [Friede, 2004].

$P(\text{bar})$	$E_{rev}$	$i_0[A/m^2]$ fort courant	$i_0[A/m^2]$ faible courant
1	1.24	$6.1 \cdot 10^{-3}$	13.2
1.25	1.25	$5.2 \cdot 10^{-3}$	13.2
1.5	1.25	$61.7 \cdot 10^{-3}$	19.3

Par ailleurs, les électrodes de la PàC ont une conductivité variant de 0.1 à  $1.6 w.m^{-1}.k^{-1}$  et la conductivité des plaques bipolaires est supposée être comprise entre 80 et  $240 w.m^{-1}.k^{-1}$ .

Il convient de préciser que le diamètre hydraulique des canaux des gaz définit le coefficient d'échange par convection entre les gaz d'alimentation et la pile.

Les constantes géométriques ; à savoir la taille de la membrane, la dimension des canaux

des gaz, l'épaisseur des électrodes et celle des plaques bipolaires, sont spécifiques et représentent l'essentiel des paramètres de la pile considérée.

Dans ce qui suit, les paramètres de la pile seront regroupés dans le vecteur  $\theta$

$$\theta = \left( k_e \quad e_p \quad e_e \quad e_{ca} \quad e_M \quad ut_{gaz} \quad P_a \quad I \quad h_c \quad h_v \quad h_p \quad h_m \quad L \quad N_{c_f} \quad N_{c_e} \right)^T \quad (6.18)$$

### B- Hypothèse de simplification

En générale, la taille de la pile dépend de la surface de la membrane et par conséquent les dimensions et le nombre des canaux des gaz sont choisis de manière à assurer une cohérence entre les différentes couches de la cellule de la pile. A titre d'exemple, la hauteur de la plaque bipolaire est de même ordre de grandeur que celui de la membrane. Le nombre de canaux choisi est donc fonction de leurs dimensions et de la hauteur de la plaque.

Ainsi et en vue de simplifier l'étude, nous avons adopté le principe suivant pour délimiter la plage de variation de certains grandeurs géométriques.

La hauteur de la plaque est du même ordre de grandeur que la membrane, nous assumons donc  $h_p = h_m$  où  $h_m$  désigne la hauteur de la membrane. Par ailleurs, et sans perte de généralité, nous supposons que la membrane est une surface carrée. Finalement, cette grandeur est assumée dépendre de la puissance délivrée par la PàC qui est de l'ordre de  $1 W/cm^2$ .

Par ailleurs, la longueur du canal ne dépasse pas la hauteur de la plaque pour le même type de configuration. Reste seulement à définir la plage de variation des canaux et la hauteur du voile de séparation. Cette dernière grandeur peut être supposée, et d'après la littérature (voir par exemple [Gerbraux, 1996]), deux fois moins grande que la hauteur du canal.

En fonction de la vitesse d'écoulement<sup>13</sup>, la hauteur du canal est calculée en utilisant les corrélations du régime laminaire.

L'hypothèse simplificatrice se traduit par l'expression d'une relation entre la puissance délivrée par la pile à combustible et ses grandeurs géométriques. Partant des données recueillies dans la littérature [Larminie et Dicks, 2000], la puissance de la pile PEMFC est liée à la surface de la membrane. Actuellement, pour une surface active de  $1 cm^2$  de membrane, la puissance délivrée par la pile est de l'ordre de  $1 W$  [Bonnet *et al.*, 2008].

---

13. La vitesse de l'écoulement en régime laminaire est de l'ordre de  $6 m/s$  [Faghri et Guo, 2005]

Finalement, suite à des calculs simples, les différentes grandeurs (c'est-à-dire  $h_p, h_m, L, N_{c_a}, N_{c_c}$  et  $N_{c_e}$ ) sont déduites à partir de la puissance supposée dans la gamme de puissance; à savoir comprise dans [5 , 200] KW. On peut alors écrire la relation de proportionnalité suivante

$$Q = \alpha h_m L_m \quad (6.19)$$

où  $Q$  désigne la puissance de la pile. On pose

$$\bar{\theta}(Q) = (h_m(Q), L_m(Q), N_{c_a}(Q), N_{c_c}(Q), N_{c_e}(Q)) \quad (6.20)$$

D'une façon similaire, on établit une relation entre la puissance  $Q$  et les autres grandeurs  $p_i$  de la pile à savoir le nombre de canaux des gaz et celui des canaux de refroidissement. On définit alors une relation sous la forme

$$p_i = \alpha_i Q \quad (6.21)$$

où  $i$  désigne un des paramètres de la PàC.

Plus précisément, pour une plage de fonctionnement [ $Q_{min}$   $Q_{max}$ ] de la puissance de la pile et pour un paramètre  $p_i \in [p_{min}$   $p_{max}]$ , on obtient l'expression suivante

$$\alpha_i = \frac{p_{max} - p_{min}}{Q_{max} - Q_{min}} \quad (6.22)$$

Finalement, en utilisant les équations (6.21) et (6.22) , on obtient la plage de fonctionnement des différents paramètres de la pile en utilisant une relation de type

$$\boxed{p_i = p_{min} + \alpha_i(Q - Q_{min})} \quad (6.23)$$

### 6.3.5.2 Principe du refroidissement

Un aspect critique de la conduction dans les PEMFC est celui de la répartition de la température dans les cellules. En effet, la température locale peut atteindre des pics de  $130^\circ C$  (température de transition du verre de Nafion). Ces grandeurs de température doivent être évitées, car elles endommagent irréversiblement la membrane. Actuellement, les membranes sont limitées en générale à une température de fonctionnement de  $100^\circ C$  (à 1 atmosphère) (voir par exemple [Costamagna et Srinivasan, 2001c]), au delà de cette température l'eau s'évapore et le membrane se déshydrate. Pour ces raisons, il est néces-

saire de refroidir la pile à combustible (voir [FIGURE 6.4](#)).

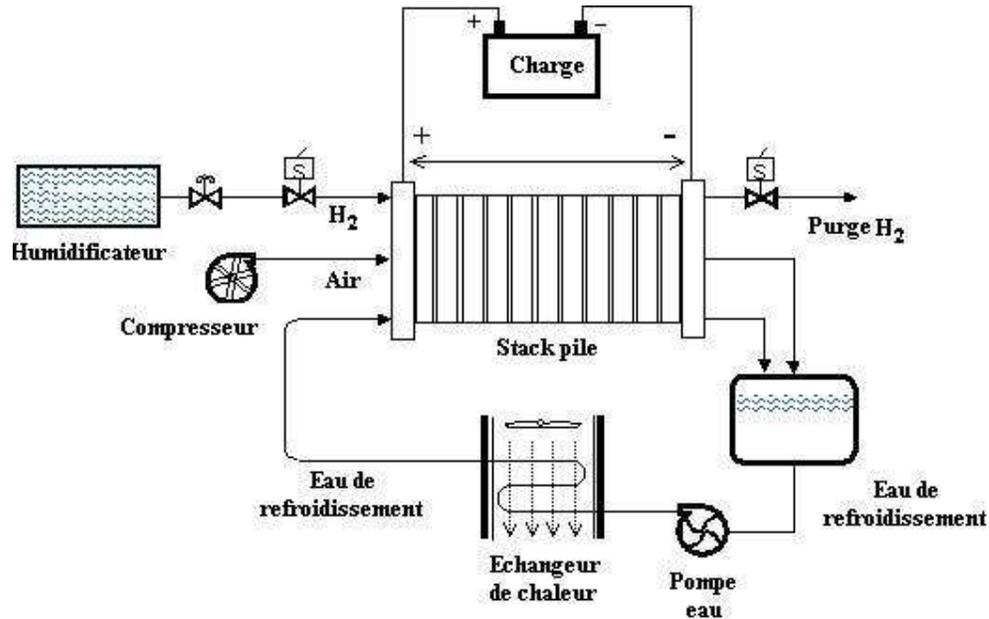


FIGURE 6.4 – Refroidissement de la pile à combustible.

Trois procédés peuvent être adoptés pour le refroidissement de la cellule.

1. Par circulation d'eau dans les plaques bipolaires (par exemple, la solution Ballard).
2. Par injection de vapeur d'eau avec l'air à l'entrée de la cellule (par exemple, la solution de Nuvera). La chaleur est alors éliminée par une évaporation partiel de l'eau.
3. Chaque plaque bipolaire est équipée par des ailettes, la chaleur est évacuée par une convection forcée d'air extérieur.

Le problème de variation du flux de chaleur dans les plaques de refroidissement incite à chercher une géométrie optimale permettant d'éliminer le gradient de température entre la cellule et le circuit de refroidissement. Dans ce contexte, plusieurs géométries (straight, zigzag et C-Shaped channel) de canaux de refroidissement ont été proposées. Dans [\[Lasbet et Auvity, 2006\]](#), il est montré que la configuration C-Shaped est la mieux adaptée.

Dans ce travail, afin d'illustrer l'influence du paramètre de la géométrie des canaux sur la répartition du flux de chaleur, nous avons introduit le paramètre section du canal

dans le calcul du coefficient de transfert par convection  $h$ . En effet, on peut montrer que

$$h_{\kappa} = \frac{k_{\kappa} Nu_{\kappa}}{4} \left( \frac{p}{S} \right)_{\kappa} \quad (6.24)$$

où  $\kappa$  représente l'indice du liquide de refroidissement.

Par ailleurs, une des hypothèses principales consiste à assumer que les micro-canaux obéissent à une distribution uniforme dans les plaques bipolaires et que le débit du liquide de refroidissement est identique dans chacun de ces micro-canaux.

### 6.3.5.3 Dimensionnement de l'échangeur

Afin de répondre à l'hypothèse de l'homogénéité de la température du model nodal, il convient de considerer un échangeur de chaleur à fluide isotherme. Ce type d'échangeurs offre l'avantage que la température du fluide reste quasi-uniforme et la température de paroi est la même que celle de l'échangeur grâce à un coefficient d'échange assez élevé. Cela se produit généralement lorsque le fluide subit un changement de phase, c'est-à-dire dans les condenseurs ou les évaporateurs. Ainsi,  $T_c$  est constante dans un condenseur ainsi que  $T_f$  dans un évaporateur (voir par exemple [PADET, 1994]). Le flux de chaleur

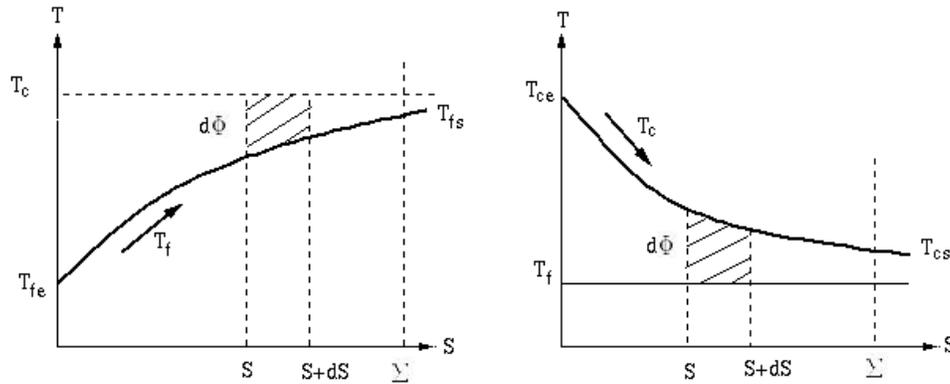


FIGURE 6.5 – Distribution des températures dans un condenseur (à gauche) et dans un évaporateur (à droite).

transféré localement à travers un élément  $ds$  de la surface d'échange est donné par la relation suivante

$$d\Phi = k(T_c - T_f) ds \quad (6.25)$$

L'intégration de cette équation mène à l'écriture suivante

$$\Phi = k\Sigma\Delta T_{LM} \quad (6.26)$$

où  $\Delta T_{LM}$  est la différence de température logarithmique moyenne (DTLM).

Les lois décrivant le phénomène thermique nous enseignent que le coefficient d'échange  $U$  global est tel que son inverse, appelé résistance thermique, est la somme des résistances thermiques entre les deux fluides. En négligeant l'épaisseur de la paroi, nous obtenons l'expression suivante

$$U = \frac{h_{eau}h_{air}}{h_{eau} + h_{air}} \quad (6.27)$$

Par ailleurs, « la différence de température logarithmique moyenne » est donnée par

$$\Delta T_{LM} = Tf_c - Tf_f \quad (6.28)$$

où  $Tf_c$  et  $Tf_f$  représentent respectivement les températures du fluide chaud de l'échangeur et celle du fluide de refroidissement à savoir l'air de ventilation (c'est-à-dire une convection forcée).

En faisant un bilan thermique il vient que

$$\Phi = \dot{m}cp(Te_s - Te_e) \quad (6.29)$$

$Te_e$  et  $Te_s$  représentent respectivement la température d'entrée et de sortie du fluide.

On aboutit alors à

$$Te_s = \frac{\Phi}{\dot{m}cp} + Te_e \quad (6.30)$$

Finalement, la « la différence de température logarithmique moyenne » est donnée par l'expression suivante

$$\Delta T_{LM} = \frac{\Phi}{\dot{m}cp} + Te_e - T_{amb} \quad (6.31)$$

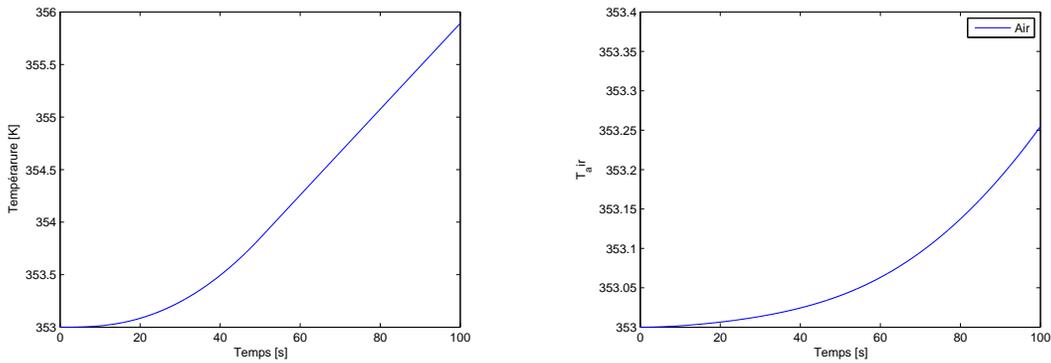
Nous déduisons ainsi la surface d'échange de l'échangeur

$$S_{ech} = \frac{\Phi}{U} \Delta T_{LM} \quad (6.32)$$

## 6.4 Stratégie du contrôle

### 6.4.1 Exemple en boucle ouverte

Les résultats de simulation (voir [FIGURE 6.6](#)) illustrent le comportement thermique en régime dynamique de la pile en boucle ouverte. On constate que les plaques bipolaires, lieu de l'accumulation de la chaleur produite par les réactions exothermiques aux électrodes, chauffent relativement vite et en particulier dans le compartiment cathode. En effet, la pile chauffe en l'absence d'une stratégie de refroidissement pertinente, d'où l'importance du contrôle.



(a) Evolution de la température de la plaque cathode

(b) Evolution de la température d'air

FIGURE 6.6 – Evolution de la température dans le compartiment cathode en l'absence du refroidissement.

Mathématiquement, et en considérant par exemple le modèle (6.14), cela s'explique par la présence de valeurs propres à partie réelle positive dans la matrice  $A$ .

A titre d'exemple, la matrice  $A$  dans le cas des données de la pile de [Gerbraux, 1996] est définie par

$$A = \begin{pmatrix} -2.63 & 30.03 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 16.18 & -22.36 & 5.44 & 0.07 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 327 & 3.53 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0.58 & 0 & -5.85 & 5.26 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 347.54 & -695.08 & 347.54 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 5.26 & -5.85 & 0 & 0.58 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0.01 & 31.09 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0.72 & 0 & -1.74 & 1.61 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -30.03 & -2.63 & 0 & 0 & 0 \\ -15.35 & -18.71 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -18.71 & 22.06 & -6.71 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 3.24 & 15.46 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 3.24 & -3.81 \end{pmatrix}$$

Les valeurs propres associées à cette matrice sont données par

$$\Re^{14}(\mathcal{S}p^{15}(A^\sigma)) = \{-3.81, 15.46, -6.71, -700.34, 739.04, -50.35, -5.85, -2.18, -2.18, -0.58, -1.68, 0.012\}.$$

On constate que deux valeurs propres sont positives.

## 6.4.2 Mise en forme du modèle

Dans ce qui suit, nous assumons les hypothèses suivantes

- (H6) La température d'entrée des gaz est inférieure à la température de fonctionnement de la pile, il y a donc pas de condensation de la vapeur d'eau.
- (H7) La vapeur d'eau d'humidification dépend des flux des gaz contrôlés par la densité de courant.<sup>16</sup>

Comme il a été précisé précédemment, pour réguler la température du stack, les variables de commande (voir Eq. (6.11)) sont la masse d'eau qui circule dans le stack, la masse d'eau qui passe dans l'échangeur de chaleur et la vapeur d'eau.

Considérons le système (6.9). Tout d'abord, on procède par le feedback préliminaire suivant

$$u_i = \bar{u}_i + \xi_i \quad (i = 1 \dots 3) \quad (6.33)$$

14.  $\Re$  désigne la partie réelle de l'ensemble des valeurs propres de la matrice A.

15.  $\mathcal{S}p(A^\sigma)$  désigne le spectre de la matrice  $A^\sigma$ .

16. La densité de courant est contrôlée par la charge électrique.

où les plages de fonctionnement de  $u_i (i = 1...3)$  sont définies par (6.12).

Puis on pose

$$\xi_i = u_i^{min} \quad (i=1...3).$$

En vertu de (6.12), on a

$$\boxed{\bar{u}_i \in [0 \quad u_i^{max} - u_i^{min}].} \quad (6.34)$$

Le système (6.9) avec (6.33) devient

$$\dot{T} = AT + \sum_{i=1}^3 (\bar{u}_i + \xi_i) B_i T + D \quad (6.35)$$

ou encore

$$\dot{T} = (A + \xi_i B_i) T + \sum_{i=1}^3 \bar{u}_i B_i T + D. \quad (6.36)$$

Dans ce qui suit on utilisera  $\bar{A}$  pour désigner la matrice définie par

$$\bar{A} = A + \sum_{i=1}^3 \xi_i B_i \quad (6.37)$$

alors

$$\dot{T} = \bar{A} T + \sum_{i=1}^3 \bar{u}_i B_i T + D. \quad (6.38)$$

$\bar{A}$  peut être donnée explicitement par

$$\bar{A} = \begin{pmatrix} \bar{g}_1 & \bar{g}_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \bar{g}_3 & \bar{g}_4 & \bar{g}_5 & \bar{g}_6 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \bar{g}_7 & \bar{g}_8 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \bar{g}_9 & 0 & \bar{g}_{10} & \bar{g}_{11} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \bar{g}_{12} & \bar{g}_{13} & \bar{g}_{14} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \bar{g}_{15} & \bar{g}_{16} & 0 & \bar{g}_{17} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \bar{g}_{18} & \bar{g}_{19} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \bar{g}_{20} & \bar{g}_{21} & \bar{g}_{22} & \bar{g}_{23} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \bar{g}_{24} & \bar{g}_{25} & 0 & 0 & 0 \\ \bar{g}_{26} & \bar{g}_{27} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \bar{g}_{28} & \bar{g}_{29} & \bar{g}_{30} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \bar{g}_{31} & \bar{g}_{32} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \bar{g}_{33} & \bar{g}_{34} \end{pmatrix}$$

Sous l'hypothèse simplificatrice (voir (6.23)), les matrices dépendent de la puissance et le système s'écrit

$$\dot{T} = \bar{A}(Q)T + \sum_{i=1}^3 \bar{u}_i B_i(Q)T + D(Q) \quad (6.39)$$

Pour réécrire (6.39) sous la forme classique (6.1), il est nécessaire d'effectuer un changement de variables. Ce changement impose que  $\mathcal{D}et^{17}(\bar{A}(Q))$  soit non nul.

La figure FIGURE 6.7 donne le tracé de  $\bar{A}(Q)$  en fonction de la puissance Q. On constate que celui-ci ne s'annule pour aucune valeur de Q dans la plage de fonctionnement choisie.

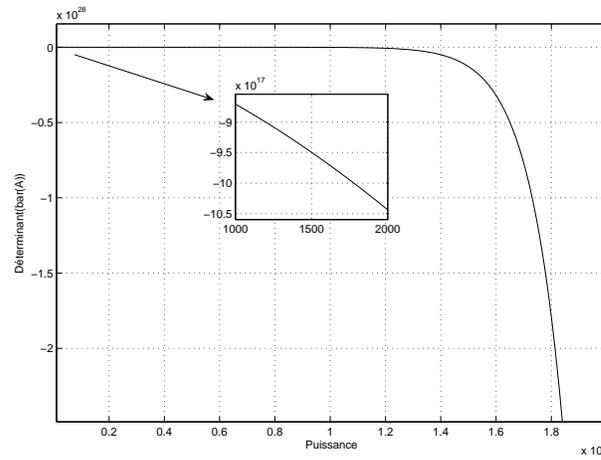


FIGURE 6.7 – Tracé du déterminant de  $\bar{A}(Q)$  en fonction de Q.

Alors, et par continuité, pour  $\sigma_i \in \mathcal{R}$  ( $i=1\dots 3$ ) suffisamment petits on a

$$\mathcal{D}et \left( \bar{A} + \sum_{i=1}^3 \sigma_i B_i \right) \neq 0. \quad (6.40)$$

Il est à noter que le feedback  $\sigma_i$  est introduit pour choisir le point de fonctionnement donc la température de consigne.

Suite au feedback préliminaire  $\sigma_i$ , nous avons

$$\begin{array}{l} \sigma_i \in [0 \quad u_i^{max} - u_i^{min}] \\ \tilde{u}_i \in [-\sigma_i \quad (u_i^{max} - u_i^{min}) - \sigma_i], i = 1\dots 3 \end{array}$$

17. On utilisera  $\mathcal{D}et(A)$  pour désigner le déterminant de la matrice A.

Le système (6.38) devient

$$\dot{T} = \left( \bar{A} + \sum_{i=1}^3 \sigma_i B_i \right) T + \sum_{i=1}^3 \tilde{u}_i B_i T + D \quad (6.41)$$

Le système (6.41) peut être mis sous la forme bilinéaire. En effet,

$$\begin{aligned} \dot{T} &= \left( \bar{A} + \sum_{i=1}^3 \sigma_i B_i \right) \left[ T + \left( \bar{A} + \sum_{i=1}^3 \sigma_i B_i \right)^{-1} D \right] + \\ &\quad \sum_{i=1}^3 \tilde{u}_i B_i \left[ T + \left( \bar{A} + \sum_{i=1}^3 \sigma_i B_i \right)^{-1} D - \left( \bar{A} + \sum_{i=1}^3 \sigma_i B_i \right)^{-1} D \right] \end{aligned} \quad (6.42)$$

Soit  $x$  une nouvelle variable d'état définie par

$$x = T + \left( \bar{A} + \sum_{i=1}^3 \sigma_i B_i \right)^{-1} D, \quad (6.43)$$

alors

$$\begin{aligned} \dot{x} &= \dot{T} \\ &= \left( \bar{A} + \sum_{i=1}^3 \sigma_i B_i \right) x + \sum_{i=1}^3 \tilde{u}_i B_i \left[ x - \left( \bar{A} + \sum_{i=1}^3 \sigma_i B_i \right)^{-1} D \right] \\ &= \left( \bar{A} + \sum_{i=1}^3 \sigma_i B_i \right) x + \sum_{i=1}^3 \tilde{u}_i \left[ B_i x - B_i \left( \bar{A} + \sum_{i=1}^3 \sigma_i B_i \right)^{-1} D \right]. \end{aligned} \quad (6.44)$$

Finalement, le système (6.9) s'écrit sous la forme bilinéaire suivante

$$\dot{x} = A^\sigma x + \sum_{i=1}^3 \tilde{u}_i (B_i x + b_i^\sigma) \quad (6.45)$$

avec

$$\begin{cases} A^\sigma = \bar{A} + \sum_{i=1}^3 \sigma_i B_i \\ b_i^\sigma = -B_i (A^\sigma)^{-1} D \end{cases} \quad (6.46)$$

### 6.4.3 Choix du point de fonctionnement

Actuellement dans la littérature (voir par exemple [Oseen-Senda, 2006]), le contrôle de la PàC est souvent limité par un simple processus de refroidissement par circulation d'un fluide. Un fluide colporteur est utilisé pour être circulé continuellement dans un échangeur de chaleur jusqu'à refroidissement. Un bilan thermique global sur le stack permet de dimensionner ce dernier. Il est à noter de par cette stratégie de refroidissement, il est supposé que la température du stack est la même dans chaque cellule. En d'autres termes, le contrôle de la température de chaque cellule du stack, voir de chaque bloc de cellule (électrodes, membrane, plaques) n'est pas assuré. Sachant que les surtensions dans le stack sont affectées par les variations de températures. Il est dès lors souhaitable de contrôler chaque partie du stack et en particulier la membrane.

L'objectif de ce travail est de développer un schéma de contrôle par rétroaction afin de contrôler la température en chaque point du stack. La température de fonctionnement imposée par la nature des réactions dans les cellules, est obtenue en faisant varier la quantité d'eau traversant la PàC et l'échangeur en même temps. Il convient de préciser que l'humidité des gaz est aussi un paramètre de contrôle (FIGURE 6.8).

Le contrôle des températures est effectué autour du vecteur  $T_e$ , le point de fonctionnement. Des micro capteurs thermiques peuvent être implantés dans les électrodes et notamment dans la membrane pour mesurer les températures locales du stack.

En posant  $x = T - T_e$  et en utilisant l'équation (6.43), nous obtenons l'expression du vecteur des températures de consigne souhaité pour le fonctionnement de la pile en fonction des paramètres  $\sigma_i$  ( $i=1..3$ )

$$T_e = -(A^\sigma)^{-1}D \quad (6.47)$$

Notons que ces valeurs peuvent être mesurées par exemple à l'aide de sondes thermiques. L'objectif de la commande est de réguler la température du stack autour d'une valeur de consigne en utilisant un système de refroidissement à eau. Ainsi, l'intérêt d'introduire les constantes  $\sigma_i$  ( $i = 1..3$ ) est de faire varier le point de fonctionnement. Les constantes  $\sigma_i$  pour lesquelles le vecteur  $T_e$  est défini sont obtenues suite à la résolution du système d'équations constitué de la partie droite de l'équation (6.43) égale à zéro soit

$$\bar{A}T_e + \sum_{i=1}^3 \sigma_i B_i T_e + D = 0 \quad (6.48)$$

Les valeurs des  $\sigma_i$  recherchées peuvent être interprétées comme étant les quantités d'eau et de vapeur d'eau nécessaires pour maintenir la température de la PàC autour du point de fonctionnement désiré  $T_e$ .

Finalement, s'il existe  $\sigma_i \in \mathcal{R}$  ( $i=1\dots3$ ), pour lesquelles la condition de l'équation (6.47) est vérifiée, alors le vecteur des températures  $T_e$  peut être utilisé comme point de fonctionnement autour duquel il serait intéressant de stabiliser la température de la pile à combustible.

#### 6.4.4 Contrôle du comportement thermique

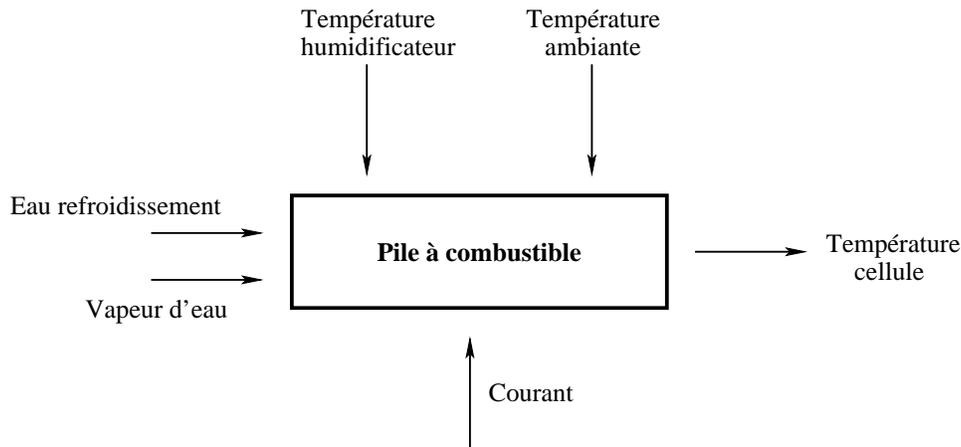


FIGURE 6.8 – Schéma de contrôle.

Plusieurs objectifs de contrôle, dépendant des points de fonctionnement, peuvent être envisagés.

Le premier concerne la régulation simultanée des cinq températures  $T_2, T_3, T_4, T_5$  et  $T_6$ . Il s'agit de commande de température d'une cellule complète du stack. Un deuxième objectif peut être celui de la régulation simultanée des températures  $T_9$  et  $T_{12}$ . Le but est de contrôler la température de l'eau dans le stack et dans l'échangeur. Il serait donc intéressant de contrôler les températures :  $T_2, T_3, T_4, T_5, T_6$ . Ces températures représentent une cellule du stack. Un autre objectif peut être le contrôle de la température  $T_{10}$  de l'eau dans le stack et la température  $T_{12}$  de l'eau à la sortie de l'échangeur de chaleur.

##### 6.4.4.1 Méthodologies pour le contrôle

Dans ce sous paragraphe deux résultats sur les systèmes bilinéaires sont présentés. Ces résultats représentent une base sur laquelle s'appuie notre méthodologie de contrôle

par rétroaction du comportement thermique de la pile.

Considérons le système bilinéaire suivant

$$\dot{z} = Az + \sum_{i=1}^m u_i (B_i z + b_i)$$

Le premier résultat, énoncé par la proposition suivante, traite de la stabilisation locale.

**Proposition 1** *Si la paire  $(A, [b_1 \dots b_m])$  est commandable alors le système bilinéaire ci-dessus est stabilisable localement au voisinage de l'origine.*

La démonstration est fondée sur la linéarisation et la relation entre la commandabilité et la stabilisation par retour d'état. Elle sera omise.

Le deuxième résultat, donné par la proposition suivante, concerne la stabilisation globale.

**Proposition 2** [*Gutman, 1981*] *Si il existe une matrice  $P$  définie positive telle que*

$$(B_i x + b_i)^T P x = 0 \quad \text{pour } i = 1 \dots m \implies x^T (PA + A^T P) x < 0 \quad (6.49)$$

alors

$$u_i = -(B_i x + b_i) P x$$

stabilise le système.

La première méthodologie pour le contrôle de l'aspect thermique de la pile est basée sur la Proposition 1. Cependant, il convient de préciser que les matrices  $A, B_i$  ( $i=1 \dots 3$ ), sont dépendantes du paramètre  $\theta$  désigné par (6.18). En fait, le système s'écrit

$$\dot{z} = A(\theta)z + \sum_{i=1}^m u_i (B_i(\theta)z + b_i(\theta)) \quad (6.50)$$

Il s'agit donc de vérifier la condition de commandabilité de la paire  $(A(\theta), [b_1(\theta) \dots b_m(\theta)])$  en présence du paramètre  $\theta$  ou encore du système, si  $\theta$  est exprimé en fonction de  $Q$ , de

la paire  $(A(Q), [b_1(Q) \dots b_m(Q)])$

$$\dot{z} = \bar{A}(Q)z + \sum_{i=1}^3 \bar{u}_i (B_i(Q)z + b_i(Q)) \quad (6.51)$$

#### 6.4.4.2 Synthèse de la loi de commande

##### I-Résultat local

En vue d'appliquer le résultat de la Proposition 1, on vérifie d'abord que la paire  $(\bar{G}, [b_1 \ b_2 \ b_3])$  est commandable.

Un raisonnement simple montre qu'on peut écrire les  $b_i$  ( $i=1\dots 3$ ) sous la forme suivante

$$\begin{cases} b_1 = \alpha_1 e_1 + \alpha_2 e_9 + \alpha_3 e_{10} \\ b_2 = \alpha_4 e_{11} + \alpha_5 e_{12} \\ b_3 = \alpha_6 e_3 + \alpha_7 e_7 \end{cases} \quad (6.52)$$

où  $e_i$  ( $i = 1 \dots 12$ ), désignent la base euclidienne des vecteurs orthogonaux, à savoir

$$e_1 = (1 \ 0 \ \dots \ 0)^T, e_2 = (0 \ 1 \ \dots \ 0)^T, \dots, e_{12} = (0 \ 0 \ \dots \ 1)^T.$$

Par ailleurs, des calculs directs montrent

$$\begin{cases} \bar{G}e_1 = \alpha_8 e_1 + \alpha_9 e_2 + \alpha_{10} e_{10} \\ \bar{G}e_2 = \alpha_{11} e_1 + \alpha_{12} e_2 + \alpha_{13} e_3 + \alpha_{14} e_4 + \alpha_{15} e_{10} \\ \bar{G}e_3 = \alpha_{16} e_2 + \alpha_{17} e_3 \\ \bar{G}e_4 = \alpha_{18} e_2 + \alpha_{19} e_4 + \alpha_{20} e_5 \\ \bar{G}e_5 = \alpha_{21} e_4 + \alpha_{22} e_5 + \alpha_{23} e_6 \\ \bar{G}e_6 = \alpha_{24} e_5 + \alpha_{25} e_6 + \alpha_{26} e_8 \\ \bar{G}e_7 = \alpha_{27} e_7 + \alpha_{28} e_8 \\ \bar{G}e_8 = \alpha_{29} e_6 + \alpha_{30} e_7 + \alpha_{31} e_8 + \alpha_{32} e_9 + \alpha_{33} e_{10} \\ \bar{G}e_9 = \alpha_{34} e_8 + \alpha_{35} e_9 + \alpha_{36} e_{10} \\ \bar{G}e_{10} = \alpha_{37} e_{10} + \alpha_{38} e_{11} \\ \bar{G}e_{11} = \alpha_{39} e_{11} + \alpha_{40} e_{12} \\ \bar{G}e_{12} = \alpha_{37} e_{12} \end{cases} \quad (6.53)$$

où les  $\alpha_i$  sont des constantes non nulles.

En utilisant les expressions (6.52) et (6.53) on peut démontrer le résultat suivant

**Proposition 3** Pour  $i = 1 \dots 12$  et  $j = 1 \dots 3$ , nous avons

$$\bar{G}^i b_j \in \mathcal{D}$$

où

$$\mathcal{D} = \text{Span}^{18} \{b_1, b_2, b_3, \bar{G}^5 b_3, \bar{G}^k b_i, k = 1 \dots 4, i = 1 \dots 3\}.$$

Finalement, pour vérifier la commandabilité de la paire  $(\bar{G}, [b_1 \ b_2 \ b_3])$ , il suffit d'étudier le rang de la matrice

$$[b_1, b_2, b_3, \bar{G}b_1, \bar{G}^2 b_1, \bar{G}^3 b_1, \bar{G}^4 b_1, \bar{G}b_3, \bar{G}^2 b_3, \bar{G}^3 b_3, \bar{G}^4 b_3, \bar{G}^5 b_3]$$

Finalement, nous avons la proposition suivante

**Proposition 4** Si

$$\text{Rang}^{19} [b_1, b_2, b_3, \bar{G}b_1, \bar{G}^2 b_1, \bar{G}^3 b_1, \bar{G}^4 b_1, \bar{G}b_3, \bar{G}^2 b_3, \bar{G}^3 b_3, \bar{G}^4 b_3, \bar{G}^5 b_3] = 12$$

alors le système (6.50) est stabilizable.

### 6.4.5 Exemples numériques

Dans le cadre de cette thèse, un programme (voir **Algorithm 3**) a été développé sous Matlab pour calculer le gain stabilisant à partir des paramètres de la pile choisis par l'utilisateur.

---

**Algorithm 3** Programme CommandeTemperature

---

**Require:** PARAM; \\* Introduire le fichier paramètres pile

- 1: Built Matrix  $A^\sigma$  ;
  - 2: Comput  $\mathcal{S}p(A^\sigma)$  \\* Valeurs propres de  $A^\sigma$  ;
  - 3: Comput  $M_c$  \\*  $M_c$  est la Matrice de Commandabilité ;
  - 4: **if**  $\text{Det}(M_c) \neq 0$  **then**
  - 5:     $G = \text{ComputeGain}$ ; \\*  $G$  désigne le gain stabilisant
  - 6: **else**
  - 7:    Print ("Système non stabilisable")
  - 8: **end if**
- 

18. On utilise *Span* pour désigner un espace vectoriel engendré par des vecteurs.

19. Rang indique le rang d'une matrice.

L'exemple suivant, et en vue d'illustrer l'application du programme, présente les résultats de contrôle de la température d'une pile d'une puissance de 20 KW et une densité de courant de  $0.3 \text{ A.cm}^{-2}$  opérant à une température ambiante de  $25^\circ\text{C}$ . Afin de s'affranchir des problèmes d'échauffement, la conductivité est assumée être assez élevée (de l'ordre de  $1.6 \text{ W.m}^{-1}\text{K}^{-1}$ ).

Pour les grandeurs géométriques de la PàC, les valeurs considérées sont celles données dans [Gerbraux, 1996] (voir TABLE 6.5).

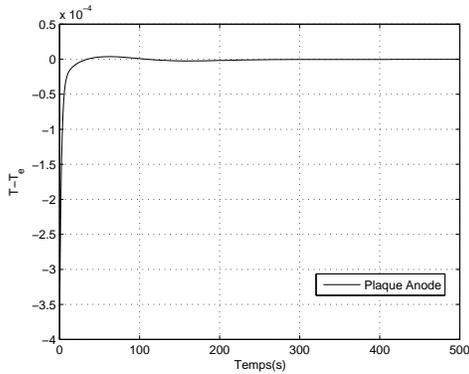
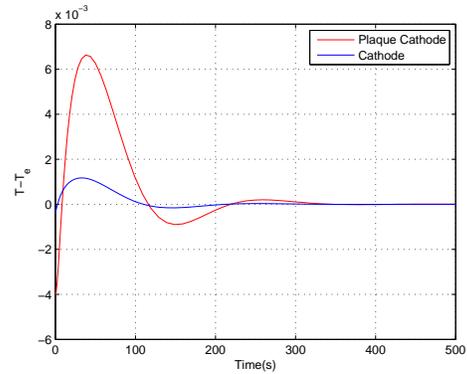
TABLE 6.5 – Paramètres de simulation.

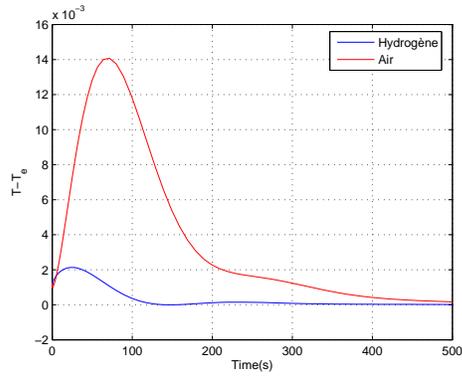
Paramètre	Valeur	Paramètre	Valeur
$h_c$	0.13 cm	$h_m$	16 cm
$h_v$	0.12 cm	$T_{gaz}$	$70^\circ\text{C}$
$h_p$	18 cm	$T_{amb}$	$50^\circ\text{C}$
$L$	18	$I$	$1.5 \text{ Acm}^{-2}$
$T$	$82^\circ\text{C}$	$T_e$	$78^\circ\text{C}$

Dans cet exemple numérique, la matrice de gain est donnée par

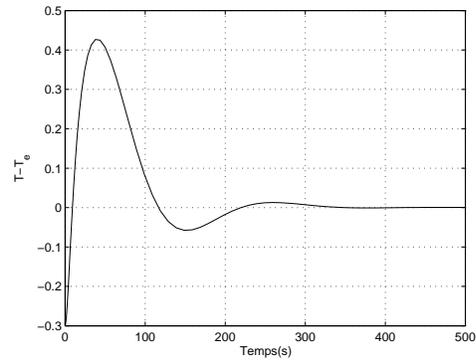
$$M = \begin{pmatrix} 0 & -0.05 & 0 & 29.96 & -59.82 & 29.96 & 0 & -0.053 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -0.05 & 0.1 & -0.05 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0.03 & -278.33 & 0.11 & 0 & -3.13e^5 & 1.56e^5 & 0 & -281.95 & 0.03 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Les simulations montrent la convergence des températures vers la température de référence. Il convient de préciser que les courbes données par FIGURE 6.9 désignent le comportement de l'écart entre la température de la pile à un instant donné et celle de la température de consigne.

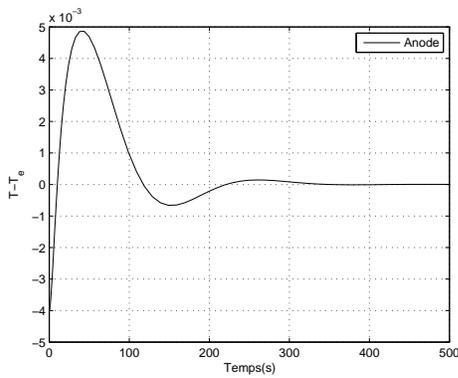
(a) Variation de  $\Delta T$  dans la plaque anode(b) Variation de  $\Delta T$  dans le bloc cathode



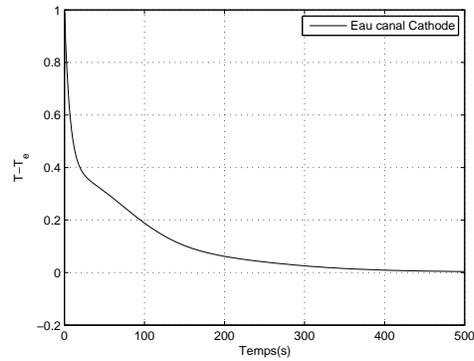
(c) Variation de  $\Delta T$  des gaz



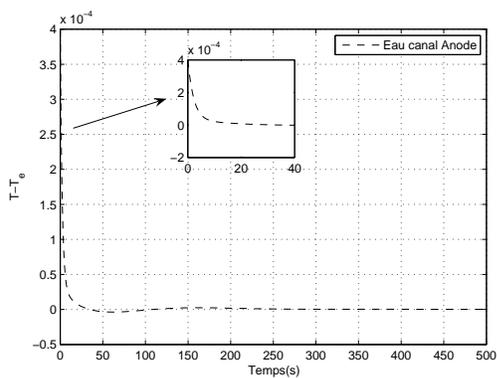
(d) Variation de  $\Delta T$  dans la membrane



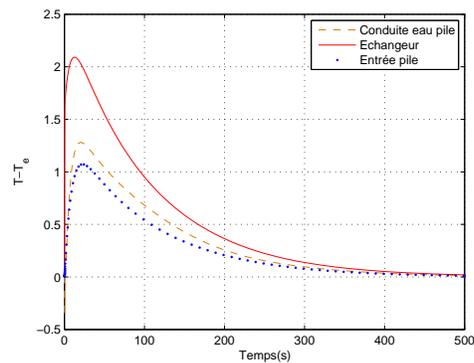
(e) Variation de  $\Delta T$  dans l'anode



(f) Variation de  $\Delta T$  de l'eau dans le canal cathode



(g) Variation de  $\Delta T$  dans le canal eau anode



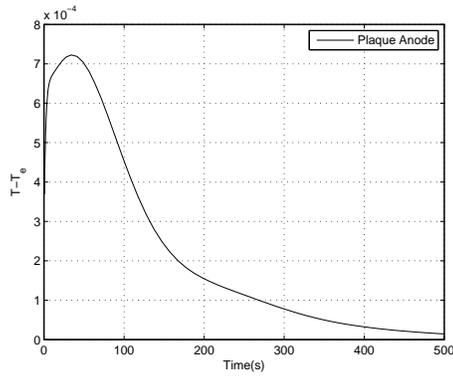
(h) Variation de  $\Delta T$  dans le système de refroidissement

FIGURE 6.9 – Résultats des simulations pour une température de consigne de  $78^{\circ}C$ .

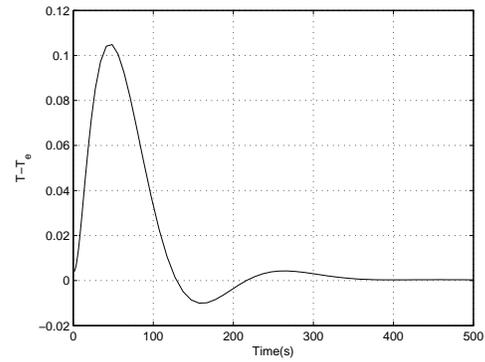
Afin d'illustrer l'efficacité de la commande par retour d'état proposée, le cas d'une pile de grande taille à été étudié. Il s'agit d'une PEMFC qui opère dans les conditions données par TABLE 6.6. Les résultats de simulation sont donnés par FIGURE 6.10.

TABLE 6.6 – Dimension de la PàC.

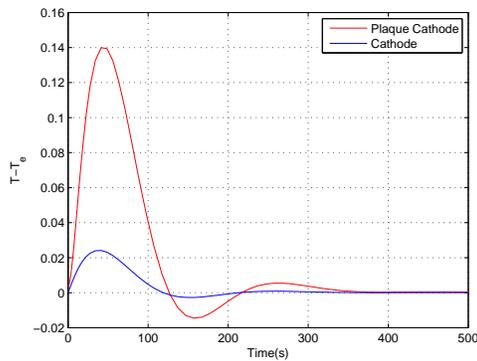
Paramètre	Valeur	Paramètre	Valeur
$h_c$	0.4 cm	$h_m$	28 cm
$h_v$	0.2 cm	$T_{gaz}$	$90^\circ C$
$h_p$	30	$T_{amb}$	$25^\circ C$
$L$	30	I	$1.5 Acm^{-2}$
T	$82^\circ C$	$T_e$	$80^\circ C$



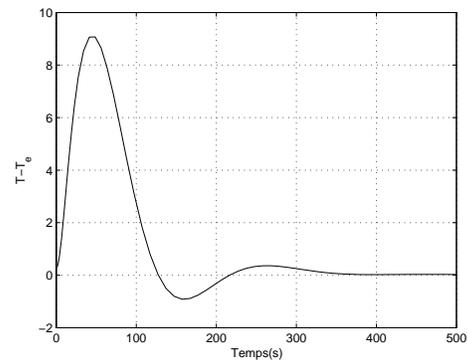
(a) Variation de  $\Delta T$  dans la plaque anode



(b) Variation de  $\Delta T$  dans l'anode



(c) Variation de  $\Delta T$  dans le compartiment cathode



(d) Variation de  $\Delta T$  de la membrane

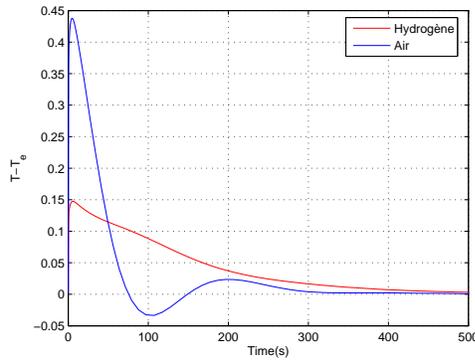
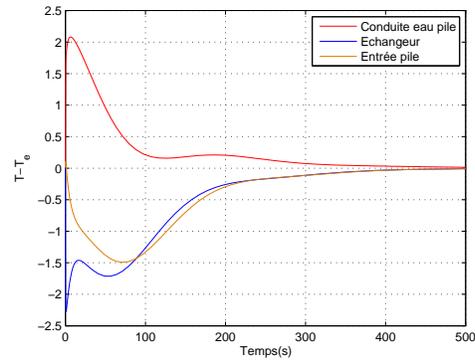

 (e) Variation de  $\Delta T$  des gaz

 (f) Variation de  $\Delta T$  dans le système de refroidissement

 FIGURE 6.10 – Résultats des simulations pour une température de consigne de  $80^\circ C$ .

## II-Résultat global

Parmi les stratégies pour la synthèse d'une loi de commande pour les systèmes bilinéaires il y a celle fondée sur le résultat de Proposition 2. La loi de commande donnée par (6.49) dépend de l'existence d'une matrice  $P$ . Cette dernière peut être calculée, en utilisant un algorithme numérique [Polak et Mayne, 1973], en fonction des valeurs numériques des éléments de  $A$ ,  $B_i (i = 1 \dots 3)$  et  $b_i (i = 1 \dots 3)$ .

Cette approche est tout à fait adaptée à la méthodologie, fondée sur le raisonnement numérique, développé dans ce mémoire. Cependant, l'algorithme est complexe et n'a pu être exploité dans le cadre de la thèse.

La stratégie de commande globale adoptée dans ce travail, illustrée à travers un exemple de la littérature, se décline en deux étapes. La première étape consiste à ramener par action rétroactive la température dans un voisinage proche de consigne. Puis, et lors de la deuxième étape, on synthétise une deuxième loi de commande par utilisation du résultat local décrit dans le sous paragraphe précédent.

Considérons le cas de la pile dont les caractéristiques géométriques sont données dans [Gerbraux, 1996]. Le modèle de comportement est donné par

$$\dot{x} = A^\sigma x + \sum_{i=1}^m u_i (B_i x + b_i) \quad (6.54)$$

où



Il est à noter, et pour des raisons de simplicité, que la fonction « Round » de Matlab a été systématiquement appliquée aux coefficients des matrices, des vecteurs et aux différentes constantes.

Le spectre de  $A^\sigma$  est donné par

$$\mathcal{S}p(A^\sigma) = \{0, -4, -7, -700, -1, -6, -2, -85, -3 - 8i, -3 + 8i, 15, 775\} .$$

Tout d'abord, on réécrit le système (6.54) dans l'espace des vecteurs propres de  $A^\sigma$ . Des calculs directs montrent que le système (6.54) s'écrit

$$\dot{\bar{x}} = \bar{A}^\sigma \bar{x} + \sum_{i=1}^m u_i (\bar{B}_i x + \bar{b}_i) \quad (6.55)$$

où

$$\bar{A}^\sigma = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -4 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -7 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -700 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -6 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -85 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -3 & -8 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 8 & -3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 15 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 775 \end{pmatrix},$$

$$\bar{B}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -71 & -3 & -605 & -2237 & 0 & 69 \\ 0 & 0 & 990 & 0 & -117 & -47 & 182 & -314 & -88 & 220 & 0 & -730 \\ 0 & 0 & -6385 & 0 & 48 & -220 & -1642 & 3629 & 5795 & -1158 & 0 & 4793 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -254 & -189 & -171 & 579 & 0 & 1 & 0 & 32 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -356 & -265 & -240 & 811 & 0 & -1 & 0 & 45 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -17 & -13 & -9 & 39 & 19 & 71 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 867 & 645 & 586 & -1976 & 7 & 26 & 0 & -111 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -45 & -1 & -385 & -1423 & 0 & 44 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -68 & -2 & -575 & -2128 & 0 & 66 \\ 0 & 0 & -865 & 0 & -98 & -108 & -299 & 730 & 738 & -333 & 0 & 668 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 53 & 0 & -10 & -26 & -98 & 0 & 2 & 2 \end{pmatrix},$$

$$\bar{B}_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -3192 & -1417 & 0 & -26 & -4 & -181 & 318 & 378 & -726 & 3153 & 1303 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 3606 & 0 & 131 & 192 & 1155 & -2534 & -2448 & 2611 & -3192 & -2805 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$\bar{b}_1 = \begin{pmatrix} 505 \\ -106 \\ -3132 \\ 0 \\ -1358 \\ -1901 \\ -107 \\ 4629 \\ 320 \\ 478 \\ -944 \\ 46 \end{pmatrix}, \bar{b}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1010 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 2288 \\ 0 \end{pmatrix}, \bar{b}_3 = \begin{pmatrix} -2 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Dans ce qui suit, on pose

$$u_3 = \alpha \bar{x}_1, \quad \alpha > 0 \quad (6.56)$$

et on utilisera  $X_1$  et  $X_2$  pour désigner les vecteurs définis par

$$X_1 = \begin{pmatrix} \bar{x}_1 & \bar{x}_2 & \dots & \bar{x}_{10} \end{pmatrix}^T \text{ et } X_2 = \begin{pmatrix} \bar{x}_{11} \\ \bar{x}_{12} \end{pmatrix}.$$

On considère  $V$  la fonction de Lyapounov définie par

$$V(x) = \frac{1}{2} \|X_1\|_{\lambda < 0}^2 + \delta_1 \ln \left( \frac{1}{2} \left( \frac{\varepsilon}{\lambda_{11}} \bar{x}_{11}^2 + \theta \frac{\varepsilon}{\lambda_{12}} \bar{x}_{12}^2 \right) + 1 \right) \quad (6.57)$$

où

$$\|X_1\|_{\lambda < 0}^2 = \frac{1}{\alpha} \bar{x}_1^2 - \sum_{i=1}^2 \frac{1}{\lambda_i} \bar{x}_i^2 \quad (6.58)$$

$\varepsilon$  et  $\delta_1$  sont des réels positifs qui seront choisis par la suite.

Nous avons

$$\nabla V^T = \begin{bmatrix} \frac{1}{\alpha} \bar{x}_1 \\ \frac{1}{\lambda_2} \bar{x}_2 \\ 0 \\ \cdot \\ \cdot \\ 0 \\ \frac{1}{\lambda_{10}} \bar{x}_{10} \\ \delta_1 \frac{\varepsilon}{\lambda_{11}} \frac{\theta \bar{x}_{11}}{\varepsilon \bar{x}_{11}^2 + \theta \varepsilon \bar{x}_{12}^2 + 1} \\ \delta_1 \frac{\varepsilon}{\lambda_{12}} \frac{\theta \bar{x}_{12}}{\varepsilon \bar{x}_{11}^2 + \theta \varepsilon \bar{x}_{12}^2 + 1} \end{bmatrix}.$$

On pose

$$\begin{cases} u_1 = -\delta_2 \langle \nabla V(\bar{x}), \bar{B}_1 + \bar{b}_1 \rangle \\ u_2 = -\delta_2 \langle \nabla V(\bar{x}), \bar{B}_2 + \bar{b}_2 \rangle \end{cases} \quad (6.59)$$

La dérivé de  $V$  le long des trajectoires du système bouclé (6.55) et (6.59) est donné par

$$\dot{V}(x) = -\|X_1\|^2 + \delta_1 \frac{\varepsilon \bar{x}_{11}^2 + \theta \varepsilon \bar{x}_{12}^2}{\varepsilon \bar{x}_{11}^2 + \theta \varepsilon \bar{x}_{12}^2 + 1} - \delta_2 \sum_{i=1}^2 \langle \nabla V(\bar{x}), \bar{B}_i \bar{x} + \bar{b}_i \rangle^2 \quad (6.60)$$

nous avons

$$\left| \delta_1 \frac{\varepsilon \bar{x}_{11}^2 + \theta \varepsilon \bar{x}_{12}^2}{\varepsilon \bar{x}_{11}^2 + \theta \varepsilon \bar{x}_{12}^2 + 1} \right| < \delta_1 \quad (6.61)$$

Il vient alors que pour  $x$  telle que  $\|X_1\|^2 > \delta_1$ , on a  $\dot{V}(x) < 0$ . Reste à traiter le cas où  $x$  est telle que  $\|X_1\|^2 < \delta_1$ .

Numériquement, dans ce cas, les vecteurs de contrôle  $\bar{B}_i \bar{x} + \bar{b}_i$  ( $i=1,2$ ) sont donnés par

$$\bar{B}_1 \bar{x} + \bar{b}_1 = \begin{bmatrix} 737\bar{x}_9 - 417\bar{x}_{10} + 505 \\ 990\bar{x}_3 + 43\bar{x}_7 - 12\bar{x}_8 - 558\bar{x}_9 - 464\bar{x}_{10} - 106 \\ -6385\bar{x}_3 - 3927\bar{x}_7 - 98\bar{x}_8 + 3180\bar{x}_9 + 3234\bar{x}_{10} - 3132 \\ 0 \\ 8\bar{x}_7 + 22\bar{x}_9 - 12\bar{x}_{10} - 1358 \\ 3\bar{x}_7 + 15\bar{x}_9 - 9\bar{x}_{10} - 1901 \\ -2487\bar{x}_7 - 46\bar{x}_8 + \bar{x}_{12} - 107 \\ -1081\bar{x}_7 - 20\bar{x}_8 + 4629 \\ -1965\bar{x}_9 + 1117\bar{x}_{10} + 320 \\ 954\bar{x}_9 - 542\bar{x}_{10} + 478 \\ -856\bar{x}_3 - 87\bar{x}_4 - 5\bar{x}_8 - 729\bar{x}_9 - 268\bar{x}_{10} - 944 \\ 115\bar{x}_7 + 2\bar{x}_8 + 46 \end{bmatrix}$$

et

$$\bar{B}_2 \bar{x} + \bar{b}_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ -3192\bar{x}_2 - 1417\bar{x}_7 - \bar{x}_8 - 81\bar{x}_{10} + 3153\bar{x}_{11} + 1010 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 3603\bar{x}_3 + 3009\bar{x}_8 + 2288 - 3276\bar{x}_9 - 856\bar{x}_{10} - 3192\bar{x}_{11} \end{bmatrix}.$$

Des calculs directs montrent que

$$\begin{aligned} \langle \nabla V(\bar{x}), \bar{B}_1 \bar{x} + \bar{b}_1 \rangle &= P_1(X_1) + \frac{\varepsilon \delta_1}{\lambda_{11}(\varepsilon \bar{x}_{11}^2 + \varepsilon \bar{x}_{12}^2 + 1)} \bar{x}_{11} [-8865\bar{x}_3 - 878\bar{x}_7 \\ &\quad - 5\bar{x}_8 - 729\bar{x}_9 - 268\bar{x}_{10} - 944] \\ &\quad + \bar{x}_{12} \left[ \frac{\theta \varepsilon \delta_1}{\lambda_{12}(\varepsilon \bar{x}_{11}^2 + \varepsilon \bar{x}_{12}^2 + 1)} (115\bar{x}_7 + 2\bar{x}_8 + 46) - \frac{1}{\lambda_7 \bar{x}_7} \right] \end{aligned} \quad (6.62)$$

et

$$\begin{aligned} \langle \nabla V(\bar{x}, \bar{B}_2 \bar{x} + \bar{b}_2) \rangle &= P_2(X_2) + \bar{x}_{11} \left[ \frac{\varepsilon \delta_1}{\lambda_{12}(\varepsilon \bar{x}_{11}^2 + \varepsilon \bar{x}_{12}^2 + 1)} (3603 \bar{x}_3 + 3009 \bar{x}_7 - \frac{3153}{\lambda_2} \bar{x}_2 \right. \\ &\quad \left. + 2283) \right] + \frac{\varepsilon \delta_1 \theta}{\lambda_{12}(\varepsilon \bar{x}_{11}^2 + \varepsilon \bar{x}_{12}^2 + 1)} \bar{x}_{12} [-3276 \bar{x}_9 - 856 \bar{x}_{10} - 3192 \bar{x}_{11}] \end{aligned} \quad (6.63)$$

où  $P_i$  ( $i=1,2$ ) sont des polynômes tels que  $P_i(0_{\mathcal{R}^{10}})$ <sup>20</sup>.

Pour  $X_1 = 0_{\mathcal{R}^{10}}$ , nous avons

$$\begin{cases} \langle \nabla V(\bar{x}), \bar{B}_1 \bar{x} + \bar{b}_1 \rangle = \varepsilon \delta_1 \left[ \frac{-944}{\lambda_{11}} \bar{x}_{11} + \frac{46}{\lambda_{12}} \theta \bar{x}_{12} \right] \\ \langle \nabla V(\bar{x}), \bar{B}_2 \bar{x} + \bar{b}_2 \rangle = \varepsilon \delta_1 \left[ \frac{2288}{\lambda_{11}} \bar{x}_{11} - \frac{3192}{\lambda_{12}} \theta \bar{x}_{11} \bar{x}_{12} \right] \end{cases} \quad (6.64)$$

Un raisonnement simple montre que la solution du système

$$\begin{cases} \langle \nabla V(\bar{x}), \bar{B}_1 \bar{x} + \bar{b}_1 \rangle = 0 \\ \langle \nabla V(\bar{x}), \bar{B}_2 \bar{x} + \bar{b}_2 \rangle = 0 \end{cases} \quad (6.65)$$

autre que  $(\bar{x}_{11}, \bar{x}_{12}) = (0, 0)$  est donnée par

$$\begin{cases} \bar{x}_{11} = 0.035 \\ \bar{x}_{12} = \frac{37}{\theta} \end{cases} \quad (6.66)$$

Il est à noter que pour  $\theta$  suffisamment grand  $\bar{x}_{12}$  est proche de zéro.

Maintenant pour  $|X_1| < \delta_1$  où  $\delta_1$  suffisamment petit, les solutions du système

$$\begin{cases} \langle \nabla V(\bar{x}), \bar{B}_1 \bar{x} + \bar{b}_1 \rangle = 0 \\ \langle \nabla V(\bar{x}), \bar{B}_2 \bar{x} + \bar{b}_2 \rangle = 0 \end{cases} \quad (6.67)$$

---

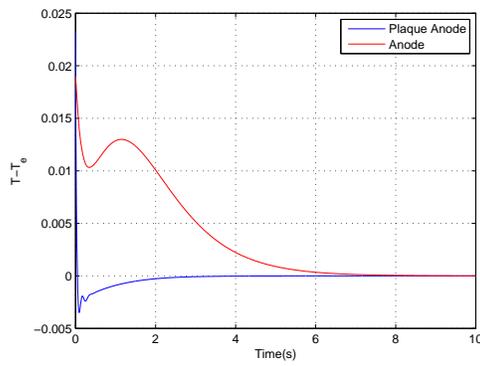
20.  $0_{\mathcal{R}^n}$  désigne le vecteur nul de  $\mathcal{R}^n = 0$

sont proches de  $0_{\mathcal{R}^{10}}$  ou de la valeur particulière de  $X_2$  donné par (6.66).

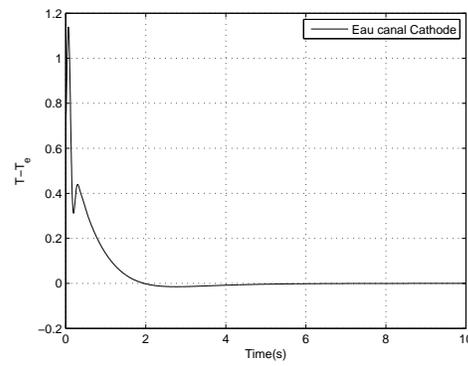
Finalement, la dérivé de  $V$  le long des trajectoires peut être rendue négative strictement à l'extérieur d'une boule centrée à l'origine et de rayon assez petit. Ce qui termine la première étape de la stratégie.

La deuxième étape consiste à utiliser le résultat sur la stabilisation locale décrit dans le paragraphe précédent. En utilisant le programme fondé sur l'algorithme donné par Algorithm 3, on montre que la paire  $(A^\sigma, [b_1, b_2, b_3])$  est commandable et donc on peut procéder à un placement de pôles pour stabiliser localement le système.

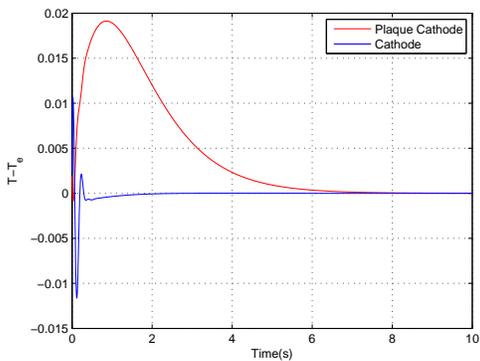
Les courbes données par FIGURE 6.11 illustrent les résultats des simulations sur la pile considérée et montrent la sabilisation.



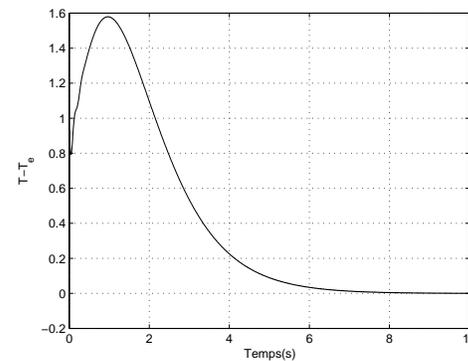
(a) Variation de  $\Delta T$  dans le compartiment anode



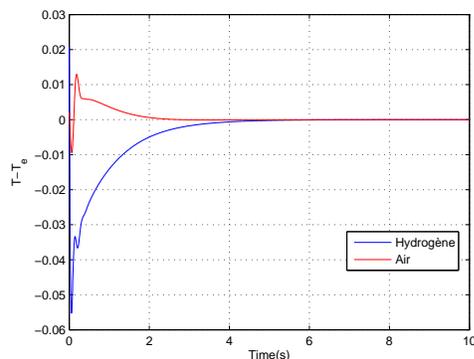
(b) Variation de  $\Delta T$  dans le canal eau cathode



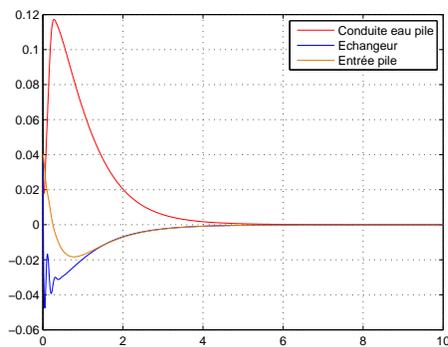
(c) Variation de  $\Delta T$  dans le compartiment cathode



(d) Variation de  $\Delta T$  de la membrane



(e) Variation de  $\Delta T$  des gaz



(f) Variation de  $\Delta T$  dans le système de refroidissement

FIGURE 6.11 – Résultats des simulations pour une température de consigne de  $80^{\circ}\text{C}$ .

## 6.5 Conclusion

Dans ce chapitre, une stratégie de stabilisation par retour d'état a été proposée en vue de contrôler la température de la pile à combustible PEMFC. Les modèles de contrôle du comportement thermique considérés sont sous forme bilinéaire. La stratégie de contrôle se décline en deux étapes. Dans un premier temps, en utilisant une première action rétroactive, il a été montré que les trajectoires du système tendent vers une boucle autour de l'origine. Puis, dans un deuxième temps, en vu que le système est localement stabilisable, on synthétise une loi linéaire qui assure la stabilisation locale. Les résultats sont concluants et montrent la pertinence de la méthode pour le contrôle de la température locale des PEMFC.

# Conclusion et perspectives

Le transfert thermique à travers la pile à combustible a beaucoup été étudié d'un point de vue théorique et expérimental. L'effort s'est particulièrement orienté sur la détermination des champs des températures dans la cellule de la PàC et parfois dans les canaux d'alimentation en réactifs.

Le travail présenté dans ce mémoire a porté d'une part, à la description du comportement thermique d'une pile à combustible et, d'autre part, au contrôle de la température du stack en vue d'homogénéiser la répartition du flux de chaleur qui traverse la PàC. Ce travail nous a permis d'étudier les transferts de chaleur couplés par convection et conduction à travers un milieu hétérogène. Plus précisément de la modélisation thermique tridimensionnelle d'une PàC du type PEMFC par une approche nodale sans couplage avec une autre technique de discrétisation connue, les différences finies à titre d'exemple. Le sujet que nous avons traité fait l'objet d'un nombre important de recherches en raison de ses applications industrielles variées, notamment en ce qui concerne les questions d'intégration de la PEMFC dans l'application automobile.

La première partie de ce travail consistait à développer un modèle de simulation thermique de PEMFC. En particulier, il s'agissait d'étudier les transferts de chaleur couplés par conduction et convection en régime non stationnaire. Pour ce faire, nous avons proposé un modèle tridimensionnel qui se présente comme une application de l'approche nodale sur tout le stack. Ce modèle prend aussi en considération les variations des températures dans les canaux des gaz.

L'approche nodale adoptée pour la modélisation thermique de la PàC été généralisée afin d'éviter le problème de couplage entre de différents codes, pénalisant pour le temps de simulation. En effet, grâce à la notion de la conductance thermique équivalente représentant le couplage conduction/convection et, la conductance fluide décrivant le mouvement des particules du fluide, nous étions en mesure de décrire le phénomène thermique de la pile à combustible sans utiliser les équations de Navier-Stokes couplées à

l'équation de la chaleur. Cependant, nous nous sommes servis des corrélations sur les écoulements dans les conduites pour définir les coefficients d'échanges.

Dans la deuxième partie de notre travail, nous avons utilisé le calcul parallèle pour la simulation du modèle thermique de la PàC. La question posée a été comment peut-on améliorer les performances des calculs de simulations et en particulier pour des problèmes de plus grande taille. Pour cela, trois différentes bibliothèques du calcul parallèles ont été utilisées.

L'étude des performances de ces trois bibliothèques a montré leur convergence pour des problèmes nodaux. Un point très positif réside dans la convergence de la méthode nodale. En effet, la parallélisation de la méthode des différences finies montre que le temps de simulation est plus important que celui obtenu avec l'approche nodale. Nous pouvons donc conclure que l'approche nodale est mieux adaptée aux problèmes de parallélisation.

Une autre considération concerne le nombre d'itérations lors de la résolution par l'approche nodale qui est plus faible par rapport au nombre d'itérations utilisé dans la résolution par la méthode itérative des différences finies. De ce fait, l'utilisation de l'approche nodale sur les grilles de calcul où les communications entre les processus représentent une partie considérable du temps de calcul global, pourrait être très avantageuse.

La troisième partie de ce mémoire a concerné le contrôle de la température du stack de la PàC. Le modèle de contrôle du comportement thermique considéré est sous forme bilinéaire. Le problème a été abordé en deux temps.

Il a été montré dans un premier temps, en utilisant une première action rétroactive, que les trajectoires du système tendent vers une boule autour de l'origine. Puis, dans un deuxième temps, la stabilisation locale a été assurée en synthétisant une loi linéaire.

En perspectives, il est important de signaler que l'approche nodale ne se limite pas uniquement à décrire des problèmes de la thermique. En effet, grâce à la notion de conductance, tout phénomène physique peut être représenté à l'échelle d'un réseau de nœuds. Dans le cas de la pile PEMFC, les phénomènes de transport de masse dans les électrodes poreuses sont souvent décrits par les équations de Stefan-Maxwell. Ce type de problème est représenté par des équations aux dérivées partielles dont la résolution devient compliquée à cause du problème de couplage.

Cependant, il est possible de transformer l'équation du bilan de masse en une équation

tion algébrique tout en introduisant des conductance de type hydrauliques. Comme nous l'avons constaté avec le bilan thermique de la PaC, ce type d'écriture est plus adaptable au calcul parallèle. C'est donc une des perspectives de cette thèse.



# Bibliographie

- [Ananth *et al.*, 2002] G. Ananth, A. Gupta, G. Karypis et V. Kumar (2002). Introduction to Parallel Computing : Design and Analysis of Algorithms, Lavoisier, éd. The Benjamin-Cummings Publishing Compagny.
- [Argypoulos *et al.*, 1999a] P. Argypoulos, K. Scott et W. M. Taama (1999). One-Dimensional Thermal Model for Direct Methanol Fuel Cell Stacks Part I. Model Development, *J. Power Sources*, volume 49, pp. 79–169.
- [Argypoulos *et al.*, 1999b] — (1999). One-Dimensional Thermal Model for Direct Methanol Fuel Cell Stacks Part II. Model Based Parametric Analysis and Predicted Temperature Profiles, *J. Power sources*, volume 49, pp. 79–169.
- [Bacciotti et Ceragioli, 2006] A. Bacciotti et F. Ceragioli (2006). Closed Loop Stabilization of Planar Bilinear Switched Systems, *Int. J. control*, volume 79, pp. 14–23.
- [Bastos, 1988] F. Bastos (1988). Extension de la Méthode Nodale à la Modélisation des Transferts Couplés Conduction-Convection dans un Canal : Application à la Thermique du Bâtiment et aux Cartes Electroniques, Thèse de doctorat, Poitiers.
- [Bûchel *et al.*, 2002] J. P. Bûchel, J. Lisse et S. Bernard (2002). Prospects of Different Fuel Cell Technologies for Vehicle Applications, *J. Power Sources*, volume 108, pp. 139–152.
- [Bernardi et Verbrugge, 1991] D. Bernardi et M. Verbrugge (1991). Mathematical Model of the Solid-Polymer-Electrolyte, *J. AIChE*, volume 37, numéro 8, pp. 1151–1163.
- [Bernay *et al.*, 2002] C. Bernay, M. Marchant et M. Cassir (2002). Prospect of Different Fuel Cell Technologies for Vehicle Applications, *J. Power sources*, volume 108, pp. 139–152.
- [Bezian, 1998] J. Bezian (1998). Systèmes Pile à Combustible pour la Cogénération : Etat de l'Art, Ecole des Mines de Paris, Rapport technique.
- [Birgersson *et al.*, 2005] E. Birgersson, Nojonen, M. et M. Vynnycky (2005). Analysis of

- a Two-Phase Non-Isothermal Model for a PEFC, *J. Electrochem. Soc.*, volume 152, pp. A1021–A1034.
- [Bonnet *et al.*, 2008] C. Bonnet, S. Didierjean, N. Guillet, S. Besse et T. Colinart (2008). Design of an 80 kWe PEM Fuel Cell System : Scale Up Effect Investigation, *J. Power Sources*, volume 182, pp. 441–448.
- [Cantonnet, 2006] F. Cantonnet (2006). The Performance and Productivity Analysis of Global Address Space Programming Models : The Case of the Unified Parallel C Language, Thèse de doctorat, IPDPS/PMEO'04, George Washington University.
- [Cantonnet *et al.*, 2004] F. Cantonnet, Y. Yao, M. Zahran et T. El-Ghazawi (2004). Productivity Analysis of the UPC Language. 18th International Parallel and Distributed Processing Symposium (IPDPS'04) - Workshop 14 p. 254a.
- [Chemin *et al.*, 2003] S. Chemin, M. Errera, F. Feyel, G. Chaineray et M. Lachi (2003). Coupling of Scientific Computer Codes : Numerical Simulation of a Fluid-Structure Thermal Coupling, Thèse de doctorat, Reims, France.
- [Chen et Tsao, 2000] M. Chen et S. Tsao (2000). Exponential Stabilisation of Class of Unstable Bilinear System, *IEEE Transaction on Automatic Control*, volume 45, pp. 989–992.
- [Cheng et Chang, 2005] C. Cheng et M. Chang (2005). Prediction of Internal Temperature Distribution of PEMFCs by Industriuctive Inverse Method, *J. Power Sources*, volume 139, pp. 115–125.
- [Costamagna et Srinivasan, 2001b] — (2001). Quantum Jumps in the PEMFC Science and Technology From the 1960s to the Year 2000 (PartII). Engineering, Technology Development and Application Aspects, *J. Power Sources*, volume 102, pp. 253–269.
- [Costamagna et Srinivasan, 2001c] — (2001). Transport Phenomena in Polymeric Membrane Fuel Cells, *Chem. Eng. Sc.*, volume 56, pp. 323–332.
- [Decrensefond et Maruani, 2005] L. Decrensefond et A. Maruani (2005). Etude de l'Equation de la Chaleur. Springer Paris.
- [Djilali et Lu, 2002] N. Djilali et D. Lu (2002). Influence of Heat Transfer on Gas and Water Transport in Fuel Cells, *Inter. J. Therm. Sci.*, volume 41, pp. 29–40.
- [Dumercy, 2004] L. Dumercy (2004). Contribution à la Caractérisation Thermique et Fluide d'une Pile à Combustible à Membrane Echangeuse de Protons (PEMFC)., Thèse de doctorat, Université de Technologie de Belfort-Montbéliard (UTBM), France.

- 
- [Dumercy *et al.*, 2003] L. Dumercy, J. Kauffmann et L. Galous (2003). Transient Thermal Computation of a PEM Fuel Cell by a Nodal Modeling, *IEEE Vehicular Technology Conference*, volume 5, pp. 3299–3303.
- [El-Ghazawi, 2001] T. El-Ghazawi (2001). Programming in UPC (Tutorial). [upc.gwu.edu](http://upc.gwu.edu).
- [El-Ghazawi *et al.*, 2005] T. El-Ghazawi, W. Carlson, T. Sterling et K. Yelick (2005). UPC : Distributed Shared Memory Programming, T. Sterling, éd. John Wiley and Sons Inc.
- [España et Landau, 1978] E. España et D. Landau (1978). Reduced Order Bilinear Model for Distillation Columns, *Automatica*, volume 14, pp. 345–357.
- [Faghri et Guo, 2005] A. Faghri et Z. Guo (2005). Challenges and Opportunities of Thermal Management Issues Related to Fuel Technology and Modelling, *Inter J. Heat and Mass Transfer*, volume 48, pp. 3891–3920,.
- [Feidt, 1997] M. Feidt (1997). Thermodynamique des Piles à Combustible, Nancy, support de cours DESS EMI.
- [Feng *et al.*, 2004] Y. Feng, Y. Tzang, B. Pei, C. Sun et A. Su (2004). Analytical and Experimental Investigations of a Proton Exchange Membrane Fuel Cell, *Int. J. Hydrogen Energy*, volume 29, pp. 381–391.
- [Friede, 2004] W. Friede (2004). Modélisation et Caractérisation d’une Pile à Combustible du Type PEM, Thèse de doctorat, INPL, France.
- [Fuller et Newman, 1993] T. Fuller et J. Newman (1993). Water and Thermal Management in Solid Polymer-Electrolyte Fuel Cell, *J. Electrochem. Soc.*, volume 140, numéro 5, pp. 1218–1225.
- [Gaber, 1998] J. Gaber (1998). Plongement et Manipulation d’Arbres dans les Architectures Distribuées, Thèse de doctorat, Lille, France.
- [Ge et Yi, 2003] S. Ge et B. Yi (2003). A Mathematical Model for PEMFC in Different Flow Modes, *J. Power Sources*, volume 124, pp. 1–11.
- [Gerbraux, 1996] L. Gerbraux (1996). Modélisation d’une Pile à Combustible de type Hydrogène-Air et Validation Expérimentale, Thèse de doctorat, Grenoble, France.
- [Gurau *et al.*, 1998] V. Gurau, H. Liu et S. Kakac (1998). A Two Dimensional Model for Proton Exchange Fuel Cells, *AIChE. J.*, volume 44, numéro 11, pp. 2410–2422.
- [Gutman, 1981] P. Gutman (1981). Stabilization Controllers for Bilinear Systems, *IEEE Transaction on Automatic Control*, volume 25, pp. 917–922.

- [Hauff et Bolwin, 1995] S. Hauff et K. Bolwin (1995). Thermal Relaxation During Dynamic Fuel Cell Operation, *J. Power Sources*, volume 55, pp. 167–176.
- [Hernandez, 2006] A. Hernandez (2006). Diagnostique d’une Pile à Combustible de Type PEMFC, Thèse de doctorat, UTBM, Belfort, France.
- [Jacobson, 1977] D. H. Jacobson (1977). Extension of Linear Quadratic Control, Optimization and Matrix Theory, *London : Academic*.
- [John H. IV et John H. V, 2004] L. John H. IV et L. John H. V (2004). A Heat Transfer Textbook, U. Cambridge, Mass Chusetts, éd. Phlogiston Press.
- [Karl et Günter, 1996] K. Karl et S. Günter (1996). Fuel Cells and Their Applications, Hardcover, éd. Wiley-VCH, édition 1.
- [Kathryn, 2004] O. Kathryn (2004). Etude du Refroidissement des Plaques Bipolaires de Piles à Combustibles, Thèse de doctorat, Henri Poincaré-Nancy, France.
- [Kilindjian, 1998] C. Kilindjian (1998). Etude Thermique de Tableaux Electriques BT, Schneider, Rapport technique.
- [Koivo et Cojocanu, 1977] H. Koivo et R. Cojocanu (1977). An Optimal Control for Circuit, *Automatica*, volume 13, pp. 37–45.
- [Kulikovsky, 2006] A. Kulikovsky (2006). Heat Balance in the Catalyst Layer and the Boundary Condition for Heat Transport Equation in a Low-Temperature Fuel Cell, *J. Power Sources*, volume 162, pp. 1236–1240.
- [Lachaise, 2004] J. Lachaise (2004). Etude des Stratégies et des Structures de Commande pour le Pilotage des Systèmes Energétiques à Pile à Combustible (PAC) Destinés à la Traction, Thèse de doctorat, INP Toulouse, France.
- [Larminie et Dicks, 2000] J. Larminie et A. Dicks (2000). Fuel Cell System Explained, Wiley, éd. Wiley.
- [Lasbet et Auvity, 2006] Y. Lasbet et B. Auvity (2006). A Chaotic Heat-Exchanger for PEMFC Cooling Applications, *J. Power Sources*, volume 156, numéro 1, pp. 114–118.
- [Leduc, 1994] T. Leduc (1994). PVM : Parallel Virtual machine, Massachusetts Institute of Technology, Rapport technique 145.
- [Litster *et al.*, 2006] S. Litster, J. Pharoah, G. McLeana et N. Djilali (2006). Computational Analysis of Heat and Mass Transfer in a Micro-Structured PEMFC Cathode, *J. Power Sources*, volume 156, numéro 2, pp. 334–344.

- 
- [Liu et Zhou, 2003] H. Liu et T. Zhou (2003). Fuel Cell Performance Augmentation : Mass Transfer Enhancement, *J. Heat Transfer*, volume 10, numéro 3, pp. 257–274.
- [Longchamp, 1980] R. Longchamp (1980). Stable Feedback Control of Bilinear System, *IEEE Transaction on Automatic Control*, volume 25, pp. 302–306.
- [Mayer, 2004] J. Mayer (2004). Etude des Modes de Dégradation de Membranes Polyimides Sulfonés en Pile à Combustible H<sub>2</sub>/O<sub>2</sub>, Thèse de doctorat, University Blaise Pascal, France.
- [Mennola *et al.*, 2003] T. Mennola, M. Noponen, M. Aronniemi, T. Hottinen, M. Mikkola, O. Himanen et P. Lund (2003). Mass Transport in the Cathode of a Free-Breathing Polymer Electrolyte Membrane Fuel Cell, *J. Appl. Electrochem*, volume 33, pp. 979–987.
- [Modale et Srinivasan, 1995] R. Modale et S. Srinivasan (1995). Analysis of Performance and of Water and Thermal Management in Proton Exchange Membrane Fuel Cells, *Electrochimica Acta*, volume 40, numéro 4, pp. 413–421.
- [Mohler, 1973] R. Mohler (1973). Bilinear Control Processes : With Application to Engineering, Ecology and Medecine. Academic Press.
- [Mohler et Eds, 1973] R. Mohler et A. R. Eds (1973). Recent Development in Variable Structure Systems, Economics and Biology, *New York : Academic*.
- [Montenay, 2000] A. Montenay (2000). Analyse Numérique de l’Aérothermique d’Aubages et de Cavités de Turboréacteurs, Thèse de doctorat, Paris 6, France.
- [Nguyen *et al.*, 2004] P. Nguyen, T. Berning et N. Djilali (2004). Computational Model of a PEM fuel Cell With Serpentine Gas Flow Channels, *J. Power Sources*, volume 130, pp. 149–157.
- [Nguyen et Vanderborgh, 1998] T. Nguyen et N. Vanderborgh (1998). The Rate of Isothermal Hydratation of Polyperfluorosulfonic Acid Membranes, *J. Membrane Science*, volume 143, pp. 235–248.
- [O’Haye *et al.*, 2003] A. O’Haye, B. Fabian, B. Lee, B. Fritz et B. Priza (2003). Lateral Ionic Conduction in Planar Array Fuel Cells, *J. Electrochem. Soc.*, volume 150, pp. 430–438.
- [Oseen-Senda, 2006] K. Oseen-Senda (2006). Etude du Refroidissement des Plaques Bipolaires de Piles à Combustibles, Thèse de doctorat, UHP, France.
- [Pachero, 1997] P. Pachero (1997). Parallel Programming with MPI, Morgan kaufmann publishers.

- [PADET, 1994] J. PADET (1994). *Echangeurs Thermiques*, Masson, éd. Masson.
- [Polak et Mayne, 1973] E. Polak et D. Q. Mayne (1973). On the Finite Solution of Non-linear Theory, *IEEE Transaction on Automatic Control*, volume AC 18, pp. 460–465.
- [Promislow *et al.*, 2005] K. Promislow, W. B et S. A (2005). Mathematical Model of Thermal Coupling in Fuel Cell Stacks, *J. Power Sources*, volume 150, pp. 129–135.
- [Ramousse *et al.*, 2005] J. Ramousse, J. Deseure, O. Lottin, S. Didierjean et D. Maillet (2005). Modelling of Heat, Mass and Charge Transfer in Single Cell, *J. Power Sources*, volume 145, pp. 416–427.
- [Rayan et Buckingham, 1983] E. P. Rayan et M. J. Buckingham (1983). On Asymptotically Stabilizing Feedback Control of Bilinear Systems, *IEEE Transaction on Automatic Control*, volume AC-28, pp. 863–864.
- [Rowe et Li, 2001] A. Rowe et W. Li (2001). Mathematical Modeling of Proton Exchange Membrane Fuel Cells, *J. Power Sources*, volume 102, pp. 82–96.
- [Saisset, 2004] R. Saisset (2004). Contribution à l'Etude Systémique de Dispositifs Energétiques à Composants Electrochimiques, Thèse de doctorat, INP toulouse, France.
- [Salah *et al.*, 2007a] A. Salah, G. Gaber et R. Outbib (2007). Numerical Simulation of PEM Fuel Cell Thermal Behavior by a Global Nodal Network Model, Dans *Conference on Systems and Control*, Morocco.
- [Salah *et al.*, 2006] A. Salah, J. Gaber, R. Outbib et A. E. Moudni (2006). Parallel Thermal Computation Model of PEM Fuel Cell, Dans *Conference on Parallel Processing for Scientific Computing*, San Francisco, USA.
- [Salah *et al.*, 2007b] A. Salah, O. Serres, J. Gaber, R. Outbib et H. El-Sayed (2007). Simulation of the Fuel Cell Thermal Behavior with Unified Parallel C, Dans *IEEE International Conference on Signal Processing and Communications*, Dubai.
- [Saulnier, 1980] J. Saulnier (1980). La Modélisation Thermique et ses Applications aux Transferts Couplés et au Contrôle Actif, Thèse de doctorat, Poitiers, France.
- [Schemrod, 1978] M. Schemrod (1978). Stabilization of Bilinear Control Systems with Application to Nonconservative Problems in Elasticity, *SIAM Journal on Control and Optimization*, volume 16, pp. 131–141.
- [Scott *et al.*, 2007] K. Scott, S. Pilditch et M. Mamlouk (2007). High Temperature Polymer Electrolyte Membrane Fuel Cell, *Journal of Applied Electrochemistry*, volume 37, pp. 1245–1259.

- 
- [Shan et Choe, 2006] Y. Shan et S. Choe (2006). Modeling and Simulation of a PEM Fuel Cell Stack Considering Temperature Effects, *J. Power Sources*, volume 158, pp. 274–286.
- [Springer *et al.*, 1991] T. Springer, T. Zawodzinski et S. Gottesfeld (1991). Polymer Electrolyte Fuel Cell Model, *J. Electrochemical Society*, volume 138, numéro 8, pp. 2334–2342.
- [Thomas *et al.*, 1993] A. Thomas, J. Zawodzinski, D. Charles, R. Susan, S. Ruth J, S. Van T, S. Thomas E et G. Shimshon (1993). Water Uptake by and Transport Through Nafion 117 Membranes, *J. Electrochemical Soc.*, volume 140, pp. 1041–1047.
- [Trabold, 2005] T. Trabold (2005). Minichannels in Polymer Electrolyte Membrane Fuel Cells, *Heat Transfer Eng*, volume 26, numéro 3, pp. 3–12.
- [Um et Wang, 2004] S. Um et C. Wang (2004). Three-Dimensional Analysis of Transport and Electrochemical Reactions in Polymer Electrolyte Fuel Cells, *J. Power Sources*, volume 125, pp. 40–51.
- [Um *et al.*, 2000b] S. Um, C. Wang et C. K.S (2000). Computational Fluid Dynamics Modeling of Proton Exchange Membrane Fuel Cells, *J. Electrochem. Soc.*, volume 147, numéro 12, pp. 4485–4493.
- [U.S.Department, 2004] U.S.Department (2004). Fuel Cell Handbook, Dans *U.S. Department of Energy Office of Fossil Energy National Energy Technology*, série 26507-0880, Laboratory P.O. Box 880 Morgantown, West Virginia.
- [Vandekan *et al.*, 1994] P. Vandekan, F. Moyen et G. Goncalves (1994). Guide du débutant PVM, rapport EUDIL.
- [Verbrugge et Hill, 1990] M. Verbrugge et R. Hill (1990). Transport Phenomena in Perfluorosulfonic Acid Membrane During the Passage of Current, *J. Electrochem. Soc.*, volume 137, numéro 4, pp. 1131–1138.
- [Wetton *et al.*, 2004] B. Wetton, K. Promislow et A. Caglar (2004). A Simple Thermal Model of PEM Fuel Cell Stacks, Dans *Proceedings of the Second International Conference on Fuel Cell Science, Engineering and Technology, Rochester*.
- [Wöhr *et al.*, 1998] M. Wöhr, K. Bolwin, W. Schnurnberger, M. Fisher, W. Neubrand et G. Eigenberger (1998). Dynamic Modelling and Simulation of a Polymer Membrane Fuel Cell including Mass Transport Limitation, *Int. J. Hydrogen Energy*, volume 23, numéro 3, pp. 213–218.

- [William *et al.*, 2001] C. William, E.-G. Tarek, N. Robert et Y. Kathy (2001). Parallel Programming Using A Distributed Shared Memory Model, SuperComputing (Tutorial), *International Parallel and Distributed Processing Symposium (IPDPS)*.
- [William *et al.*, 2003] — (2003). Programming in the Distributed Shared-Memory Model, SuperComputing ( Tutorial), *International Parallel and Distributed Processing Symposium (IPDPS)*.
- [Yi et Nguyen, 1998] J. Yi et T. Nguyen (1998). An Along-the-Channel Model for Proton Exchange Membrane Fuel Cells, *J. Electrochem. Soc.*, volume 145, numéro 4, pp. 1149–1159.
- [You et Liu, 2002] L. You et H. Liu (2002). A Two Phase Flow and Transport Model for the Cathode of PEM fuel Cells, *Int. J. Heat Mass Transfer*, volume 45, pp. 2277–2287.

# Annexe 1

## 1 Paramètres de la pile à combustible

Dans cet annexe, on donne les expressions et les grandeurs des différents paramètres du modèle de contrôle du comportement thermique de la pile à combustible.

TABLE 1 – Surfaces d'échange entre nœuds.

nœud	Expression des surfaces
nœud ① et nœud ②	$S_{pq}^e = 2(e_e^{ca} + h_e^{c,a})L_e^c N_{ce}$
nœud ② et nœud ③	$S_{pq}^{H_2} = 2(e_{H_2}^{ca} + h_{H_2}^{ca})L_{H_2}^c N_{ca}$
nœud ⑦ et nœud ⑧	$S_{pq}^{air} = 2(e_{air}^{ca} + h_{air}^{ca})L_{air}^c N_{cc}$
nœud ⑪	$S_{ech}^e = \frac{Q}{H_e \Delta T}$
nœud ⑫	$S_{tub} = S_{ech}^e$

TABLE 2 – Expression des conductances d'une cellule de la pile.

Conductance	Expression
$G_{2,H_2}$	$\frac{2k_p H_{H_2} h_{H_2}^{ca} L_{H_2}^c N_{ca}}{2k_p + H_{H_2} (e_{H_2}^{ca} + e_p)}$
$G_{6,air}^c$	$\frac{2k_p H_{air} h_{air}^{ca} L_{air}^c N_{cc}}{2k_p + H_{air} (e_{air}^{ca} + e_p)}$
$G_{2,eau}$	$\frac{2k_p H_{eau} h_{eau}^{ca} L_{eau}^c N_{ce}}{2k_p + H_{eau} (e_{eau}^{ca} + e_p)}$
$G_{6,eau}$	$\frac{2k_p H_{eau} h_{eau}^{ca} L_{eau}^c N_{ce}}{2k_p + H_{eau} (e_{eau}^{ca} + e_p)}$
$G_{3,2}$	$\frac{2k_p k_a h_v^a L_{H_2}^c}{(k_p e_a + k_a e_p) N_{ca}}$
$G_{3,4}$	$\frac{2k_a k_m h_a L}{k_m e_a + k_a e_p}$
$G_{4,5}$	$\frac{2k_m k_c h_a L}{k_m e_a + k_c e_p}$
$G_{5,6}$	$\frac{2k_c k_p h_v^c L_{air}^c}{(k_p e_a + k_a e_p) N_{cc}}$
$G_{v,a}$	$\phi_a \frac{P_{sat}}{P_a} \frac{M_{H_2}}{M_{H_2O}} c_{p_{H_2}} G_{2,H_2}$
$G_{v,c}$	$\phi_c \frac{P_{sat}}{P_c} \frac{M_{air}}{M_{H_2O}} c_{p_{air}} G_{air}$
$G_{air}$	$m_{air} c_{p_{air}}$
$G_{2,H_2}$	$m_{H_2} c_{p_{H_2}}$

TABLE 3 – Conductances du modèle de la pile.

Conductance	Expression	Valeur (W)
$g_1$	$H_e S_{pq,e}$	$[8.54e^{-1}, 1.10e^3]$
$g_2$	$G_{2,e}$	$[4.07e^{-1}, 4.40e^2]$
$g_3$	$-(G_{2,H_2} + G_{2,eau} + G_{air} + G_{3,2})$	$[-1.06e^7, -4.9e^4]$
$g_4$	$G_{3,2}$	$[1.15e^{-1}, 1.24e^1]$
$g_5$	$H_e S_{pq,e}$	$[9.96e^4, 2.13e^7]$
$g_6$	$H_e S_{pq,e}$	$[9.96e^4, 2.13e^7]$
$g_7$	$G_{3,2}$	$[1.15e^{-1}, 1.24e^1]$
$g_8$	$-(G_{3,2} + G_{3,4})$	$[-1.41e^3, -9.35e^{-1}]$
$g_9$	$G_{3,4}$	$[8.19e^{-1}, 1.39e^3]$
$g_{10}$	$G_{3,4}$	$[8.19e^{-1}, 1.39e^3]$
$g_{11}$	$-(G_{3,4} + G_{4,5})$	$[-2.79e^3, -1.63e^3]$
$g_{12}$	$-(G_{3,4} + G_{4,5})$	$[8.19e^{-1}, 1.39e^3]$
$g_{13}$	$G_{4,5}$	$[8.19e^{-1}, 1.39e^3]$
$g_{14}$	$(G_{4,5} + G_{5,6})$	$[-1.39e^3, -8.19e^{-1}]$

TABLE 4 – Conductances du modèle de pile (suite).

Conductance	Expression	Valeur (W)
$g_{15}$	$G_{5,6}$	$[1.15e^{-4}, 1.54e^{-2}]$
$g_{16}$	$H_{air}S_{pq,air}$	$[9.45e^3, 2.02e^6]$
$g_{17}$	$H_{air}S_{pq,air}$	$[9.45e^3, 2.02e^6]$
$g_{18}$	$G_{5,6}$	$[1.15e^{-4}, 1.54e^{-2}]$
$g_{19}$	$G_{6,air}$	$[1e^{-1}, 9e^{-1}]$
$g_{20}$	$-(G_{6air} + G_{6eau} + G_{6,air}^c + G_{56})$	$[-1.01e^6, -4.72e^3]$
$g_{21}$	$G_{6,eau}$	$[4.07e^{-1}, 4.40e^2]$
$g_{22}$	$H_e S_{pq,e}$	$[8.54e^{-1}, 1.1e^3]$
$g_{23}$	$H_e S_{pq,e}$	$[8.54e^{-1}, 1.1e^3]$
$g_{24}$	$-g_{22}$	$[-1.1e^3, -8.54e^{-1}]$
$g_{25}$	$-g_{22}$	$[-1.1e^3, -8.54e^{-1}]$
$g_{26}$	$g_{22}$	$[8.54e^{-1}, 1.1e^3]$
$g_{27}$	$-H_e S_{e,ec}$	$[6.79e^{-4}, 2.73e^4]$
$g_{28}$	$-H_e S_{e,ec}$	$[5.25e^{-7}, 4.20]$

TABLE 5 – Volumes des nœuds.

nœud	Expression du volume
nœud ①	$V_{e,a} = h_e^{ca} e_e^{ca} L.N_{ca}$
nœud ②	$V_{pq} = (e_p + e_{H_2}^{ca}) L h_p - N_{ca} (e_{H_2}^{ca} h_{H_2}^{ca} L)$
nœud ③	$V_{H_2} = h_{H_2}^{ca} e_{H_2}^{ca} L.N_{ca}$
nœud ④	$V_a = e_a h_a L$
nœud ⑤	$V_m = e_m h_m L$
nœud ⑥	$V_c = e_c h_c L$
nœud ⑦	$V_{air} = h_{air}^{ca} e_{air}^{ca} L.N_{cc}$
nœud ⑧	$V_{pq} = (e_p + e_{H_2}^{ca}) L h_p - N_{ca} (e_{H_2}^{ca} h_{H_2}^{ca} L)$
nœud ⑨	$V_{e,c} = h_e^{ca} e_e^{ca} L.N_{ca}$
nœud ⑩	$V_{cond,e} = 2N e_e^{ca} L_{eau}^c h_c$

TABLE 6 – Capacités thermiques des nœuds.

nœud	Expression des capacités
nœud ①	$C_{eau}^a = \rho_e c p_e V_e^a$
nœud ②	$C_{pq} = \rho_p c p_p V_{pq}$
nœud ③	$C_{H_2} = \rho_{H_2} c p_{H_2} V_{H_2}$
nœud ④	$C_a = \rho_a c p_a V_a$
nœud ⑤	$C_m = \rho_m c p_m V_m$
nœud ⑥	$C_c = \rho_c c p_c V_c$
nœud ⑦	$C_{air} = \rho_{air} c p_{air} V_{air}$
nœud ⑧	$C_{pq} = \rho_p c p_p V_{pq}$
nœud ⑨	$C_{eau}^c = \rho_e c p_e V_e^c$
nœud ⑩	$C_{10} = \rho_e c p_e V_e^{cond}$
nœud ⑪	$C_{eau}^{ech} = \rho_e c p_e V_e^{cond}$
nœud ⑫	$C_{12} = \rho_e c p_e V_e^{cond}$

# Annexe 2

## 1 Approche modale

Dans cet annexe, la méthode modale utilisée pour le calcul du correcteur par retour d'état est adressée.

La méthode modale repose sur le concept de placement de structure propre (valeurs propres et vecteurs propres). L'idée de base est de placer les valeurs propres du système, en garantissant, par l'intermédiaire du choix des vecteurs propres, certaines caractéristiques physiques telles que le découplage, la non interactivité, etc.

Prenons le système linéaire invariant décrit par son équation d'état

$$\dot{x} = A x(t) + B U(t) \quad (1)$$

ou  $u(t)$  est le vecteur de commande.

On supposera que le système est commandé par un retour statique de sorties, c'est à dire un retour de la forme  $u = -K y$ . Nous aurons alors en boucle fermé

$$\dot{x} = (A - B K) x(t) + B \quad (2)$$

On voit qu'on modifie la matrice  $A$  en  $A - B K$ . La commande par retour d'état affecte donc la dynamique du système, qui dépend maintenant des valeurs propres de  $A - B K$ .

Dans le cas mono-variable ou le vecteur commande est de dimension égale à 1, le choix des valeurs propres suffit pour le calcul de la matrice de gain  $K$ . Ce n'est pas le cas des systèmes à plusieurs entrées.

En effet, dans le cas d'un système à plusieurs commandes ( $\dim(u) > 1$ ), le choix des valeurs propres ne suffit pas à fixer la matrice  $K$ , il faut de plus s'intéresser aux vecteurs propres de  $A - B K$ .

Prenons l'équation liant chaque vecteur propre à sa valeur propre

$$(A - B K) v_i = \lambda_i v_i \quad (3)$$

ou  $v_i$  sont respectivement les valeurs propres et vecteurs propres de la matrice  $A$ .

Les inconnus de cette équation sont  $K$  et  $v_i$ . Posons  $w_i = K v_i$ . L'équation (3) se réécrit de la façon suivante

$$(A - \lambda_i I_n) v_i - B w_i = 0 \quad (4)$$

La matrice  $K$  est obtenue par la résolution de l'équation (4).