

Département d'Electrotechnique
Mémoire de projet de fin d'études

Pour l'obtention du diplôme d'ingénieur d'état en Electrotechnique option Technologies
d'Hydrogène

Développement d'un modèle dynamique et
simulateur d'un système d'électrolyse PEM

Présenté par : Ines AOUDIA

Sous la direction de : M. Farid KHOUCHA, *Dr, Enseignant à l'ENP d'Alger*

Présenté et soutenu le 01 juillet 2026

Composition du Jury :

Président :	M. Arezki SMAILI	Professeur à l'ENP d'Alger
Examineur :	M. Fouad KHALDI	Professeur à l'ENP d'Alger
Promoteur :	M. Farid KHOUCHA	Dr, Enseignant à l'ENP d'Alger
Promoteur :	M. Robin ROCHE	Professeur à l'UMLP et à FEMTO-ST
Promoteur :	Mme Marie-Cécile PERA	Professeure à l'UMLP et à FEMTO-ST
Promoteur :	Mme Elodie PAHON	Maître de Conférences HDR à l'UTBM et à FEMTO-ST

Département d'Electrotechnique
Mémoire de projet de fin d'études

Pour l'obtention du diplôme d'ingénieur d'état en Electrotechnique option Technologies
d'Hydrogène

Développement d'un modèle dynamique et
simulateur d'un système d'électrolyse PEM

Présenté par : Ines AOUDIA

Sous la direction de : M. Farid KHOUCHA, *Dr, Enseignant à l'ENP d'Alger*

Présenté et soutenu le 01 juillet 2026

Composition du Jury :

Président :	M. Arezki SMAILI	Professeur à l'ENP d'Alger
Examineur :	M. Fouad KHALDI	Professeur à l'ENP d'Alger
Promoteur :	M. Farid KHOUCHA	Dr, Enseignant à l'ENP d'Alger
Promoteur :	M. Robin ROCHE	Professeur à l'UMLP et à FEMTO-ST
Promoteur :	Mme Marie-Cécile PERA	Professeure à l'UMLP et à FEMTO-ST
Promoteur :	Mme Elodie PAHON	Maître de Conférences HDR à l'UTBM et à FEMTO-ST

ملخص

يندرج مشروع نهاية الدراسة هذا في سياق انتقال الطاقة واستخدام الهيدروجين منخفض الكربون كأداة مرونة تشغيلية، غير أن نمذجتها (PEM) استراتيجية. توفر المحللات الكهربائية ذات غشاء تبادل البروتونات الديناميكية الكاملة، والتي تدمج بين الخلية والمكونات المساعدة، لا تزال غير مكتملة. يقدم هذا العمل تطوير متعدد الفيزياء ونمطي، يعتمد على نهج الأحجام الموضعية، ويربط بين (Python) "برنامج محاكاة" بايثون "وبين جميع مكونات" توازن المحطة PEM النماذج الفرعية الكهروكيميائية، الحرارية والهيدروليكية لخلية يكمن الهدف من هذا المشروع في محاكاة السلوك العابر للنظام بدقة وتقييم (Balance of Plant - BoP) أدائه في سيناريوهات دمج شبكة الكهرباء

الكلمات المفتاحية:

برنامج Python، (BoP) هيدروجين منخفض الكربون، نمذجة ديناميكية، توازن المحطة، PEM محلل كهربائي

Abstract

This final-year project is set within the context of the energy transition and the use of low-carbon hydrogen as a strategic vector. Proton exchange membrane (PEM) electrolyzers offer operational flexibility, but their complete dynamic modeling, integrating both the stack and auxiliary systems, remains incomplete. This work proposes the development of a multi-physics, modular Python simulator, based on a lumped-volume approach, coupling the electrochemical, thermal, and fluidic sub-models of the PEM stack with the entire Balance of Plant (BoP). The objective is to faithfully reproduce the system's transient behavior and to evaluate its performance in grid-integration scenarios.

Keywords : PEM electrolyzer, low-carbon hydrogen, dynamic modeling, Balance of Plant, Python simulator.

Résumé

Ce projet de fin d'études s'inscrit dans le contexte de la transition énergétique et de l'utilisation de l'hydrogène bas-carbone comme vecteur stratégique. Les électrolyseurs à membrane échangeuse de protons (PEM) offrent une flexibilité opérationnelle, mais leur modélisation dynamique complète, intégrant stack et auxiliaires, reste lacunaire. Ce travail propose le développement d'un simulateur Python multi-physique et modulaire, fondé sur une approche par volumes localisés, couplant les sous-modèles électrochimique, thermique et fluide du stack PEM à l'ensemble du Balance of Plant (BoP). L'objectif est de reproduire fidèlement le comportement transitoire du système et d'évaluer ses performances dans des scénarios d'intégration au réseau électrique.

Mots clés : électrolyseur PEM, hydrogène bas-carbone, modélisation dynamique, Balance of Plant, simulateur Python.

Remerciements

Tout d'abord, je remercie Dieu le Tout-Puissant, qui m'a doté de la foi et de la force nécessaires pour atteindre ce point après un long parcours rempli d'efforts et d'obstacles.

J'exprime ma profonde gratitude à l'équipe SHARPAC du département Energie du laboratoire FEMTO-ST pour m'avoir accordé le privilège de m'accueillir au sein de leur structure et pour m'avoir offert des conditions de travail exceptionnelles. Leur confiance et leur ouverture d'esprit ont été déterminantes dans la réussite de ce stage.

J'adresse mes remerciements les plus sincères à mes encadrants, M. R. ROCHE, Mme. M. PERA et Mme. E. PAHON, pour leur encadrement de qualité, leur disponibilité et leurs précieux conseils tout au long de ce travail. Leur expertise, leur rigueur scientifique et leur bienveillance ont grandement contribué à l'enrichissement de ma recherche et à mon développement personnel.

Je tiens également à exprimer ma sincère reconnaissance à M. F. KHOUCHA, mon encadrant en Algérie, pour son suivi, ses conseils avisés et son accompagnement tout au long de ce stage.

Je tiens également à remercier chaleureusement l'ensemble des chercheurs et personnels du laboratoire pour leur accueil chaleureux, leur soutien constant et leurs échanges fructueux. Leur bonne humeur et leur entraide ont rendu cette expérience humaine et professionnelle extrêmement enrichissante.

Je souhaite exprimer ma gratitude aux enseignants du département d'Electrotechnique de l'Ecole Nationale Polytechnique d'Alger pour leurs encouragements tout au long de mon parcours académique, ainsi qu'à l'administration de l'école pour avoir facilité les démarches qui m'ont permis d'effectuer ce stage à l'étranger.

J'adresse des remerciements spéciaux aux membres du jury pour l'honneur qu'ils me font en évaluant mon travail et en me fournissant des commentaires qui amélioreront sa qualité.

Enfin, je suis profondément reconnaissante envers mes parents, pour leur aide et leur soutien tout au long de ma scolarité, ainsi qu'envers ma grand-mère, qui m'a toujours soutenue avec une affection et une bienveillance sans faille. Je remercie également mes frères et tous mes amis pour leur soutien.

Fait à Belfort, le 20 juin 2026

Table des matières

Liste des tableaux

Table des figures

Liste des abréviations

Liste des symboles

Introduction générale	14
1 Etat de l’art de la modélisation des systèmes d’électrolyse PEM	15
1.1 Généralités sur l’électrolyse de l’eau	16
1.2 L’électrolyse PEM : principe de fonctionnement	18
1.2.1 Equations de réaction d’un électrolyseur PEM	18
1.3 Modélisation du stack d’électrolyseur PEM	18
1.3.1 Vue d’ensemble	18
1.3.2 Modèle électrochimique semi-empirique	19
1.3.3 Modèle électrochimique dynamique	19
1.3.4 Modélisation des auxiliaires (BoP)	21
1.4 Stratégie de contrôle	23
1.4.1 Gestion des modes opérationnels	23
1.4.2 Régulateurs PI et logique ON/OFF	24
1.5 Synthèse et positionnement du travail	25
2 Modélisation mathématique du système d’électrolyse PEM	27
2.1 Architecture globale du système	28
2.1.1 Structure du modèle multiphysique	28
2.1.2 Hypothèses fondamentales de modélisation	29
2.2 Modèle du stack PEM	30
2.2.1 Modèle électrochimique	30
2.2.2 Modèle thermique	35
2.2.3 Modèle fluidique (transport de masse)	39
2.2.4 Couplage des sous-modèles	45

2.3	Modèle des auxiliaires (BoP)	47
2.3.1	Modèle du réservoir d'eau déionisée	47
2.3.2	Modèle de la pompe d'alimentation en eau	51
2.3.3	Modèle de l'échangeur de chaleur	54
2.3.4	Modèle du séparateur H_2/H_2O	58
2.3.5	Modèle du compresseur	61
2.3.6	Modèle du redresseur	65
2.3.7	Modèle du réservoir de stockage d'hydrogène	67
3	Implémentation numérique et identification paramétrique du simulateur	71
3.1	Architecture modulaire du simulateur	71
3.1.1	Principe de modularité	71
3.1.2	Organisation des fichiers et des répertoires	71
3.1.3	Structure du répertoire source (src/)	73
3.1.4	Tests des modèles	74
3.1.5	Bibliothèques Python utilisées	74
3.2	Présentation du banc d'essais expérimental PIELIZ	76
3.2.1	Stack électrolyseur	77
3.2.2	Architecture des circuits	78
3.2.3	Comportement thermique du stack	79
3.2.4	Exigences sur la qualité de l'eau	79
3.3	Identification et paramétrage des sous-modèles	80
3.3.1	Algorithme génétique d'identification	80
4	Résultats, validation et perspectives	83
4.1	Protocole de validation	83
4.1.1	Résultats de la validation électrochimique	83
4.2	Validation du modèle thermique	85
4.2.1	Identification des paramètres thermiques	85
4.2.2	Résultats de la validation thermique	85
4.2.3	Validation des débits molaires simulés	86
4.3	Validation des auxiliaires	87
4.3.1	Identification de la loi de commande de la pompe	87
4.4	Discussion : Verrous scientifiques et techniques rencontrés	88
4.5	Perspectives	89
	Conclusion générale	90
	Références bibliographiques	91

Liste des tableaux

1.1	Comparaison synthétique des technologies d'électrolyse de l'eau [15]	17
1.2	Synthèse des modes opérationnels du système	24
1.3	Système de régulation : variables contrôlées, variables manipulées et type de régulateur	25
2.1	Sous-systèmes du modèle d'électrolyseur PEM	29
2.2	Variables et paramètres du modèle électrochimique.	36
2.3	Variables et paramètres du modèle thermique du stack.	39
2.4	Variables et paramètres du modèle fluidique du stack.	45
2.5	Variables et paramètres du modèle du réservoir d'eau déionisée.	50
2.6	Variables et paramètres du modèle de la pompe d'alimentation.	54
2.7	Variables et paramètres du modèle de l'échangeur de chaleur.	58
2.8	Variables et paramètres du modèle du séparateur H_2/H_2O .	62
2.9	Variables et paramètres du modèle du compresseur.	65
2.10	Variables et paramètres du modèle du redresseur AC/DC.	68
2.11	Variables et paramètres du modèle du réservoir de stockage d'hydrogène.	70
3.1	Organisation des répertoires du simulateur PIELIZ.	72
3.2	Classes du sous-module stack/ et correspondance avec les équations du chapitre 3.	74
3.3	Classes du sous-module BoP/ et correspondance avec les équations du chapitre 3.	75
3.4	Caractéristiques nominales du stack Leancat LCWE-25.	77
3.5	Régimes thermiques du stack PIELIZ en fonction du courant appliqué.	79
3.6	Paramètres de qualité de l'eau du banc PIELIZ.	80
4.1	Paramètres identifiés par algorithme génétique : bornes, valeurs optimales et hyperparamètres de l'algorithme.	84
4.2	Hyperparamètres et résultats du modèle	85
4.3	Paramètres thermiques identifiés par algorithme génétique.	85
4.4	Coefficients de la loi de commande de la pompe identifiés par régression linéaire.	87

Table des figures

1.1	Illustration des composantes d'une cellule d'électrolyse PEM	16
1.2	Illustration du processus d'électrolyse de l'eau pour une cellule PEM	18
1.3	Architecture multi-physique du stack PEM : couplage entre les sous-modèles électrochimique, thermique et fluide [2][14].	19
1.4	Représentation générale des circuits équivalents électriques pour l'électrolyse PEM	20
1.5	Schéma bloc de l'architecture à un étage	21
1.6	Schéma bloc de l'architecture à deux étages	22
1.7	Schéma bloc du banc d'essais <i>PIELIZ</i> d'électrolyse PEM	23
1.8	Diagramme de flux des états de fonctionnement d'un électrolyseur PEM industriel de 55 KW	24
2.1	Architecture fonctionnelle du système d'électrolyse PEM	28
2.2	Graphique de la tension réversible et thermo-neutre pour l'électrolyse de l'eau en fonction de la température à une pression de 1 bar	32
2.3	Schéma bloc du modèle électrochimique	35
2.4	Schéma bloc du modèle thermique	39
2.5	Schéma bloc du modèle fluide	44
2.6	Structure du couplage électro-thermo-fluide du stack PEM.	47
2.7	Schéma bloc du modèle du réservoir d'eau déionisée	50
2.8	Schéma bloc du modèle de la pompe d'alimentation	53
2.9	Schéma bloc du modèle de l'échangeur de chaleur	57
2.10	Schéma bloc du modèle du séparateur H_2/H_2O	61
2.11	Schéma bloc du modèle du compresseur	64
2.12	Schéma bloc du modèle du redresseur	66
2.13	Schéma bloc du modèle du réservoir de stockage H_2	69
3.1	Photographie du banc d'essais.	77
3.2	Synoptic du banc d'essais <i>PIELIZ</i> (1 kW) [11]	79
3.3	Organigramme de l'algorithme d'optimisation (Algorithme Génétique) . . .	81
4.1	Comparaison des courbes de polarisation simulées et expérimentales à Paramètres identifiés par algorithme génétique.	84

4.2	Evolution temporelle de la température du stack : comparaison entre simulation et mesure expérimentale.	86
4.3	Débits molaires d'hydrogène et d'oxygène simulés par le modèle fluidique en fonction du courant de stack.	86
4.4	Données expérimentales utilisées pour l'identification des coefficients k_0 et k_1 de la loi de commande de la pompe d'alimentation.	87

Liste des abréviations

Abréviation	Signification
AC	Courant alternatif (<i>Alternating Current</i>)
AEMWE	Electrolyse à membrane échangeuse d'anions (<i>Anion Exchange Membrane Water Electrolysis</i>)
AWE	Electrolyse alcaline de l'eau (<i>Alkaline Water Electrolysis</i>)
BoP	Auxiliaires du système (<i>Balance of Plant</i>)
CCM	Membrane à couche catalytique déposée (<i>Catalyst Coated Membrane</i>)
CEE	Circuit électrique équivalent
DC	Courant continu (<i>Direct Current</i>)
HER	Réaction de réduction de l'hydrogène (<i>Hydrogen Evolution Reaction</i>)
HHV	Pouvoir calorifique supérieur (<i>Higher Heating Value</i>)
IDE	Environnement de développement intégré (<i>Integrated Development Environment</i>)
LHV	Pouvoir calorifique inférieur (<i>Lower Heating Value</i>)
LMTD	Différence de température logarithmique moyenne (<i>Log Mean Temperature Difference</i>)
NTU	Nombre d'unités de transfert (<i>Number of Transfer Units</i>)
OER	Réaction de dégagement d'oxygène (<i>Oxygen Evolution Reaction</i>)
ON/OFF	Logique de commande tout-ou-rien
PEM	Membrane échangeuse de protons (<i>Proton Exchange Membrane</i>)
PEMEC	Cellule d'électrolyse PEM (<i>PEM Electrolysis Cell</i>)
PEMWE	Electrolyse de l'eau PEM (<i>PEM Water Electrolysis</i>)
PFSA	Acide perfluorosulfonique (<i>Perfluorosulfonic Acid</i>)
PI	Régulateur Proportionnel-Intégral
PTL	Couche de transport poreuse (<i>Porous Transport Layer</i>)
RMSE	Erreur quadratique moyenne (<i>Root Mean Square Error</i>)

Abréviation	Signification
SOEC / SOWE	Electrolyse à oxyde solide (<i>Solid Oxide (Water) Electrolysis (Cell)</i>)
YSZ	Zircone stabilisée à l'yttrium (<i>Yttria-Stabilized Zirconia</i>)
0D / 1D / 2D / 3D	Dimensionnalité spatiale du modèle (zéro, une, deux, trois dimensions)

Liste des symboles

Symboles latins

Symbole	Description	Unité
A_{cell}	Surface active d'une cellule	cm ²
A_{ext}, A_s	Surface d'échange thermique	m ²
c_p	Capacité thermique massique	J/(kg·K)
C_{th}	Capacité thermique effective du stack	J/K
C_{min}, C_{max}	Capacité thermique de débit min./max. (échangeur)	W/K
D	Diamètre intérieur du réservoir	m
D_w	Coefficient de diffusion de l'eau dans la membrane	m ² /s
D_{eff}	Coefficient de diffusion effectif (électrode)	m ² /s
E_{cell}, E_{stack}	Tension de cellule / de stack	V
E_{rev}	Tension réversible de Nernst	V
F	Constante de Faraday	C/mol
H	Hauteur manométrique (pompe)	m
i	Densité de courant	A/cm ²
I	Courant électrique	A
$i_{0,X}$	Densité de courant d'échange ($X \in \{an, ca\}$)	A/cm ²
i_L	Densité de courant limite (diffusion)	A/cm ²
k_{mem}	Perméabilité hydraulique de la membrane	m ²
$k_{an,out}, k_{ca,out}$	Coefficients de débit sortant (vanne)	mol/(s·bar)
K_P, K_I	Gains proportionnel et intégral (régulateur PI)	–
L	Niveau d'eau (réservoir)	m
LHV_{H_2}	Pouvoir calorifique inférieur de H ₂	kWh/kg
m	Masse	kg
$\dot{m}$	Débit massique	kg/s
M	Masse molaire	g/mol
n	Nombre d'électrons échangés	–
n_i	Quantité de matière de l'espèce i	mol

Symbole	Description	Unité
$\dot{n}$	Débit molaire	mol/s
N_{cells}	Nombre de cellules du stack	–
NTU	Nombre d'unités de transfert (échangeur)	–
n_d	Coefficient de traînée électro-osmotique	–
p	Pression	bar / Pa
P	Puissance	W
$\dot{Q}$	Flux (puissance) thermique	W
r	Constante spécifique d'un gaz	J/(kg·K)
r_c	Rapport de compression	–
R, R_u	Constante universelle des gaz parfaits	J/(mol·K)
$R_{th}, R_{tank}, R_{sep}$	Résistance / conductance thermique	K/W, W/K
T	Température	K / °C
$u(t)$	Signal de commande (régulateur PI)	–
V	Volume	m ³
$\dot{V}$	Débit volumique	m ³ /s
V_{th}	Tension thermoneutre	V
w	Travail massique (pompe, compresseur)	J/kg
X_{O_2}	Fraction molaire de l'oxygène	–

Symboles grecs

Symbole	Description	Unité
α_{an}, α_{ca}	Coefficients de transfert de charge (anode/cathode)	–
ΔG	Énergie libre de Gibbs de réaction	J/mol
ΔH	Enthalpie de réaction	J/mol
ΔS	Entropie de réaction	J/(mol·K)
ΔV_{act}	Surtension d'activation	V
ΔV_{ohm}	Surtension ohmique	V
ΔV_{diff}	Surtension de diffusion (concentration)	V
ΔV_{bub}	Surtension de bulles	V
δ	Épaisseur (membrane, électrode)	m
ε	Efficacité de l'échangeur de chaleur (ε -NTU)	–
γ	Coefficient isentropique (c_p/c_v)	–
η_{is}	Rendement isentropique	–
η_{mec}	Rendement mécanique	–
η_{conv}	Rendement du convertisseur AC/DC	–
η_{pompe}	Rendement global de la pompe	–
η_{sys}	Rendement système instantané	–

Symbole	Description	Unité
η_f	Rendement faradique	—
θ	Taux de couverture par les bulles (anode)	—
λ	Taux d'hydratation de la membrane	—
μ_{H_2O}	Viscosité dynamique de l'eau	Pa·s
ρ	Masse volumique	kg/m ³
σ_{mem}	Conductivité protonique de la membrane	S/m
τ	Constante de temps	s
ω	Vitesse angulaire (pompe)	rad/s

Indices et exposants

Indice	Signification
an	Anode
ca	Cathode
amb	Ambiant
cell	Relatif à une cellule
stack	Relatif au stack
in / out	Entrée / sortie
mem	Membrane
gen	Généré
loss	Perdu (dissipé)
cool	Refroidissement
sep	Séparateur H ₂ /H ₂ O
tank	Réservoir (eau déionisée)
stk	Réservoir de stockage H ₂
comp	Compresseur
elec / hyd	Electrique / hydraulique
rev	Réversible
th	Thermoneutre
sat / vap	Saturation / vapeur

Introduction générale

La production mondiale d'hydrogène repose majoritairement sur les combustibles fossiles, générant 2 à 3 % des émissions globales de gaz à effet de serre du secteur énergétique [13]. Face à l'urgence climatique, la dissociation de l'eau alimentée par des énergies renouvelables s'impose comme une alternative d'avenir. Parmi ces technologies, l'électrolyse à membrane échangeuse de protons (PEMEC) se distingue par ses performances dynamiques : temps de réponse rapide, haute densité de courant, production d'hydrogène de haute pureté et compatibilité avec une opération fluctuante couplée au réseau électrique [9]. L'exploitation optimale de cette technologie nécessite la maîtrise du système complet, notamment le stack PEM et ses auxiliaires (BoP), qui affectent la consommation, la dynamique et les contraintes opérationnelles. En régime transitoire, ces éléments voient leurs performances électrochimiques, thermiques et fluidiques évoluer conjointement.

C'est dans cette perspective que s'inscrit le présent mémoire, dont l'objectif est le développement d'un modèle dynamique multi-physique et d'un simulateur d'un système d'électrolyse PEM complet. Ce simulateur vise à intégrer les domaines électrique, thermique et fluide au sein d'une architecture modulaire, capable de représenter fidèlement le comportement du stack PEM et de l'ensemble de ses auxiliaires. Le modèle doit notamment pouvoir être raccordé à un réseau électrique alternatif, intégrer des mécanismes de vieillissement des composants en fonction de leur usage, et s'étendre à des configurations mêlant plusieurs stacks en parallèle. Une attention particulière est portée à la stratégie de contrôle de l'ensemble du système ainsi qu'à la validation des résultats par confrontation avec des données expérimentales.

Ce travail a été réalisé au sein de l'équipe SHARPAC du département Energie de l'Institut FEMTO-ST, à Belfort. C'est un laboratoire de recherche de dimension internationale rattaché au CNRS et à l'Université Marie et Louis Pasteur, dont la plateforme Hydrogène-Energie (FCLAB) a accueilli l'ensemble des travaux expérimentaux et de modélisation présentés dans ce mémoire.

Ce document est organisé en quatre chapitres. Le chapitre 1 propose un état de l'art de la recherche en modélisation dynamique des systèmes d'électrolyse PEM, avec un regard critique sur les approches de modélisation du BoP et les lacunes identifiées dans la littérature. Le chapitre 2 expose le modèle mathématique multi-physique retenu pour chaque composant du système, ainsi que la stratégie globale de contrôle mise en œuvre. Le chapitre 3 détaille l'architecture logicielle du simulateur, les choix d'environnement de simulation, ainsi que les méthodes d'identification et de paramétrage des sous-modèles. Enfin, le chapitre 4 présente les résultats de simulation obtenus, leur validation par comparaison avec des données expérimentales, et discute les performances du simulateur ainsi que les perspectives d'intégration dans des scénarios de gestion de réseau à énergies renouvelables.

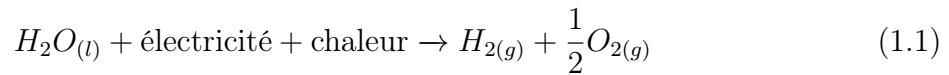
Chapitre 1

Etat de l'art de la modélisation des systèmes d'électrolyse PEM

Ce chapitre est dédié à l'état de l'art de la modélisation multi-physique des systèmes d'électrolyse PEM. Dans un premier temps, les principes thermodynamiques et électrochimiques fondamentaux de l'électrolyse de l'eau sont introduits, accompagnés d'une analyse comparative des différentes technologies existantes. La seconde partie du chapitre est consacrée à la description des approches de modélisation du cœur de la technologie (le stack), à travers ses couplages électrochimiques, thermiques et fluidiques, ainsi que ses différentes représentations temporelles et dimensionnelles. Les composants auxiliaires du système (*Balance of Plant*), essentiels au maintien des conditions opératoires, sont ensuite détaillés et caractérisés à partir de configurations industrielles et du banc d'essais *PIELIZ*. Enfin, les stratégies de contrôle-commande et les modes de gestion opérationnels classiquement déployés pour réguler ces systèmes sont analysés. L'ensemble de cette étude bibliographique permettra, en conclusion, de positionner le travail en mettant en lumière les verrous scientifiques actuels liés à la simulation dynamique globale de ces systèmes.

1.1. Généralités sur l'électrolyse de l'eau

Un électrolyseur est un système de conversion d'énergie électrique et thermique en énergie chimique. Il se base sur la réaction électrochimique de l'électrolyse de l'eau non favorisée thermodynamiquement, qui nécessite l'application d'une différence de potentiel pour l'appliquer. Cette réaction d'oxydoréduction permet de dissocier la molécule d'eau H_2O en dihydrogène (H_2) et dioxygène (O_2).



Une cellule d'électrolyseur est constituée de deux électrodes (anode et cathodes), dont la surface est courverte d'une couche catalytique permettant de favoriser les réactions, l'électrolyte qui est un isolant électrique et assure la conduction des ions entre les électrodes. les plaques bipolaires servent à alimenter les électrodes en réactifs tout en facilitant l'évacuation des gaz produits, et les plaques collectrices de courant sont des éléments essentiels pour le transport des électrons entre les électrodes et les circuits externes.

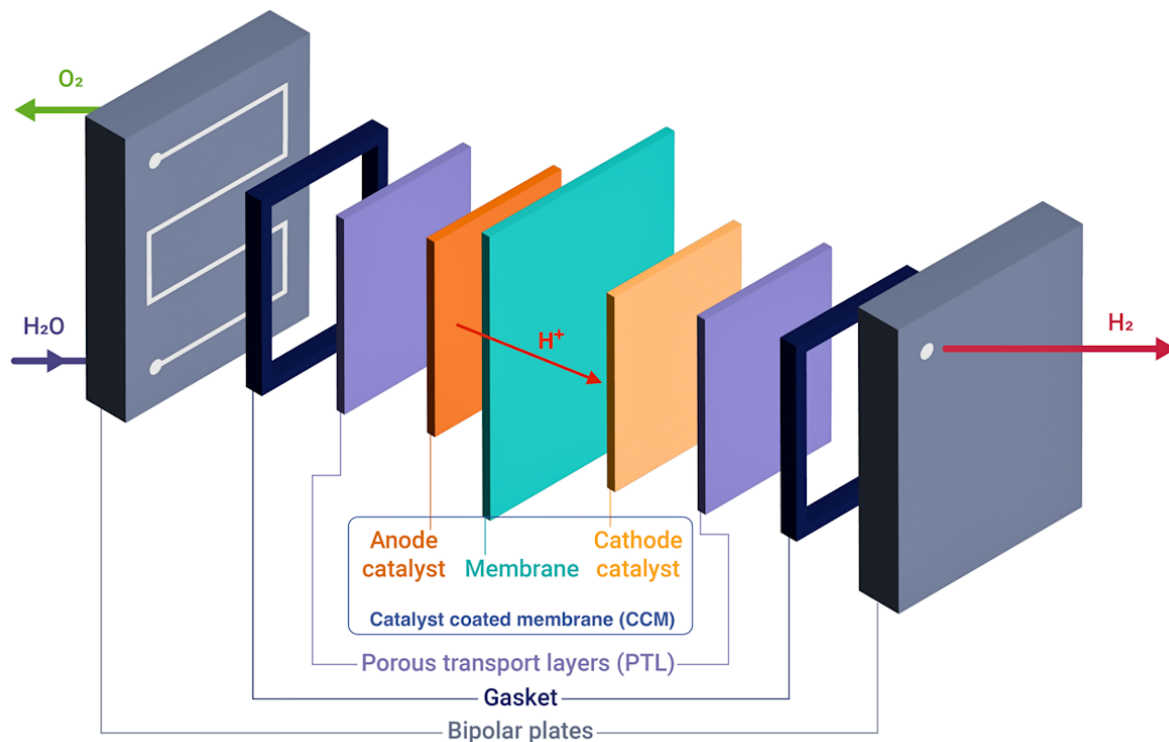


FIGURE 1.1 – Illustration des composantes d'une cellule d'électrolyse PEM

Il existe différentes technologies d'électrolyse de l'eau, chacune caractérisée par la nature des matériaux et les conditions opératoires, telles que la température et la pression. Les technologies d'électrolyse les plus matures sont l'électrolyse alcaline, l'électrolyse à oxyde solide ou haute température (SOEC), et l'électrolyse PEM, qui est au centre de cette étude.

TABLE 1.1 – Comparaison synthétique des technologies d'électrolyse de l'eau [15]

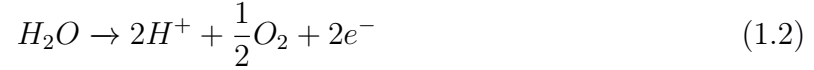
Caractéristique	PEMWE	AWE	AEMWE	SOWE
Maturité	Commerciale	Commerciale	Technologie émergente	Phase pilote
Porteur de charge	H^+	OH^- / H_3O^+	OH^-	O^{2-}
Electrolyte	Membrane PFSA	Solution alcaline KOH/NaOH (25–40 %)	Membrane échangeuse d'anions	Céramique conductrice d'ions O^{2-} (ex. YSZ)
Fluide de travail	Eau ultrapure ($< 1 \mu S/cm$)	Electrolyte alcalin aqueux	Eau déionisée ou alcalin dilué	Vapeur d'eau haute température
Température ($^{\circ}C$)	30–90	60–90	50–70	650–1000
Pression	Modérée à élevée	Limitée	Modérée à élevée	Atmosphérique à modérée
Volume	Compact, forte densité de puissance	Volumineux	Comparable au PEM, moins compact	Important
Echelle de production	kW à multi-MW	MW à GW	kW à MW (limité)	kW à pilote MW
Temps de réponse	Rapide	Lent	Rapide	Flexibilité limitée
Application	Intégration EnR (réponse rapide)	Réseaux stables, grande échelle	EnR potentiel, en évaluation	Chaleur industrielle continue
Maintenance	Modérée	Élevée (corrosion, gaz-liquide)	Potentiellement faible	Élevée (cyclage thermique)
Durée de vie stack	$< 40\,000$ h	$< 90\,000$ h	$> 10\,000$ h	$< 40\,000$ h
Rendement (HHV)	67–84 %	62–82 %	60–75 %	~ 90 %
Densité de courant	0.2–2 A/cm ²	0.2–0.6 A/cm ²	0.2–1 A/cm ²	0.3–1 A/cm ²

1.2. L'électrolyse PEM : principe de fonctionnement

1.2.1 Equations de réaction d'un électrolyseur PEM

a) Réaction à l'anode (oxydation)

L'eau est oxydée pour former du dioxygène, des protons et des électrons :



b) Réaction à la cathode (réduction)

Les protons qui traversent la membrane se combinent avec les électrons pour former du dihydrogène :

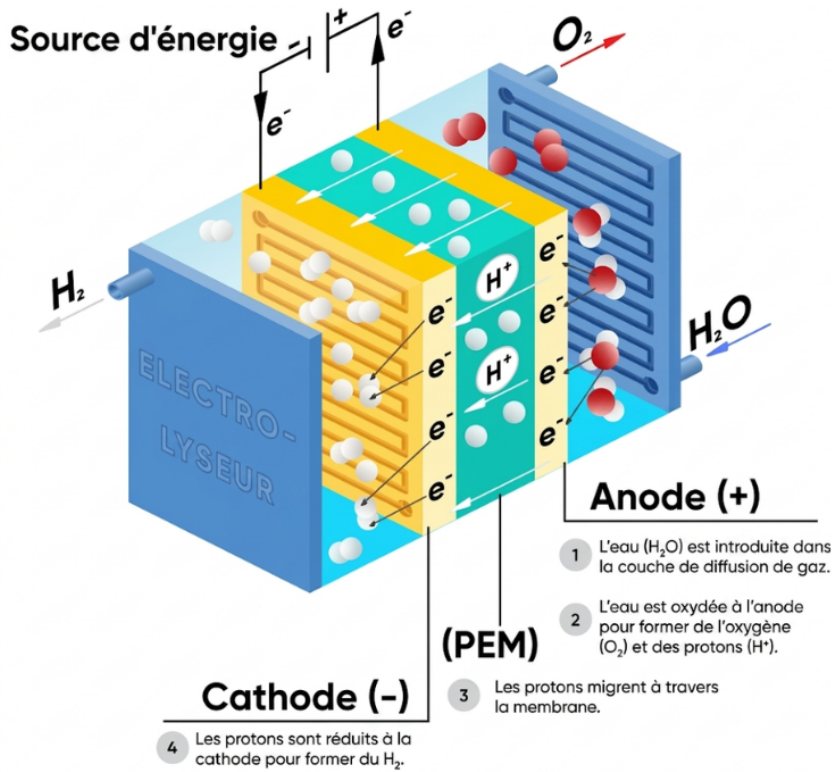


FIGURE 1.2 – Illustration du processus d'électrolyse de l'eau pour une cellule PEM

1.3. Modélisation du stack d'électrolyseur PEM

1.3.1 Vue d'ensemble

Le processus d'électrolyse de l'eau est un processus où différents sous-systèmes multiphysiques fortement couplés interagissent à des échelles de temps différentes. La modélisation mathématique du stack d'électrolyse PEM permet de prédire le comportement transitoire de l'électrolyseur face à des variations de charge, d'anticiper les régimes thermiques et de concevoir des lois de commande adaptées, et ce afin d'identifier les régimes opératoires qui maximisent l'efficacité tout en préservant la durabilité.

Le stack d'électrolyse PEM peut être décomposé en trois sous-modèles couplés, représentée schématiquement à la Figure 1.3 :

- **Le sous-modèle électrochimique**, qui calcule la tension aux bornes de chaque cellule en fonction du courant appliqué, de la température et des pressions partielles des espèces ;
- **Le sous-modèle thermique**, qui suit l'évolution de la température moyenne du stack par bilan d'énergie ;
- **Le sous-modèle fluidique**, qui décrit le transport de masse des espèces à travers trois volumes de contrôle : l'anode, la cathode et la membrane.

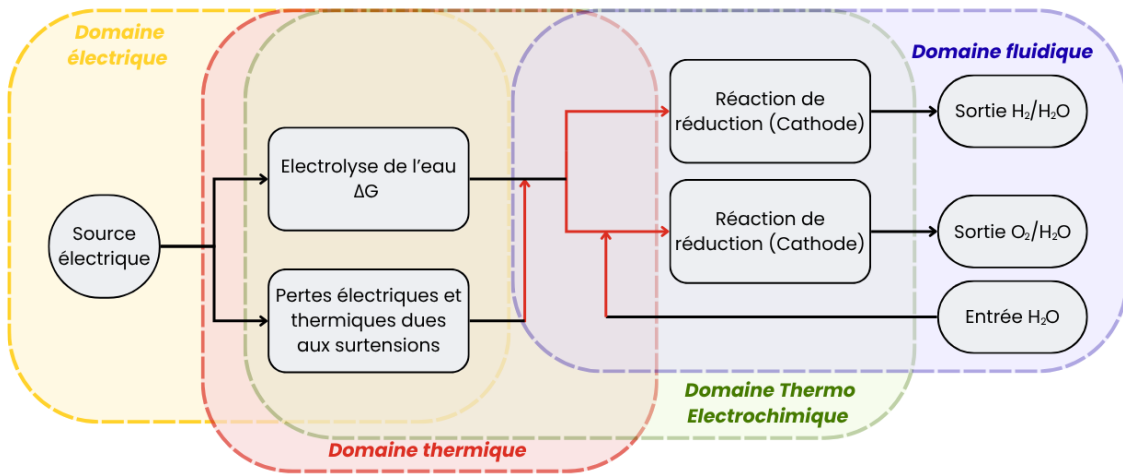


FIGURE 1.3 – Architecture multi-physique du stack PEM : couplage entre les sous-modèles électrochimique, thermique et fluidique [2][14].

1.3.2 Modèle électrochimique semi-empirique

Ce modèle est le plus étudié dans la littérature, son objectif est de calculer la tension de cellule V_{cell} en fonction de la densité de courant, de la température et des pressions partielles des espèces réactives. Cette tension résulte de la superposition de la tension réversible et de plusieurs termes de surpotentiel qui reflètent les irréversibilités du processus.

Le sous-modèle électrochimique se base sur le bilan énergétique de la dissociation de l'eau. L'énergie totale nécessaire à la réaction se décompose selon l'équation suivante [4] [3] :

$$\Delta G = \Delta H - T \Delta S \quad (1.4)$$

où ΔH est l'enthalpie de réaction (énergie thermique requise), ΔS la variation d'entropie, et T la température absolue.

1.3.3 Modèle électrochimique dynamique

Les modèles dynamiques se basent sur une représentation en circuits électriques équivalents (CEE), permettant de capturer le comportement transitoire de l'électrolyseur

PEM, ce qui s'avère particulièrement utile pour le développement de stratégies de contrôle. Ces modèles décomposent le comportement électrique en trois entités principales : une résistance série (effets ohmiques), une source de tension continue (terme réversible) et des cellules RC (dynamique des surtensions d'activation).

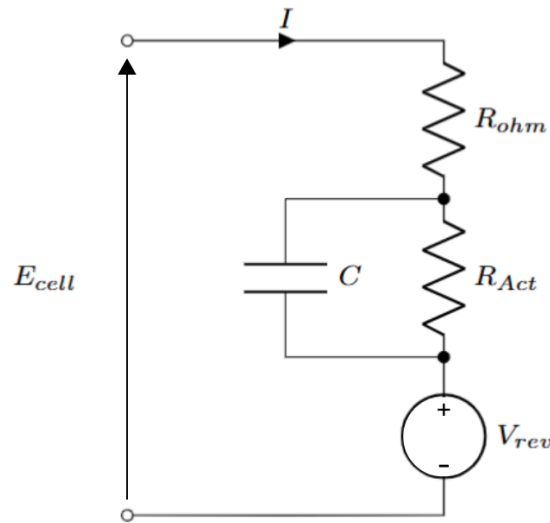


FIGURE 1.4 – Représentation générale des circuits équivalents électriques pour l'électrolyse PEM

Néanmoins, cette approche néglige souvent les couplages thermiques et fluidiques, ce qui peut limiter sa précision au sein d'un modèle multi-physique intégré.

1.3.3.1 Approches dimensionnelles pour les modèles de transport de masse

Les modèles de transport peuvent être classés selon leur dimensionnalité spatiale, et se divisent en 3 catégories :

- Les **modèles zéro-dimensionnels** (0D), ou à paramètres concentrés, traitent le stack comme un volume unique sans variation spatiale. Ils sont adaptés à la simulation système en temps réel. C'est cette approche qui est retenue dans le présent travail.
- Les **modèles unidimensionnels** (1D) introduisent une résolution spatiale selon l'axe de traversée de la membrane, ce qui permet de capturer les gradients de concentration et de température dans l'épaisseur des couches.
- Les **modèles bidimensionnels et tridimensionnels** (2D/3D), sont résolus sous des environnements comme COMSOL Multiphysics, et offrent la représentation la plus détaillée des phénomènes de transport diphasique, de distribution de courant et de formation de bulles. En revanche, leur coût computationnel élevé les rend incompatibles avec une intégration dans un simulateur système temps-réel.

Le choix du modèle dépend du niveau de précision souhaité, et de l'objectif spécifique de l'étude.

Cependant, afin d'établir un modèle précis sur le fonctionnement d'un système d'électrolyseur PEM, il est impératif de modéliser les auxiliaires qui interagissent en

permanence avec le stack et en conditionnent les points de fonctionnement. La section suivante leur est consacrée.

1.3.4 Modélisation des auxiliaires (BoP)

Le bon fonctionnement d'un électrolyseur à membrane échangeuse de protons (PEM) ne dépend pas uniquement du comportement physico-chimique du stack d'électrolyse, mais il repose également sur un ensemble de systèmes auxiliaires (*Balance of Plant*). Le BoP assure l'approvisionnement en réactifs, le maintien des conditions opératoires optimales (température, pression, débits) ainsi que la sécurité globale de l'installation.

Conformément à l'état de l'art des systèmes industriels, le BoP d'un électrolyseur PEM peut être décomposé en cinq sous-systèmes principaux interconnectés :

1. L'alimentation électrique du *stack* ;
2. La chaîne de gestion de l'eau ;
3. La chaîne de production et de purification de l'hydrogène ;
4. Le système de refroidissement (gestion thermique) ;
5. Le système de contrôle-commande.

1.3.4.1 Sous-système d'alimentation électrique du *stack*

Ce sous-système convertit le courant alternatif (AC) du réseau électrique en courant continu (DC) basse tension requis par le stack. L'architecture globale repose généralement sur un transformateur abaisseur suivi d'une conversion de puissance qui se divise en trois grandes configurations :

- **Architecture à un étage (AC/DC) :** Le courant est converti directement. Les solutions vont du redresseur à thyristors aux redresseurs actifs à source de tension (courant plus lisse, meilleures performances réseau, mais efficacité légèrement réduite par les pertes de commutation).

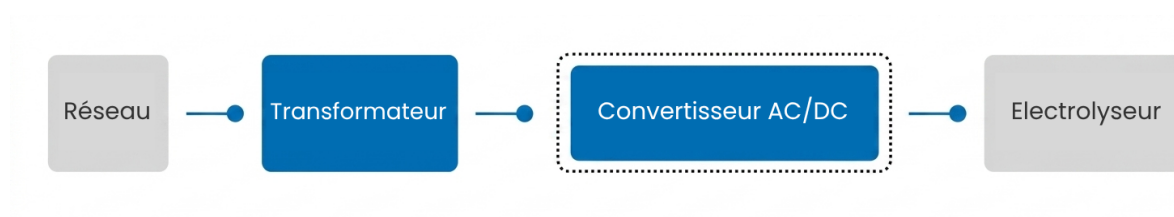


FIGURE 1.5 – Schéma bloc de l'architecture à un étage

- **Architecture à deux étages (AC/DC + DC/DC) :** Un étage DC/DC (hacheur abaisseur) est ajouté après un redresseur. Cette configuration offre un meilleur contrôle et réduit les contraintes de courant par rapport à l'option mono-étage.

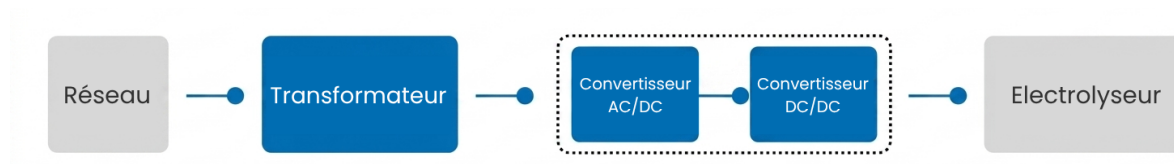


FIGURE 1.6 – Schéma bloc de l'architecture à deux étages

- **Couplage direct sur réseau DC** : Si le site dispose déjà d'un réseau de distribution continu, l'intégration nécessite uniquement des convertisseurs DC/DC pour adapter les niveaux de tension.

1.3.4.2 Chaîne de gestion de l'eau

L'eau circulant dans l'électrolyseur doit présenter une faible conductivité électrique afin d'éviter l'empoisonnement et la dégradation de la membrane échangeuse de protons. Le cycle débute par un réservoir d'eau déionisée, suivi d'une pompe d'alimentation qui assure le débit requis vers le filtre puis vers le déioniseur, ce dernier garantissant la conductivité cible grâce à un capteur dédié. Une seconde pompe injecte ensuite l'eau purifiée vers le *stack*.

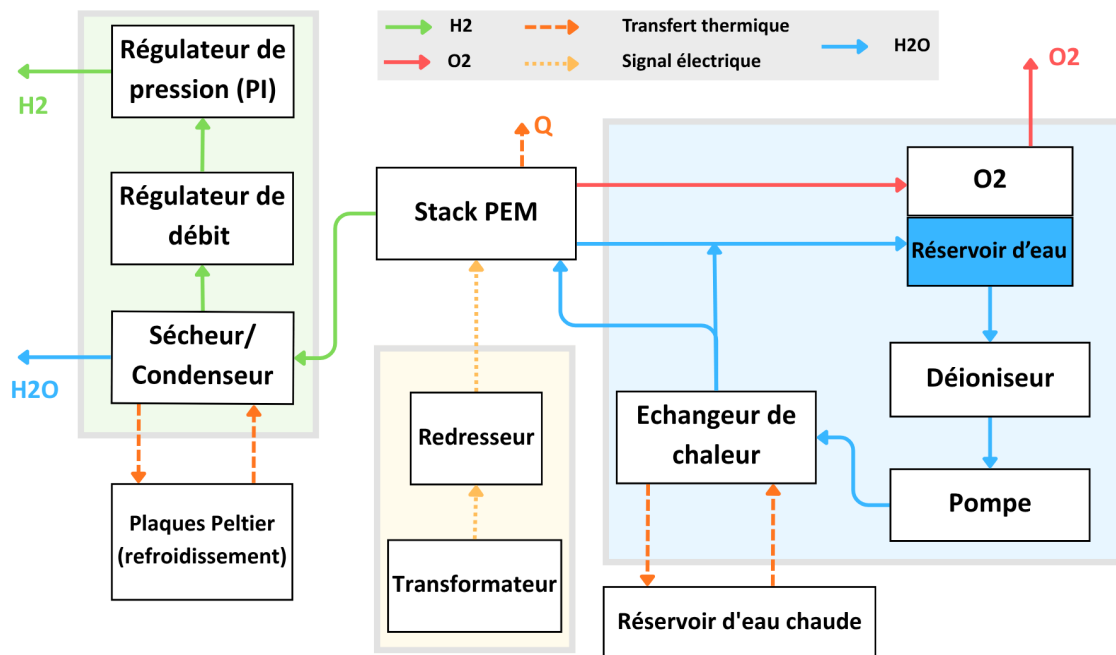
En sortie d'anode, l'oxygène produit et l'excédent d'eau sont renvoyés vers le réservoir d'alimentation avant recirculation. L'ensemble de la boucle est instrumenté (niveau, température, pression, débit, conductivité) afin de surveiller en continu la qualité et les conditions de fonctionnement du fluide alimentant le *stack* d'électrolyse.

1.3.4.3 Chaîne de production et de traitement de l'hydrogène

L'hydrogène produit à la cathode est saturé en eau et nécessite un traitement avant stockage. Un sécheur/condenseur élimine dans un premier temps l'humidité du flux gazeux, l'eau condensée étant évacuée tandis que le gaz séché est transmis aux étages de régulation. Un régulateur de débit puis un régulateur de pression (à logique PI) ajustent les conditions du gaz régulé en sortie, la température étant suivie conjointement à la pression.

1.3.4.4 Sous-système de refroidissement

La réaction d'électrolyse génère une quantité de chaleur qu'il convient d'évacuer pour maintenir le *stack* dans sa plage de température nominale. Dans le banc d'essais PIELIZ, ce sous-système repose sur des éléments à effet Peltier, alimentés électriquement, qui assurent l'extraction thermique du circuit. La température est mesurée en entrée comme en sortie afin de piloter la régulation thermique de l'installation.

FIGURE 1.7 – Schéma bloc du banc d'essais *PIELIZ* d'électrolyse PEM

1.4. Stratégie de contrôle

L'optimisation des performances et de la durabilité d'un système d'électrolyse PEM requiert la régulation de ses variables thermodynamiques et hydrodynamiques (température, débits et pressions). Bien que la littérature expose diverses architectures de commande, cette étude se concentre sur deux stratégies adaptées aux spécificités du banc d'essais : des régulateurs proportionnels-intégraux (PI) pour le suivi précis des consignes continues, et des boucles logiques de type tout-ou-rien (ON/OFF) pour le contrôle de niveau des fluides.

1.4.1 Gestion des modes opérationnels

Le fonctionnement d'un électrolyseur PEM n'est pas réduit à un régime unique de production, il implique une succession d'états opérationnels dont la gestion conditionne la sécurité du système, la rapidité de reprise de production et l'efficacité globale. Quatre états sont définis dans la littérature :

Les transitions entre ces états dépendent des conditions sur le courant de stack, les niveaux de pression dans les séparateurs et la température du stack. Le diagramme de flux correspondant est présenté en figure 1.8.

TABLE 1.2 – Synthèse des modes opérationnels du système

Mode	Description
OFF	Système totalement inactif : aucune alimentation électrique, débits nuls, production arrêtée.
IDLE	Veille prolongée : pompes de recirculation arrêtées, séparateurs totalement dépressurisés, température décroissant vers l'ambiant ; groupe froid actif pour éviter un démarrage à froid complet.
SB	Veille de courte durée (<30 min) : stack maintenu polarisé sans production, circulation d'eau active, séparateurs partiellement dépressurisés, température proche du nominal pour reprise rapide.
PROD	Stack polarisé en production d'hydrogène ; séparateurs pressurisés aux conditions nominales, température régulée à $\approx 65^\circ\text{C}$, auxiliaires en fonctionnement complet.

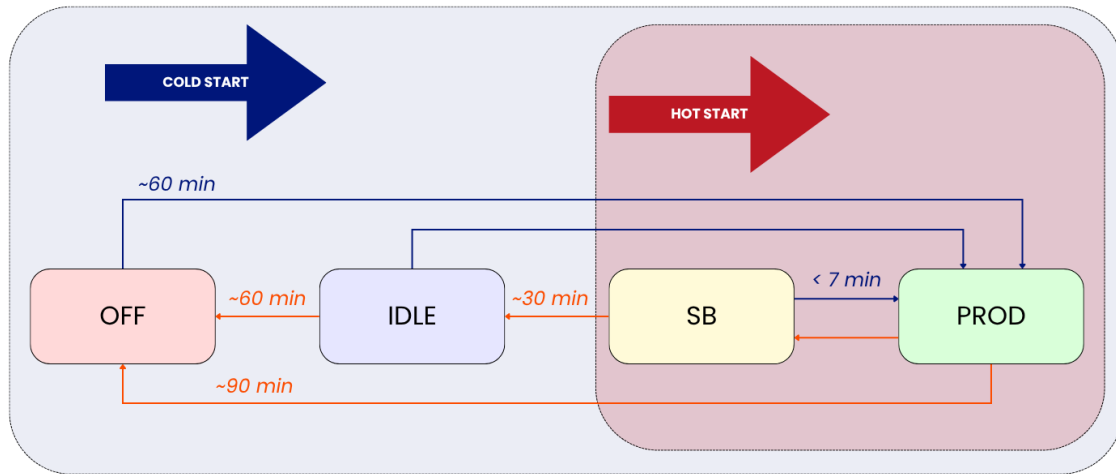


FIGURE 1.8 – Diagramme de flux des états de fonctionnement d'un électrolyseur PEM industriel de 55 KW

1.4.2 Régulateurs PI et logique ON/OFF

La régulation continue des variables d'état critiques est assurée par des régulateurs PI de la forme standard :

$$u(t) = K_P e(t) + K_I \int_0^t e(t') dt' \quad (1.5)$$

où $e(t) = y_{\text{ref}}(t) - y(t)$ est l'écart entre la consigne et la mesure, K_P le gain proportionnel et K_I le gain intégral.

Dans la littérature, les boucles PI sont souvent implémentées pour la régulation de la contre-pression cathodique P_{ca} via le débit de H_2 sortant du séparateur, la régulation de la contre-pression anodique P_{an} via le débit de O_2 sortant, et la régulation de la température du stack T_{stack} via le débit de fluide caloporteur $\dot{m}_c$.

Les variables à dynamique lente sont quant gérées par des logiques ON/OFF commandant les vannes de purge et de remplissage.

L'ensemble des boucles de régulation est synthétisé dans le tableau 1.3.

TABLE 1.3 – Système de régulation : variables contrôlées, variables manipulées et type de régulateur

Variable contrôlée	Variable manipulée	Type
Contre-pression cathodique P_{ca}	Débit H_2 sortant du séparateur	PI
Contre-pression anodique P_{an}	Débit O_2 sortant du séparateur	PI
Température stack T_{stack}	Débit de fluide caloporteur $\dot{m}_c$	PI
Niveau d'eau (séparateur H_2/H_2O)	Purge d'eau du séparateur	ON/OFF
Niveau d'eau (réservoir d'eau déminéralisée)	Remplissage du réservoir	ON/OFF

1.5. Synthèse et positionnement du travail

Positionnement du présent travail

L'état de l'art présenté dans ce chapitre révèle que la modélisation dynamique des systèmes d'électrolyse PEM a connu des avancées significatives au cours de la dernière décennie. Les travaux de référence proposent des formalismes électrochimiques et thermiques de plus en plus complets pour le stack PEM. Cependant, un verrou récurrent demeure : **la modélisation des auxiliaires (Balance of Plant) est systématiquement absente ou fortement simplifiée**. Or, comme le souligne la section 2.3, le comportement transitoire du système complet ne peut être fidèlement reproduit sans la prise en compte explicite du BoP.

Le présent travail se positionne précisément en réponse à ce verrou. Il propose un simulateur Python multi-physique, modulaire et orienté objet, intégrant :

- le **stack PEM** dans toute sa complexité multi-physique, via le couplage fort entre les sous-modèles électrochimique, thermique et fluide ;
- l'**ensemble des auxiliaires** (réservoir d'eau déionisée, pompe d'alimentation, échangeur de chaleur, séparateur H_2/H_2O , compresseur, redresseur AC/DC et réservoir de stockage), chacun gouverné par des bilans dynamiques de masse et d'énergie (section 2.3) ;

Périmètre et limites du modèle développé. Le simulateur développé couvre l'intégralité de la chaîne de conversion eau/hydrogène à l'échelle du banc d'essais PIELIZ (1 kW). Le redresseur AC/DC est modélisé comme interface électrique entre le réseau et le stack, permettant de propager toute variation de consigne de puissance vers l'ensemble du système. Le couplage dynamique avec un profil de production renouvelable fluctuant constitue une extension naturelle, identifiée comme perspective prioritaire (section 4.5). De même, l'intégration d'un modèle de vieillissement des composants (membrane Nafion, couches catalytiques) dépasse le cadre du présent travail et fera l'objet de développements futurs.

Chapitre 2

Modélisation mathématique du système d'électrolyse PEM

Ce troisième chapitre est dédié au développement du modèle mathématique et dynamique de l'électrolyseur à membrane échangeuse de protons (PEM). Afin de reproduire fidèlement le comportement transitoire du système complet et d'analyser son couplage avec des sources intermittentes ou le réseau électrique, l'approche retenue englobe le stack PEM et l'ensemble de ses auxiliaires essentiels (Balance of Plant). L'architecture de ce modèle multiphysique est structurée en quatre sections principales. Les hypothèses fondamentales et les principes généraux indispensables à la résolution mathématique sont énoncés et explicités. Ces fondements théoriques intègrent d'une part les aspects thermodynamiques globaux et, d'autre part, les hypothèses spécifiques à chaque composant.

Points clés du modèle

- **Modélisation électrochimique** : Détermination de la courbe de polarisation à partir de la tension de Nernst et des surtensions d'activation (Butler-Volmer), ohmique, de diffusion et de bulles.
- **Modélisation thermique** : Bilan d'énergie dynamique global au niveau du stack PEM, couplant la puissance thermique générée, les pertes de chaleur vers l'environnement, et le refroidissement.
- **Modélisation du transport de matière (fluidique)** : Etablissement des bilans de masse aux électrodes décrivant la dynamique des espèces générées, l'eau, et les flux membranaires (traînée électro-osmotique, diffusion de Fick, Darcy).
- **Intégration du BoP et régulation** : Modélisation des auxiliaires (pompe, échangeur, réservoir, séparateurs, compresseur, stockage, convertisseur) associés à des contrôles PI et ON/OFF.

2.1. Architecture globale du système

2.1.1 Structure du modèle multiphysique

La modélisation dynamique du banc d'essais repose sur un assemblage de sous-modèles couplés, chacun représentant un composant physique distinct de la chaîne de conversion eau/hydrogène. Contrairement aux approches restreintes au stack, le modèle développé ici intègre l'ensemble de la Balance of Plant (BoP), ce qui est indispensable pour reproduire fidèlement le comportement transitoire du système complet et évaluer sa consommation énergétique nette.

L'architecture retenue suit une approche par **volumes localisés** (*lumped parameters*) : au sein de chaque volume de contrôle, les propriétés intensives telles que la température, pression, et débit, sont supposées spatialement uniformes. Cette hypothèse, classique en modélisation système, est justifiée par l'objectif de simulation dynamique à l'échelle du système complet, où les gradients spatiaux internes à chaque composant sont de second ordre par rapport aux dynamiques inter-composants.

L'architecture globale du modèle est illustrée en figure 2.2. On y distingue trois sous-ensembles fonctionnels :

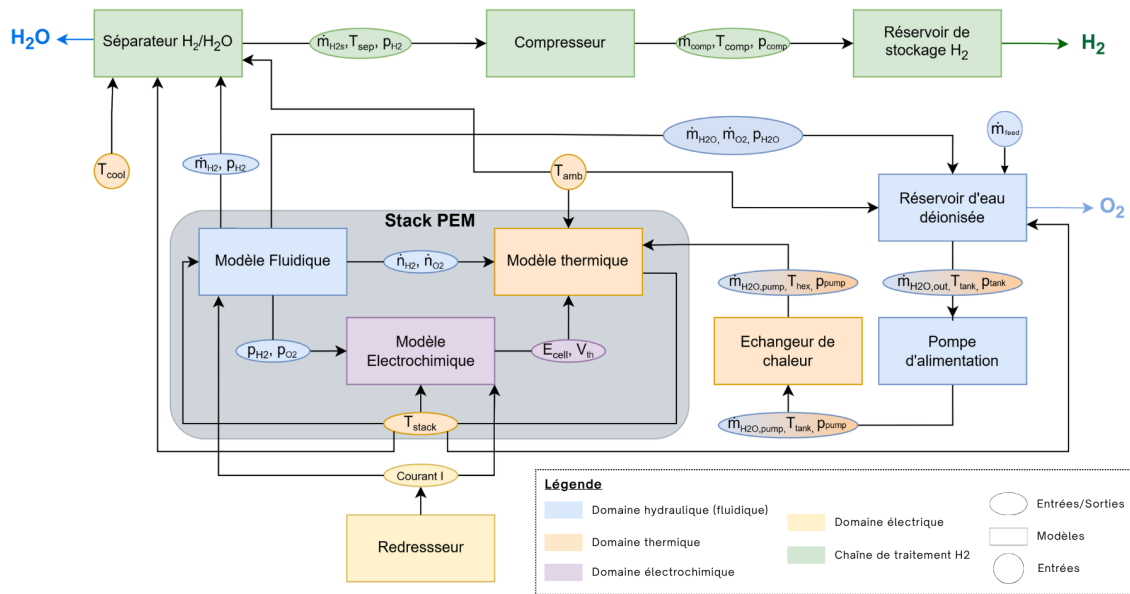


FIGURE 2.1 – Architecture fonctionnelle du système d'électrolyse PEM

1. **Le stack PEM** est le nœud central du modèle. Il est décomposé en trois sous-modèles internes fortement couplés : électrochimique, fluidique (transport de masse) et thermique. Le courant continu I délivré par le redresseur constitue l'entrée principale du stack ; ses sorties sont les débits molaires de H_2 et O_2 , les pressions anodique et cathodique, et la température T_{stack} .
2. **La chaîne de conditionnement du gaz**, en aval du stack : le séparateur H_2/H_2O extrait l'eau entraînée par le flux gazeux cathodique, le compresseur porte l'hydrogène

sec à la pression de stockage, et le réservoir accumule la masse produite.

3. **Le circuit hydraulique auxiliaire**, qui assure l'alimentation en eau déionisée : la pompe d'alimentation extrait l'eau du réservoir déionisé, l'échangeur de chaleur la refroidit à la température d'entrée nominale du stack, avant injection côté anode.

Le tableau 2.1 récapitule l'ensemble des sous-modèles, leur rôle fonctionnel et le type de bilan gouvernant leur dynamique.

TABLE 2.1 – Sous-systèmes du modèle d'électrolyseur PEM

Sous-modèle	Rôle fonctionnel	Type de bilan
Electrochimique (stack)	Tension cellule, surtensions	Algébrique
Fluidique (stack)	Production H_2/O_2 , transport membranaire	Massique
Thermique (stack)	Bilan enthalpique du stack	Energétique
Séparateur H_2/H_2O	Séparation gaz/liquide cathodique	Massique + énergétique
Réservoir eau déionisée	Stock eau d'alimentation	Massique + énergétique
Echangeur de chaleur	Refroidissement eau d'alimentation	Energétique (NTU- ε)
Pompe d'alimentation	Débit et pression eau vers stack	Hydraulique
Compresseur	Compression H_2 jusqu'au stockage	Isentropique
Réservoir H_2	Accumulation et pression H_2	Massique
Redresseur AC/DC	Alimentation électrique du stack	Electrique

2.1.2 Hypothèses fondamentales de modélisation

Les hypothèses simplificatrices sont organisées en deux niveaux : des hypothèses globales, valables pour l'ensemble des sous-modèles, et des hypothèses spécifiques à chaque composant, présentées au début de chaque section dédiée.

Hypothèses simplificatrices

- H1** Les espèces gazeuses (H_2 , O_2) sont considérés comme gaz parfaits.
- H2** Les propriétés intensives sont supposées uniformes au sein de chaque volume de contrôle. L'accumulation de masse et d'énergie est concentrée dans les volumes principaux des composants, et négligée dans les tuyauteries.
- H3** Toutes les cellules du stack sont considérées identiques, et les débits réactif et caloporteur y sont répartis uniformément. Le modèle décrit donc une cellule élémentaire, et les grandeurs globales du stack sont obtenues par multiplication par N_{cells} .
- H4** La masse volumique de l'eau liquide est supposée constante dans les bilans de masse.
- H5** L'eau liquide et la vapeur d'eau sont traitées comme deux espèces distinctes, dont les pressions partielles sont déterminées par l'équilibre de phase local.
- H6** La solubilité de H_2 et O_2 dans l'eau liquide est négligée : la phase liquide est assimilée à de l'eau pure. Cette hypothèse exclut la modélisation du phénomène de perméation des gaz (*gas crossover*).
- H7** Les coefficients de transfert thermique (U , h) et les rendements mécaniques sont supposés constants sur la plage de fonctionnement considérée.

Ces hypothèses définissent le périmètre de validité du modèle, rappelé en section. En particulier, le modèle n'est pas conçu pour simuler un démarrage à froid complet ni des rampes de courant supérieures à $\sim 1 \text{ A}/(\text{cm}^2 \cdot \text{s})$, domaines dans lesquels des phénomènes non modélisés (transitoires électrochimiques rapides, gradient thermique intra-cellule) deviendraient prépondérants.

2.2. Modèle du stack PEM

2.2.1 Modèle électrochimique

La modélisation électrochimique constitue le noyau du modèle de stack. Elle permet de relier le courant imposé par le redresseur à la tension aux bornes du stack, en décomposant cette dernière en une contribution thermodynamique réversible et en plusieurs termes de perte irréversibles. La conception de ce modèle s'appuie sur une série d'hypothèses simplificatrices, comme équilibre entre précision physique et efficacité numérique lors de la simulation du stack. Le formalisme mathématique retenu repose ainsi sur les principes

suivants :

Hypothèses simplificatrices

- H1** Les cellules sont considérées comme étant identiques, assurant une distribution uniforme des flux réactifs et caloporteurs (Homogénéité des paramètres).
- H2** Le volume des canaux ainsi que les pertes de charge (pressions) à leur niveau sont supposés négligeables (pas d'accumulation de gaz).
- H3** La température des flux sortants est égale à celle du stack (équilibre thermique local).
- H4** Les résistances électroniques des composants solides (plaques bipolaires, couches catalytiques et couches de diffusion gazeuse) ainsi que les résistances de contact aux interfaces sont négligeables devant la résistance ionique de la membrane.
- H5** La surtension liée à la formation des bulles est négligée.

Ces simplifications permettent de focaliser la résolution numérique sur les phénomènes prépondérants régissant la courbe de polarisation, à savoir les surtensions d'activation, les chutes ohmiques (principalement membranaires) et les pertes par diffusion (transport de matière).

Conformément à l'hypothèse **H1** (cellules équivalentes), la tension du stack s'obtient en multipliant la tension d'une cellule élémentaire par le nombre de cellules N_{cells} :

$$E_{\text{stack}} = N_{\text{cells}} \cdot E_{\text{cell}} \quad (2.1)$$

Il suffit donc de modéliser une cellule représentative pour décrire le comportement électrique de l'ensemble du stack.

2.2.1.1 Tension réversible et tension thermoneutre

La tension réversible E_{rev} représente l'énergie libre minimale par unité de charge nécessaire pour dissocier une molécule d'eau dans les conditions opératoires. Elle est définie à partir de l'enthalpie libre de réaction $\Delta G(T, p)$ [4] [3] [8] :

$$E_{\text{rev}}^0 = \frac{\Delta G(T, p)}{nF} \quad (2.2)$$

où $n = 2$ est le nombre d'électrons échangés par mole de H_2 produit et $F = 96\,485 \text{ C/mol}$ est la constante de Faraday. Cette tension dépend à la fois de la température et de la pression de fonctionnement.

De manière analogue, la **tension thermoneutre** V_{th} représente la tension à partir

de laquelle la chaleur produite par les irréversibilités de la cellule compense exactement l'énergie thermique nécessaire à la réaction endothermique (équilibre thermique). Elle est définie à partir de l'enthalpie totale de réaction $\Delta H(T, p)$ [4] [3] :

$$V_{th} = \frac{\Delta H(T, p)}{nF} \quad (2.3)$$

La distinction entre E_{rev} et V_{th} est fondamentale pour le couplage électro-thermique : lorsque la tension de cellule dépasse V_{th} , l'excès d'énergie électrique est intégralement dissipé sous forme de chaleur, rendant tout apport thermique externe superflu. Dans le cas contraire, une source de chaleur externe est nécessaire pour maintenir la réaction.

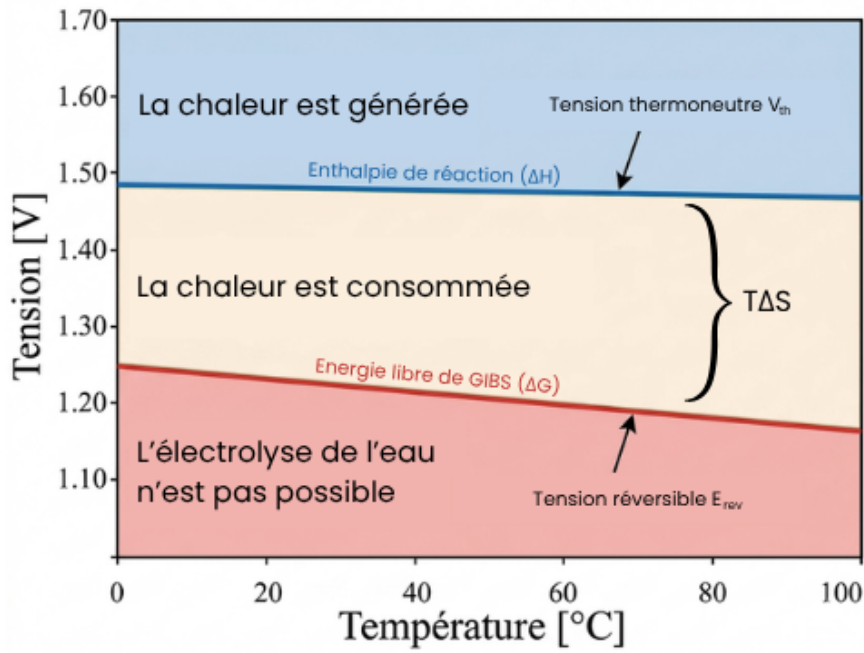


FIGURE 2.2 – Graphique de la tension réversible et thermo-neutre pour l'électrolyse de l'eau en fonction de la température à une pression de 1 bar

La correction de E_{rev}^0 en fonction des pressions partielles réelles des gaz est apportée par l'**équation de Nernst**. Celle-ci prend en compte l'écart des activités des espèces par rapport à l'état standard ($p^0 = 1$ bar, $a_{H_2O} = 1$ pour l'eau liquide) [4] [3] [8] :

$$E_{rev} = E_{rev}^0 + \frac{RT_{stack}}{nF} \ln \left(\frac{p_{H_2} \cdot p_{O_2}^{0.5}}{p_{H_2O}} \right) \quad (2.4)$$

Le terme logarithmique traduit l'influence des contre-pressions anodique (p_{O_2}) et cathodique (p_{H_2}) sur l'énergie libre de la réaction. A pression croissante, E_{rev} augmente légèrement, ce qui pénalise le rendement thermodynamique mais favorise la compression du gaz produit. La pression partielle de l'eau p_{H_2O} est évaluée par la corrélation d'Antoine en fonction de T_{stack} .

2.2.1.2 Tension de cellule et décomposition des pertes

La tension aux bornes d'une cellule en fonctionnement est supérieure à E_{rev} en raison des irréversibilités internes. Elle s'écrit comme la somme de la tension réversible et

de quatre termes de surtension [4] [3] [8] :

$$E_{\text{cell}} = E_{\text{rev}} + \Delta V_{\text{act}} + \Delta V_{\text{ohm}} + \Delta V_{\text{diff}} + \Delta V_{\text{bub}} \quad (2.5)$$

Chaque terme correspond à un mécanisme physique distinct : ΔV_{act} traduit la cinétique des demi-réactions aux électrodes, ΔV_{ohm} les résistances ionique et électronique, ΔV_{diff} l'appauvrissement en réactifs à haute densité de courant, et ΔV_{bub} l'effet de masquage des sites actifs par les bulles de gaz formées à l'anode. Ces quatre contributions sont détaillées dans les sous-sections suivantes.

2.2.1.3 Surtension d'activation

La surtension d'activation est la première source de perte. Elle est liée à l'énergie nécessaire pour initier le transfert de charge aux interfaces électrode-électrolyte. Pour les deux demi-réactions (l'OER à l'anode et la HER à la cathode) ce phénomène est décrit par l'équation de **Butler-Volmer** dans sa forme symétrique [4] :

$$i = i_{0,X} \left[\exp\left(\frac{\alpha_X n F}{RT_{\text{stack}}} \Delta V_{\text{act},X}\right) - \exp\left(\frac{(\alpha_X - 1) n F}{RT_{\text{stack}}} \Delta V_{\text{act},X}\right) \right] \quad (2.6)$$

où $i_{0,X}$ est la densité de courant d'échange de l'électrode $X \in \{\text{an}, \text{ca}\}$, et α_X est le coefficient de transfert de charge. En inversant cette relation pour exprimer la surtension en fonction de la densité de courant imposée, et en adoptant la forme **arc-sinus hyperbolique** qui reste valable quelle que soit l'intensité de la polarisation, on obtient la formulation retenue dans ce modèle [4] [8] :

$$\Delta V_{\text{act}} = \frac{RT_{\text{stack}}}{\alpha_{\text{an}} F} \sinh^{-1}\left(\frac{i}{2 i_{0,\text{an}}}\right) + \frac{RT_{\text{stack}}}{\alpha_{\text{ca}} F} \sinh^{-1}\left(\frac{i}{2 i_{0,\text{ca}}}\right) \quad (2.7)$$

avec la contrainte $\alpha_{\text{an}} + \alpha_{\text{ca}} = 1$, traduisant la symétrie du transfert de charge dans l'hypothèse d'un coefficient $\alpha_X = 0,5$. Conformément à l'hypothèse spécifique du stack, la surtension cathodique est conservée dans cette expression mais reste numériquement négligeable, la cinétique HER étant significativement plus rapide que l'OER.

La densité de courant d'échange $i_{0,X}$ gouverne la facilité avec laquelle la réaction franchit la barrière d'activation. Elle dépend de la température selon une loi d'Arrhénius [1] :

$$i_{0,X} = k_{i_{0,X}} \exp\left(-\frac{\Delta G_X^0}{R T_{\text{stack}}}\right) \quad (2.8)$$

où ΔG_X^0 est l'énergie libre d'activation de la demi-réaction X et $k_{i_{0,X}}$ est un facteur pré-exponentiel caractéristique des matériaux catalytiques (Ir/Ti à l'anode, Pt/Ti à la cathode). Ces deux paramètres sont identifiés par calage sur les données expérimentales du banc d'essais "PIELIZ" du laboratoire.

2.2.1.4 Surtension ohmique

La deuxième contribution aux pertes est la surtension ohmique, qui traduit la résistance au transport des électrons dans les électrodes et des protons à travers la

membrane [4] [3] [8] :

$$\Delta V_{\text{ohm}} = (R_{\text{el,an}} + R_{\text{el,ca}} + R_{\text{mem}}) \cdot i \cdot A_{\text{cell}} \quad (2.9)$$

Les résistances électroniques des électrodes sont définies par : $R_{\text{el,X}} = \delta_{\text{el,X}} / (A_{\text{cell}} \rho_{\text{el,X}})$. Dans la plage de conditions opératoires du banc d'essais, leur contribution est négligeable devant celle de la membrane, de sorte que la surtension ohmique est dominée par la résistance ionique membranaire :

$$R_{\text{mem}} = \frac{\delta_{\text{mem}}}{\sigma_{\text{mem}} \cdot A_{\text{cell}}} \quad (2.10)$$

La conductivité protonique σ_{mem} dépend de l'état d'hydratation de la membrane et de la température. Elle est modélisée par la corrélation empirique suivante, adaptée à l'électrolyse PEM :

$$\sigma_{\text{mem}} = (0,005139 \lambda - 0,00326) \exp \left[1268 \left(\frac{1}{303} - \frac{1}{T_{\text{stack}}} \right) \right] \quad (2.11)$$

où λ est le taux d'hydratation de la membrane, défini comme le nombre de molécules d'eau par site d'acide sulfonique. Pour une membrane Nafion entièrement hydratée, $\lambda = 22$; en fonctionnement normal, $\lambda \in [14; 22]$. La dépendance exponentielle en température traduit le fait qu'une membrane plus chaude conduit les protons plus efficacement, réduisant ainsi les pertes ohmiques.

2.2.1.5 Surtension de concentration

À haute densité de courant, la vitesse de consommation des réactifs aux interfaces catalytiques peut dépasser leur vitesse d'apport par diffusion, créant un gradient de concentration entre les canaux de distribution et la surface active. Cette limitation de transport de masse se traduit par la **surtension de diffusion**, modélisée par l'introduction d'une densité de courant limite i_L [9] :

$$\Delta V_{\text{diff}} = -\frac{RT_{\text{stack}}}{2F} \ln \left(1 - \frac{i}{i_L} \right) \quad (2.12)$$

Lorsque $i \ll i_L$, cette surtension est quasi nulle et la cellule opère en régime contrôlé par la cinétique. À mesure que i s'approche de i_L , le terme logarithmique diverge, traduisant l'effondrement de la tension utile. Dans les conditions nominales du banc d'essais ($i \leq 2 \text{ A/cm}^2$), cette contribution reste limitée mais non négligeable à charge élevée.

2.2.1.6 Surtension de bulles

C'est une contribution spécifique à l'électrolyse PEM qui ne s'applique pas aux modèles de pile à combustible, est la **surtension de bulles**. Les bulles d'oxygène formées à l'anode recouvrent partiellement les sites catalytiques actifs, réduisant la surface électrochimiquement disponible. Ce phénomène est quantifié par le taux de couverture $\theta \in [0, 1]$ et son effet sur la surtension est modélisé par [4] [8] :

$$\Delta V_{\text{bub,an}} = \frac{RT_{\text{an}}}{2} n \alpha_{\text{an}} F \left(\frac{1}{1-\theta} \right)^2 \quad (2.13)$$

Le terme $(1-\theta)^{-2}$ amplifie la surtension de manière non linéaire lorsque le taux de couverture s'approche de l'unité, ce qui peut survenir à haute densité de courant ou à basse vitesse de circulation de l'eau anodique. Cette surtension est uniquement anodique, la production de bulles cathodiques (H_2) étant négligeable en comparaison.

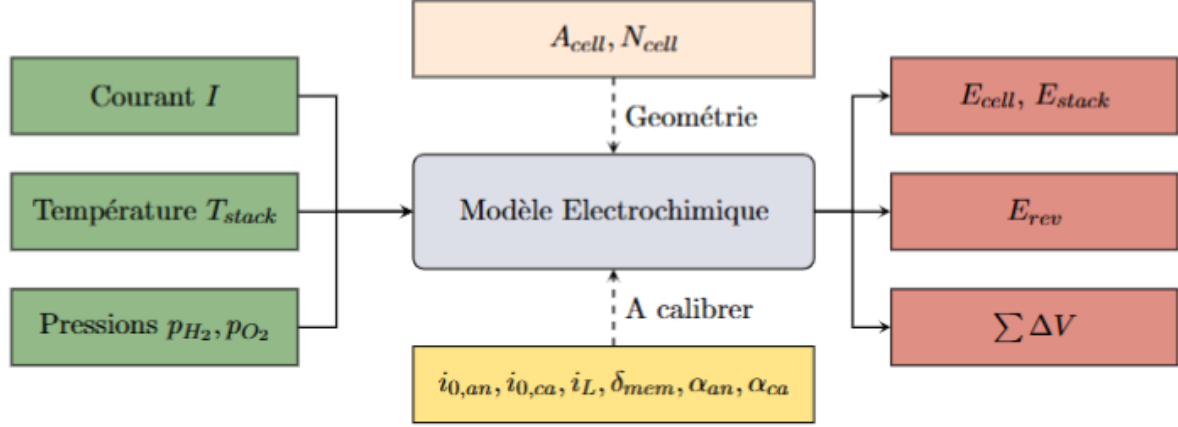


FIGURE 2.3 – Schéma bloc du modèle électrochimique

2.2.1.7 Récapitulatif et variables du modèle

Le modèle électrochimique est de nature **algébrique** : à chaque instant, la tension de cellule E_{cell} est calculée directement à partir des entrées courantes sans résoudre d'équation différentielle propre. La dynamique du sous-modèle est entièrement pilotée par les états des sous-modèles voisins, avec T_{stack} issu du modèle thermique, p_{H_2} et p_{O_2} issus du modèle fluide, soulignant le couplage fort entre les trois sous-modèles du stack.

2.2.2 Modèle thermique

La modélisation thermique vise à déterminer la température au sein de la cellule d'électrolyse PEM en quantifiant les transferts de chaleur qui traversent ses différents composants. Cette grandeur conditionne directement la cinétique des réactions électrochimiques, la conductivité ionique de la membrane ainsi que le transport de matière. La résolution du bilan thermique du système repose sur les hypothèses fondamentales suivantes :

TABLE 2.2 – Variables et paramètres du modèle électrochimique.

Catégorie	Symbole	Unité
Entrées	I	A
	T_{stack}	K
	$p_{\text{H}_2}, p_{\text{O}_2}$	bar
Sorties	E_{rev}	V
	$E_{\text{cell}}, E_{\text{stack}}$	V
	$\Delta V_{\text{act/ohm/diff/bub}}$	V
	σ_{mem}	S m^{-1}
Paramètres à calibrer	$i_{0,\text{an}}, i_{0,\text{ca}}$	A cm^{-2}
	$\alpha_{\text{an}}, \alpha_{\text{ca}}$	—
	δ_{mem}	m
	i_L	A cm^{-2}

Hypothèses simplificatrices

- H1** Le bilan d'énergie est réalisé à l'échelle globale du stack. La température est supposée uniforme en tout point de la cellule d'électrolyse (système zéro-dimensionnel (0D)).
- H2** Les transferts de chaleur vers le milieu ambiant (regroupant la conduction, la convection et le rayonnement) sont modélisés par une résistance thermique globale (R_{th}) constante. Ces pertes sont considérées comme majoritairement régies par la convection.
- H3** La quantité de chaleur emportée par les flux de gaz produits (H_2 et O_2) à la sortie du système est négligeable.
- H4** Les phénomènes d'évaporation de l'eau au sein de la cellule ne sont pas intégrés, la chaleur latente associée est donc supposée nulle.
- H5** Les propriétés thermophysiques (capacité thermique massique et masse volumique) sont supposées constantes (pas de variations en fonction de la température).

La réaction d'électrolyse de l'eau est endothermique dans les conditions standard. En fonctionnement réel, les irréversibilités électrochimiques (surtensions d'activation, ohmique, de diffusion et de bulles) génèrent une puissance thermique qui peut couvrir partiellement ou intégralement cet apport énergétique nécessaire.

2.2.2.1 Bilan d'énergie dynamique global

Le premier principe de la thermodynamique est appliqué au stack comme volume de contrôle à paramètres localisés, conduit au bilan d'énergie dynamique suivant [4] :

$$C_{\text{th}} \frac{dT_{\text{stack}}}{dt} = \dot{Q}_{\text{net}} \quad (2.14)$$

où C_{th} est la capacité thermique effective du stack et $\dot{Q}_{\text{net}}$ est la puissance thermique nette. La capacité thermique effective regroupe les contributions de tous les matériaux constitutifs du stack : plaques bipolaires, électrodes, membrane, cadres d'étanchéité et eau contenue dans les canaux [4] [9].

$$C_{\text{th}} = \sum_j m_j c_{p,j} = \sum_j \rho_j V_j c_{p,j} \quad (2.15)$$

Ce paramètre agrégé est difficile à calculer analytiquement en raison de la complexité géométrique du stack ; il est donc identifié expérimentalement à partir des données transitoires du banc d'essais. La puissance nette $\dot{Q}_{\text{net}}$ est la résultante algébrique de majoritairement quatre contributions :

$$\dot{Q}_{\text{net}} = \sum (\dot{Q}_{\text{in}} - \dot{Q}_{\text{out}}) = \dot{Q}_{\text{gen}} - \dot{Q}_{\text{loss}} - \dot{Q}_{\text{cool}} - \dot{Q}_{\text{gas}} \quad (2.16)$$

Chacun de ces termes correspond à un mécanisme physique distinct, détaillé dans les sous-sections suivantes.

2.2.2.2 Chaleur générée par les irréversibilités

La principale source de chaleur dans le stack est la dissipation associée aux surtensions irréversibles. Lorsque la tension de cellule E_{cell} dépasse la tension thermoneutre V_{th} , l'excès de puissance électrique fournie est intégralement converti en chaleur. Cette puissance thermique générée s'exprime par [8] [4] :

$$\dot{Q}_{\text{gen}} = N_{\text{cells}} (E_{\text{cell}} - V_{\text{th}}) I = N_{\text{cells}} \left(E_{\text{irrev}} - T \frac{\Delta S}{2F} \right) I = \sum \Delta V_{\text{over}} \cdot I \quad (2.17)$$

où la somme $\sum \Delta V_{\text{over}}$ porte sur l'ensemble des surtensions irréversibles de la cellule ($\Delta V_{\text{act}} + \Delta V_{\text{ohm}} + \Delta V_{\text{diff}} + \Delta V_{\text{bub}}$). Cette formulation établit un lien direct entre le modèle électrochimique et le modèle thermique : les surtensions calculées en section 2.2.1 alimentent directement le terme source du bilan thermique. Deux régimes distincts sont à distinguer [9] :

$$\begin{cases} E_{\text{irrev}} \geq T \frac{\Delta S}{2F} & \Rightarrow \dot{Q}_{\text{gen}} \geq 0 : \text{aucune source de chaleur externe nécessaire} \\ E_{\text{irrev}} < T \frac{\Delta S}{2F} & \Rightarrow \dot{Q}_{\text{input}} = N_{\text{cells}} (T \frac{\Delta S}{2F} - E_{\text{irrev}}) I \text{ doit être fourni} \end{cases} \quad (2.18)$$

En pratique, la tension de fonctionnement dépasse toujours $V_{\text{th}} \approx 1,48$ V, de sorte

que le stack fonctionne en mode autothermique et nécessite un système de refroidissement actif plutôt qu'un apport de chaleur.

2.2.2.3 Pertes thermiques vers l'environnement

Le stack échange de la chaleur avec l'air ambiant par conduction à travers les parois, convection naturelle et rayonnement. Ces trois mécanismes sont regroupés en une résistance thermique globale R_{th} selon l'analogie électro-thermique [9] :

$$\dot{Q}_{loss} = \frac{1}{R_{th}} (T_{stack} - T_{amb}) \quad (2.19)$$

Ce terme est proportionnel à l'écart de température entre le stack et l'ambiante T_{amb} . La résistance thermique globale R_{th} est un paramètre empirique identifié expérimentalement ; elle dépend de la géométrie du stack, de son isolation thermique et des conditions de ventilation autour du banc.

2.2.2.4 Chaleur évacuée par le circuit de refroidissement

Pour maintenir T_{stack} à sa valeur nominale, un débit d'eau de refroidissement $\dot{m}_{H_2O}$ est injecté en entrée du stack à la température T_{elc}^{in} et en ressort à T_{elc}^{out} . La puissance extraite par ce fluide caloporteur est [8] [4] [9] :

$$\dot{Q}_{cool} = \dot{m}_{H_2O} c_{p,H_2O} (T_{elc}^{in} - T_{elc}^{out}) \quad (2.20)$$

Le débit de refroidissement $\dot{m}_{H_2O}$ est piloté par le régulateur PI de température décrit en section 1.4, qui ajuste en temps réel la vitesse de la pompe d'alimentation en fonction de l'écart entre T_{stack} et la consigne. Ce terme constitue le principal levier de contrôle thermique du système.

2.2.2.5 Chaleur extraite par les gaz sortants

Les gaz produits (H_2 côté cathode et O_2 côté anode) quittent le stack à la température T_{stack} et entrent dans les séparateurs à une température proche de l'ambiante, emportant ainsi une fraction de l'énergie thermique du stack. Ce flux est modélisé par [9] :

$$\dot{Q}_{gas} = [\dot{m}_{H_2} c_{p,H_2} + \dot{m}_{O_2} c_{p,O_2}] (T_{stack} - T_{amb}) \quad (2.21)$$

Ce terme est généralement faible devant $\dot{Q}_{cool}$ en raison des faibles capacités thermiques massiques des gaz, mais il devient non négligeable à forte densité de courant où les débits molaires de H_2 et O_2 sont élevés. Les débits massiques $\dot{m}_{H_2}$ et $\dot{m}_{O_2}$ sont directement issus des sorties du modèle fluidique via la loi de Faraday (section 2.2.3).

2.2.2.6 Chaleur latente d'évaporation de l'eau

L'apparition de vapeur d'eau implique la prise en compte du terme de chaleur latente au sein du bilan énergétique, l'énergie d'évaporation étant alors quantifiée par l'enthalpie de vaporisation conformément à la relation suivante :

$$\dot{Q}_{vap} = \dot{n}_{H_2O,vap} \Delta H_{vap}(T_{out}) \quad (2.22)$$

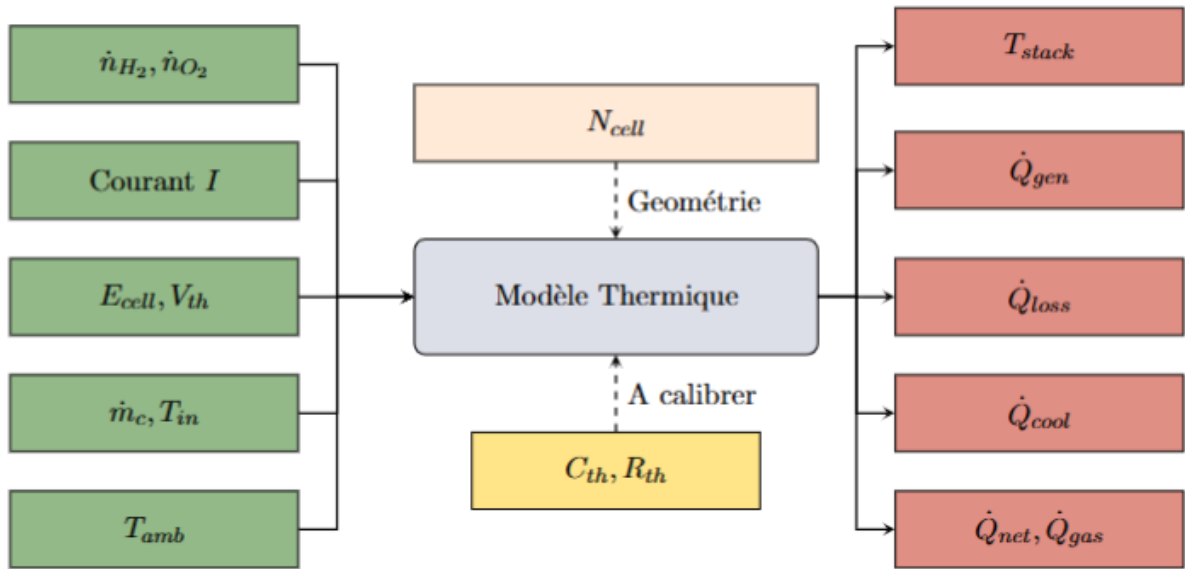


FIGURE 2.4 – Schéma bloc du modèle thermique

TABLE 2.3 – Variables et paramètres du modèle thermique du stack.

Catégorie	Symbole	Unité
Entrées	T_{amb}	K
	I	A
	E_{cell}, V_{th}	V
	$\dot{m}_c, T_c^{in}$	kg/s, K
	$\dot{n}_{H_2}, \dot{n}_{O_2}$	mol/s
Sorties	T_{stack}	K
	$\dot{Q}_{gen}$	W
	$\dot{Q}_{loss}$	W
	$\dot{Q}_{cool}, \dot{Q}_{gas}$	W
Paramètres à calibrer	C_{th}	J/K
	R_{th}	K/W

2.2.3 Modèle fluide (transport de masse)

Le modèle de transport de masse décrit la distribution et l'évolution des concentrations des espèces chimiques dans le système, permettant notamment le calcul des pressions partielles des gaz produits par électrolyse. Cette formulation s'appuie sur les hypothèses simplificatrices détaillées ci-après pour permettre sa résolution.

Hypothèses simplificatrices

- H1** L'eau est injectée uniquement du côté de l'anode, la cathode n'est pas alimentée.
- H2** La perméation des gaz (H_2 et O_2) à travers la membrane (crossover), est considérée comme négligeable.
- H3** Les propriétés structurales des milieux poreux sont supposées constantes et l'effet du vieillissement est négligé.
- H4** Les phénomènes de compression et de gonflement hydrique de la membrane ne sont pas pris en compte, sa géométrie et son volume restent constants.

Le transport de masse au sein du stack PEM décrit le devenir de chaque espèce chimique (eau, oxygène et hydrogène) depuis leur injection ou production jusqu'à leur évacuation. A l'anode, l'eau liquide est alimentée en continu, consommée par la réaction OER et partiellement transférée vers la cathode à travers la membrane. A la cathode, l'hydrogène produit s'accumule et est évacué vers le séparateur. La membrane constitue le troisième domaine actif : elle assure le transport sélectif des protons tout en laissant passer une fraction de l'eau par trois mécanismes distincts.

Le modèle repose sur le **principe de conservation de la masse** appliqué à chacun de ces volumes de contrôle. Pour toute espèce i , la variation temporelle du nombre de moles n_i dans un volume est gouvernée par :

$$\frac{dn_i}{dt} = \dot{n}_i^{\text{in}} - \dot{n}_i^{\text{out}} + \dot{n}_i^{\text{react}} + \sum \dot{n}_i^{\text{ex}} \quad (2.23)$$

où $\dot{n}_i^{\text{react}}$ représente le taux de disparition (eau consommée) ou de formation (H_2 et O_2 produits) par la réaction électrochimique, et $\sum \dot{n}_i^{\text{ex}}$ la somme des flux transmembranaires. Cette équation est appliquée séparément aux volumes de contrôle de l'anode, de la cathode et de la membrane, comme détaillé ci-après.

2.2.3.1 Bilan de matière à l'anode

Le volume de contrôle anodique contient deux espèces : l'eau liquide, qui alimente la réaction, et l'oxygène gazeux produit par l'OER. Les bilans de matière sur ces deux espèces sont couplés par la loi de Faraday et par les échanges avec la membrane [4] :

$$\begin{cases} \frac{dn_{H_2O,an}}{dt} = \dot{n}_{H_2O}^{\text{in},an} - \dot{n}_{H_2O}^{\text{out},an} - \dot{n}_{H_2O}^{\text{cons}} - \dot{n}_{H_2O}^{\text{mem}} - \dot{n}^{\text{eva},an} \\ \frac{dn_{O_2,an}}{dt} = -\dot{n}_{O_2}^{\text{out},an} + \dot{n}_{O_2}^{\text{gen}} \end{cases} \quad (2.24)$$

Le terme $\dot{n}_{H_2O}^{\text{cons}}$ traduit la consommation d'eau par la réaction électrochimique, évaluée par la loi de Faraday (cf. §2.2.3.3). Le terme $\dot{n}_{H_2O}^{\text{mem}}$ regroupe les trois mécanismes de

transport transmembranaire détaillés en §2.2.3.4. Le terme d'évaporation $\dot{n}^{\text{eva,an}}$ est activé à haute température, lorsque la pression partielle de vapeur d'eau dépasse la pression de saturation locale. En pratique, dans la plage de fonctionnement du banc d'essais ($T_{\text{stack}} \leq 60^\circ\text{C}$), ce terme reste négligeable.

De manière symétrique, le bilan de matière de la vapeur d'eau anodique, nécessaire pour évaluer les pressions partielles, est gouverné par :

$$\frac{dn_{\text{vapor,an}}}{dt} = -\dot{n}_{\text{vapor}}^{\text{out,an}} + \dot{n}^{\text{eva,an}} \quad (2.25)$$

2.2.3.2 Bilan de matière à la cathode

Côté cathode, aucune eau n'est injectée directement : seule l'eau transférée depuis l'anode à travers la membrane $\dot{n}_{\text{H}_2\text{O}}^{\text{mem}}$ alimente ce compartiment. Les bilans sur l'eau et sur l'hydrogène s'écrivent [4] :

$$\begin{cases} \frac{dn_{\text{H}_2\text{O,ca}}}{dt} = -\dot{n}_{\text{H}_2\text{O}}^{\text{out,ca}} + \dot{n}_{\text{H}_2\text{O}}^{\text{mem}} - \dot{n}^{\text{eva,ca}} \\ \frac{dn_{\text{H}_2,ca}}{dt} = -\dot{n}_{\text{H}_2}^{\text{out,ca}} + \dot{n}_{\text{H}_2}^{\text{gen}} \end{cases} \quad (2.26)$$

L'hydrogène produit $\dot{n}_{\text{H}_2}^{\text{gen}}$ est calculé par la loi de Faraday. Le débit sortant $\dot{n}_{\text{H}_2}^{\text{out,ca}}$ est évacué vers le séparateur $\text{H}_2/\text{H}_2\text{O}$, dont la pression de refoulement constitue la contre-pression cathodique p_{ca} . Le bilan de vapeur cathodique, de structure analogue à l'équation (2.25), permet de déterminer la fraction vapeur de l'eau côté cathode :

$$\frac{dn_{\text{vapor,ca}}}{dt} = -\dot{n}_{\text{H}_2\text{O}}^{\text{out,ca}} + \dot{n}^{\text{eva,ca}} \quad (2.27)$$

2.2.3.3 Taux de production et de consommation (Loi de Faraday)

Les taux de production et de consommation des espèces par la réaction électrochimique sont directement reliés au courant I via la loi de Faraday, en tenant compte du rendement faradique η_f de la cellule. Dans les électrolyseurs PEM, ce rendement est très proche de l'unité ; la valeur retenue dans ce modèle est $\eta_f = 99\%$:

$$\dot{n}_{\text{H}_2}^{\text{gen}} = \frac{I}{2F} \eta_f \quad (2.28)$$

$$\dot{n}_{\text{O}_2}^{\text{gen}} = \frac{I}{4F} \eta_f \quad (2.29)$$

$$\dot{n}_{\text{H}_2\text{O}}^{\text{cons}} = \frac{I}{2F} \eta_f \quad (2.30)$$

Ces trois expressions découlent de la stœchiométrie des demi-réactions d'oxydo-réduction : deux électrons sont échangés par mole de H_2 produit et par mole de H_2O consommée, tandis que quatre électrons correspondent à la production d'une mole d' O_2 . Le courant I est ici la grandeur d'entrée du stack, imposée par le redresseur AC/DC.

2.2.3.4 Transport d'eau à travers la membrane

La membrane Nafion est le siège de trois mécanismes de transport de l'eau, dont la résultante détermine le flux total $\dot{n}_{\text{H}_2\text{O}}^{\text{mem}}$ transféré de l'anode vers la cathode :

$$\dot{n}_{\text{H}_2\text{O}}^{\text{mem}} = \dot{n}_{\text{H}_2\text{O}}^{\text{diff}} + \dot{n}_{\text{H}_2\text{O}}^{\text{eo}} - \dot{n}_{\text{H}_2\text{O}}^{\Delta p} \quad (2.31)$$

Chaque terme est de signe et d'origine physique distincts. Le signe négatif devant $\dot{n}^{\Delta p}$ traduit le fait que le gradient de pression cathodique $p_{\text{ca}} > p_{\text{an}}$ génère un flux d'eau de retour vers l'anode, s'opposant aux deux autres mécanismes.

Transport électro-osmotique. Lorsque les protons migrent de l'anode vers la cathode sous l'effet du champ électrique, ils entraînent avec eux des molécules d'eau solidaires. Ce phénomène, dit d'électro-osmose, est proportionnel au flux de charge :

$$\dot{n}_{\text{H}_2\text{O}}^{\text{eo}} = \frac{I}{F} n_d \quad (2.32)$$

Le coefficient électro-osmotique n_d représente le nombre de molécules d'eau entraînées par proton. Il dépend de l'état d'hydratation de la membrane λ et de la température T selon deux formulations équivalentes :

$$n_d = \begin{cases} 0,016 T - 2,89556 & (T \text{ en K}) \\ 0,0029 \lambda^2 + 0,05 \lambda - 3,4 \times 10^{-19} \end{cases} \quad (2.33)$$

où $\lambda \in [14; 22]$ est le nombre de molécules d'eau par site d'acide sulfonique, la valeur haute correspondant à une membrane Nafion entièrement hydratée. La première formulation, linéaire en T , est préférable dans les simulations où la température varie rapidement ; la seconde, polynomiale en λ , est plus précise pour l'analyse des états d'hydratation.

Transport par gradient de pression (loi de Darcy). La différence de pression entre la cathode et l'anode génère un flux convectif d'eau à travers les pores de la membrane, décrit par la loi de Darcy :

$$\dot{n}_{\text{H}_2\text{O}}^{\Delta p} = \frac{k_{\text{mem}} A_{\text{cell}} \rho_{\text{H}_2\text{O}} (p_{\text{ca}} - p_{\text{an}})}{\delta_{\text{mem}} \mu_{\text{H}_2\text{O}} M_{\text{H}_2\text{O}}} \quad (2.34)$$

où k_{mem} est la perméabilité hydraulique de la membrane (paramètre fixé), δ_{mem} son épaisseur, $\mu_{\text{H}_2\text{O}}$ la viscosité dynamique de l'eau et $\rho_{\text{H}_2\text{O}}$ sa masse volumique. Ce terme s'intensifie à mesure que la contre-pression cathodique p_{ca} augmente, ce qui constitue l'un des défis du fonctionnement à haute pression dans les électrolyseurs PEM différentiels.

Transport par diffusion (loi de Fick) Un gradient de concentration d'eau entre les faces anodique et cathodique de la membrane génère un flux diffusif, modélisé par la loi de Fick :

$$\dot{n}_{\text{H}_2\text{O}}^{\text{diff}} = \frac{A_{\text{cell}} D_w}{\delta_{\text{mem}}} (c_{\text{H}_2\text{O}}^{\text{mem,an}} - c_{\text{H}_2\text{O}}^{\text{mem,ca}}) \quad (2.35)$$

où D_w est le coefficient de diffusion de l'eau dans la membrane. Les concentrations aux interfaces membranaires sont elles-mêmes reliées aux concentrations dans les canaux par les flux diffusifs à travers les couches de diffusion gazeuse anodique et cathodique :

$$\begin{cases} \dot{n}_{\text{H}_2\text{O}}^{\text{an}} = \dot{n}_{\text{H}_2\text{O}}^{\text{mem}} + \dot{n}_{\text{H}_2\text{O}}^{\text{cons}} = \frac{A_{\text{cell}} D_{\text{eff,an}}}{\delta_{\text{an}}} (c_{\text{H}_2\text{O}}^{\text{ch,an}} - c_{\text{H}_2\text{O}}^{\text{mem,an}}) \\ \dot{n}_{\text{H}_2\text{O}}^{\text{ca}} = \dot{n}_{\text{H}_2\text{O}}^{\text{mem}} = \frac{A_{\text{cell}} D_{\text{eff,ca}}}{\delta_{\text{ca}}} (c_{\text{H}_2\text{O}}^{\text{mem,ca}} - c_{\text{H}_2\text{O}}^{\text{ch,ca}}) \end{cases} \quad (2.36)$$

Les coefficients de diffusion effectifs $D_{\text{eff,an}}$ et $D_{\text{eff,ca}}$ intègrent la porosité et la tortuosité des couches d'électrode.

$$D_{\text{eff,A-B}} = D_{\text{A-B}} \cdot \varepsilon \left(\frac{\varepsilon - \varepsilon_p}{1 - \varepsilon_p} \right)^\alpha \quad (2.37)$$

$$P D_{\text{A-B}} = a \left(\sqrt{T_{c,A} T_{c,B}} \right)^b (p_{c,A} p_{c,B})^{1/3} (T_{c,A} T_{c,B})^{5/12} \left(\frac{1}{M_{m,A}} + \frac{1}{M_{m,B}} \right)^{1/2} \quad (2.38)$$

Les concentrations en eau dans les canaux sont calculées à partir de la masse volumique de l'eau à la température locale :

$$c_{\text{H}_2\text{O}}^{\text{ch,an}} = \frac{\rho_{\text{H}_2\text{O}}(T_{\text{an}})}{M_{\text{H}_2\text{O}}} \quad c_{\text{H}_2\text{O}}^{\text{ch,ca}} = \frac{\rho_{\text{H}_2\text{O}}(T_{\text{ca}})}{M_{\text{H}_2\text{O}}} \quad (2.39)$$

En substituant les équations (2.36) et (2.39) dans l'expression du flux diffusif (2.35), on obtient la formulation développée du flux de diffusion membranaire :

$$\dot{n}_{\text{H}_2\text{O}}^{\text{diff}} = \frac{A_{\text{cell}} D_w}{\delta_{\text{mem}}} \left(\left[\frac{\rho_{\text{H}_2\text{O}}(T_{\text{ca}})}{M_{\text{H}_2\text{O}}} + \frac{\delta_{\text{el}}^{\text{ca}} n_{\text{H}_2\text{O}}^{\text{ca}}}{D_{\text{eff}}^{\text{ca}}} \right] - \left[\frac{\rho_{\text{H}_2\text{O}}(T_{\text{an}})}{M_{\text{H}_2\text{O}}} + \frac{\delta_{\text{el}}^{\text{an}} n_{\text{H}_2\text{O}}^{\text{an}}}{D_{\text{eff}}^{\text{an}}} \right] \right) \quad (2.40)$$

Cette expression montre que le flux diffusif est piloté à la fois par l'écart de température entre les deux électrodes (via $\rho_{\text{H}_2\text{O}}(T)$) et par l'écart des contenus en eau dans les couches d'électrode.

2.2.3.5 Pressions partielles et débits sortants

Sous l'hypothèse des gaz parfaits, la pression partielle de chaque espèce gazeuse i dans le volume de contrôle correspondant s'obtient directement à partir du nombre de moles calculé par les bilans ci-dessus :

$$p_i = \frac{n_i R T_{\text{el}}}{V_{\text{el}}} \quad (2.41)$$

Les pressions totales anodique et cathodique résultent de la loi de Dalton appliquée aux mélanges gazeux de chaque compartiment :

$$\begin{cases} p_{an} = p_{O_2} + p_{H_2O,an} \\ p_{ca} = p_{H_2O,ca} + p_{H_2} \end{cases} \quad (2.42)$$

Ces pressions totales constituent les contre-pressions transmises au modèle électrochimique pour le calcul de la tension de Nernst (2.4), bouclant ainsi le couplage entre les sous-modèles fluidique et électrochimique.

Les débits molaires sortants de l'anode et de la cathode sont modélisés par une loi de décharge linéaire en pression, analogue à une vanne de contrôle :

$$\dot{n}^{an,out} = k_{an,out} (p_{an} - p_0^{an}) \quad (2.43)$$

Le débit sortant total se décompose en ses fractions molaires respectives, selon la fraction molaire de l'oxygène X_{O_2} dans le mélange anodique :

$$\begin{cases} \dot{n}_{O_2}^{an,out} = X_{O_2} \cdot \dot{n}^{an,out} \\ \dot{n}_{H_2O}^{an,out} = (1 - X_{O_2}) \cdot \dot{n}^{an,out} \end{cases} \quad (2.44)$$

où la fraction molaire de l'oxygène est déduite directement des pressions partielles :

$$X_{O_2} = \frac{p_{O_2}}{p_{an}} \quad (2.45)$$

Les coefficients de débit $k_{an,out} = 0,95$ et $k_{ca,out} = 0,45$ sont des paramètres empiriques, dont les valeurs sont extraites de la littérature (REF). Le même formalisme s'applique côté cathode avec $k_{ca,out}$ pour le débit total H_2/H_2O .

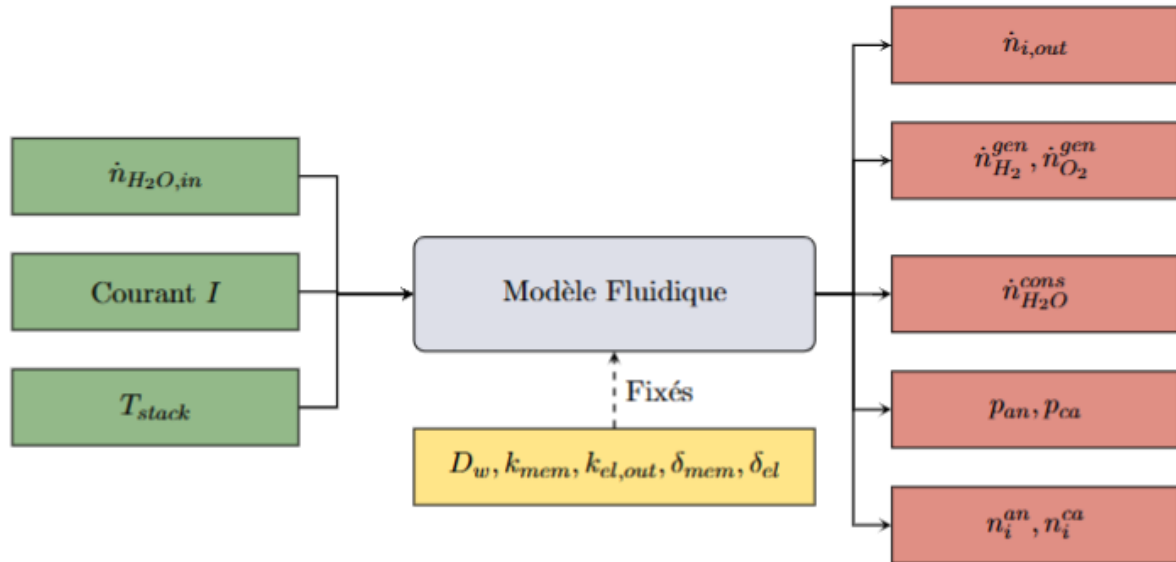


FIGURE 2.5 – Schéma bloc du modèle fluidique

2.2.3.6 Récapitulatif du modèle fluidique

Le modèle fluidique est de nature **différentielle** : ses états dynamiques sont les quantités molaires n_i^{an} et n_i^{ca} de chaque espèce dans chaque compartiment, intégrées par

les bilans (2.24) et (2.26). Il est fortement couplé au modèle électrochimique dans les deux sens : le courant I pilote les termes sources de Faraday, tandis que les pressions partielles calculées ici alimentent la tension de Nernst. La température T_{stack} , issue du modèle thermique, intervient dans les coefficients de diffusion et dans le calcul des concentrations en eau aux interfaces membranaires.

TABLE 2.4 – Variables et paramètres du modèle fluidique du stack.

Catégorie	Symbole	Unité
Entrées	I	A
	T_{stack}	K
	$p_{\text{an}}, p_{\text{ca}}$	bar
	$\dot{n}_{\text{H}_2\text{O}}^{\text{in,an}}$	mol/s
Sorties	$\dot{n}_{\text{H}_2}^{\text{gen}}, \dot{n}_{\text{O}_2}^{\text{gen}}$	mol/s
	$\dot{n}_{\text{H}_2\text{O}}^{\text{mem}}$	mol/s
	$\dot{n}_{\text{H}_2\text{O}}^{\text{eo}}, \dot{n}_{\text{H}_2\text{O}}^{\Delta p}, \dot{n}_{\text{H}_2\text{O}}^{\text{diff}}$	mol/s
	$p_{\text{H}_2}, p_{\text{O}_2}$	bar
	$\dot{n}^{\text{an,out}}, \dot{n}^{\text{ca,out}}$	mol/s
	$n_i^{\text{an}}, n_i^{\text{ca}}$	mol
Paramètres fixés	D_w, k_{mem}	$\text{m}^2/\text{s}, \text{m}^2$
	$D_{\text{eff,an}}, D_{\text{eff,ca}}$	m^2/s
	$k_{\text{an,out}}, k_{\text{ca,out}}$	$\text{mol}/(\text{s}\cdot\text{bar})$

2.2.4 Couplage des sous-modèles

Chacun des trois sous-modèles du stack produit des grandeurs qui constituent les entrées des deux autres. Ce couplage fort est le principe organisateur de l'architecture du modèle, et sa bonne résolution conditionne la fidélité de la simulation dynamique. La figure 2.6 en illustre la structure.

2.2.4.1 Nature des couplages

Du modèle fluidique vers le modèle électrochimique. Les pressions partielles p_{H_2} et p_{O_2} , calculées par les bilans de matière anodique et cathodique, alimentent directement la tension de Nernst (2.4). Toute variation de contre-pression se répercute immédiatement sur la tension réversible E_{rev} , et donc sur la tension de cellule E_{cell} . Ce lien traduit le fait que comprimer l'hydrogène à la cathode coûte de l'énergie électrique supplémentaire.

Du modèle électrochimique vers le modèle thermique. Les surtensions irréversibles $\sum \Delta V_{\text{over}}$, calculées par le modèle électrochimique, constituent le terme source $\dot{Q}_{\text{gen}}$ (2.17) du bilan enthalpique du stack. Ainsi, le modèle thermique dépend de l'état de fonctionnement électrique du stack : une augmentation de courant induirait donc

échauffement du système qui nécessite un refroidissement refroidissement piloté en boucle fermée (section 1.4)..

Du modèle thermique vers le modèle électrochimique. La température T_{stack} intervient dans trois expressions du modèle électrochimique simultanément :

- la conductivité protonique de la membrane $\sigma_{\text{mem}}(T_{\text{stack}})$ (2.11) (surtension ohmique) ;
- les densités de courant d'échange $i_{0,X}(T_{\text{stack}})$ (2.8) (surtension d'activation) ;
- la tension de Nernst $E_{\text{rev}}(T_{\text{stack}})$ (2.4), qui dépend linéairement de T_{stack} .

Du modèle thermique vers le modèle fluidique. T_{stack} intervient dans le calcul des coefficients de diffusion effectifs $D_{\text{eff,an}}$ et $D_{\text{eff,ca}}$ (2.37), dans la masse volumique de l'eau $\rho_{\text{H}_2\text{O}}(T)$ utilisée pour les concentrations aux interfaces membranaires (2.39), et dans le coefficient électro-osmotique $n_d(T)$ (2.33). Une élévation de température facilite ainsi le transport de l'eau à travers la membrane et modifie la répartition des flux entre les trois mécanismes transmembranaires.

Du modèle fluidique vers le modèle thermique. Les débits molaires de gaz sortants $\dot{n}_{\text{H}_2}$ et $\dot{n}_{\text{O}_2}$ alimentent le terme $\dot{Q}_{\text{gas}}$ (2.21) du bilan thermique. A forte densité de courant, l'augmentation de ces débits intensifie l'extraction de chaleur par les gaz sortants, contribuant au refroidissement passif du stack.

2.2.4.2 Résolution numérique du couplage

Le couplage décrit ci-dessus est **algèbro-différentiel** : les modèles électrochimique et fluidique partagent des variables algébriques (pressions, tensions) calculées à chaque instant à partir des états dynamiques du modèle thermique (T_{stack}) et du modèle fluidique ($n_i^{\text{an}}, n_i^{\text{ca}}$).

A chaque pas de temps $t \rightarrow t + \Delta t$, la séquence de calcul est la suivante :

1. **Modèle fluidique** : à partir du courant $I(t)$ et de $T_{\text{stack}}(t)$, calculer les taux de production (2.28)–(2.30), les flux transmembranaires (2.31), et mettre à jour les quantités molaires $n_i(t + \Delta t)$.
2. **Pressions partielles** : déduire $p_{\text{H}_2}(t + \Delta t)$ et $p_{\text{O}_2}(t + \Delta t)$ par la loi des gaz parfaits (2.41).
3. **Modèle électrochimique** : calculer E_{rev} , les surtensions et $E_{\text{cell}}(t)$ à partir de $I(t)$, $T_{\text{stack}}(t)$, p_{H_2} et p_{O_2} .
4. **Modèle thermique** : calculer $\dot{Q}_{\text{net}}(t)$ à partir de $E_{\text{cell}}(t)$, $V_{\text{th}}(t)$ et des débits sortants, puis mettre à jour $T_{\text{stack}}(t + \Delta t)$ par intégration de (2.14).

Les sous-modèles s'évaluent successivement dans un ordre fixe, en utilisant les états du pas de temps précédent pour les grandeurs partagées. Cette approche est stable et suffisamment précise pour les dynamiques lentes du système thermique ($\tau_{\text{th}} \sim$ quelques minutes), mais introduit une erreur d'ordre Δt sur les grandeurs électriques, dont la

dynamique propre est quasi instantanée par rapport à l'échelle de temps de la simulation. Le choix du pas de temps Δt résulte donc d'un compromis entre la précision du couplage électrochimique et le coût de calcul de la simulation système complète.

2.2.4.3 Schéma synthétique du couplage

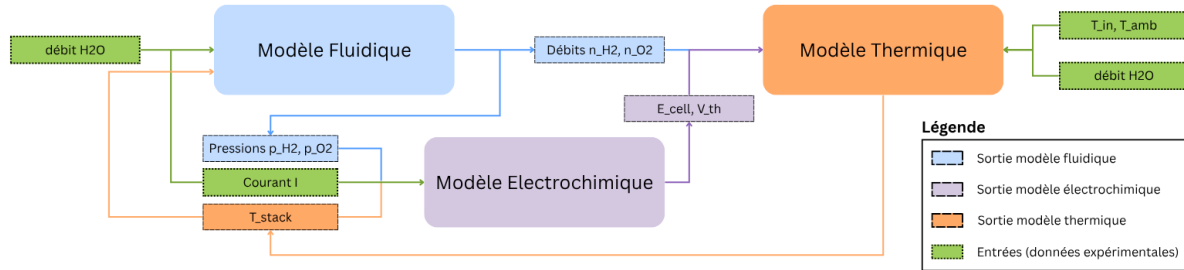


FIGURE 2.6 – Structure du couplage électro-thermo-fluidique du stack PEM.

La figure 2.6 reprend la structure illustrée dans le schéma fonctionnel global (figure 2.2), en détaillant uniquement les échanges internes au stack. On y distingue les deux seules variables d'état dynamiques propres au stack (T_{stack} et les n_i) qui concentrent toute l'inertie du système. Les grandeurs électriques (E_{cell} , ΔV) s'adaptent instantanément à toute variation de courant, confirmant que la dynamique du stack est d'origine *thermique* et *fluidique*, non électrique.

Cette observation a une implication directe pour la stratégie de contrôle présentée en section 1.4 : les régulateurs PI de température et de pression agissent sur les deux seules dynamiques lentes du système, tandis que la régulation du courant peut être traitée comme quasi-statique.

2.3. Modèle des auxiliaires (BoP)

2.3.1 Modèle du réservoir d'eau déionisée

Le réservoir d'eau déionisée assure la disponibilité continue en eau d'alimentation pour le stack PEM. Il reçoit deux flux entrants : un appoint d'eau fraîche externe $\dot{m}_{\text{feed}}$, activé par la logique de remplissage ON/OFF du système de contrôle, et le flux de recirculation liquide $\dot{m}_{\text{rec,liq}}$ provenant du séparateur $\text{O}_2/\text{H}_2\text{O}$, qui retourne l'eau non consommée côté anodique. En sortie, la pompe d'alimentation soutire le débit $\dot{m}_{\text{H}_2\text{O,out}}$ nécessaire au stack. Des bilans dynamiques de masse et d'énergie sont résolus pour calculer en temps réel le niveau d'eau et la température du réservoir, deux grandeurs surveillées par le système de contrôle. Ce modèles se base sur les hypothèses simplificatrices suivantes :

Hypothèses simplificatrices

- H1** La température est supposée uniforme dans tout le volume du réservoir (mélange parfait).
- H2** Les échanges thermiques avec l'extérieur sont modélisés par une résistance thermique globale R_{tank} , regroupant conduction à travers les parois et convection naturelle en surface.
- H3** Le terme d'accumulation d'énergie est limité à la chaleur sensible de l'eau contenue dans le réservoir. La chaleur stockée dans les parois métalliques est négligée devant celle de la masse d'eau, ce qui est acceptable pour les réservoirs de volume suffisant en régime dynamique lent.
- H4** La masse volumique $\rho_{\text{H}_2\text{O}}$ est supposée constante dans le bilan de masse, conformément à l'hypothèse globale.

2.3.1.1 Bilan de masse dynamique

Le bilan de masse sur la phase liquide du réservoir traduit la conservation de la masse d'eau entre les flux entrants et le soutirage vers la pompe [3] :

$$\frac{dm_{\text{tank}}}{dt} = \dot{m}_{\text{in}} - \dot{m}_{\text{out}} = \dot{m}_{\text{feed}} + \dot{m}_{\text{rec,liq}} - \dot{m}_{\text{H}_2\text{O,out}} \quad (2.46)$$

Le terme $\dot{m}_{\text{feed}}$ est le débit d'appoint en eau fraîche externe, activé par la logique ON/OFF dès que le niveau descend sous un seuil minimal (section 1.4). Le terme $\dot{m}_{\text{rec,liq}}$ est le débit de recirculation liquide issu du séparateur $\text{O}_2/\text{H}_2\text{O}$, dont la température est proche de T_{stack} . Le terme $\dot{m}_{\text{H}_2\text{O,out}}$ est le débit soutiré par la pompe d'alimentation, déterminé par la consigne de débit vers le stack.

L'évolution du niveau d'eau L dans le réservoir, variable directement mesurable et utilisée comme grandeur de contrôle, est déduite du bilan de masse par :

$$\frac{dL}{dt} = \frac{4}{\rho_{\text{H}_2\text{O}} \pi D^2} \frac{dm_{\text{tank}}}{dt} \quad (2.47)$$

où D est le diamètre intérieur du réservoir cylindrique. Le signe de dL/dt définit l'état instantané du réservoir [3] :

$$\frac{dL}{dt} \begin{cases} > 0 & \Rightarrow \text{remplissage} \\ = 0 & \Rightarrow \text{écoulement stationnaire} \\ < 0 & \Rightarrow \text{vidange} \end{cases} \quad (2.48)$$

En pratique, le régulateur ON/OFF maintient L dans une plage $[L_{\text{min}}; L_{\text{max}}]$, évitant à la fois l'assèchement et le débordement.

2.3.1.2 Bilan d'énergie dynamique

Sous les hypothèses de mélange parfait et de capacité thermique des parois négligée, le bilan enthalpique du réservoir se réduit à l'accumulation de chaleur sensible de l'eau, équilibrée par les flux advectifs entrants et les pertes convectives vers l'environnement [5] :

$$m_{\text{tank}} c_p \frac{dT_{\text{tank}}}{dt} = \dot{Q}_{\text{feed}} + \dot{Q}_{\text{rec}} - \dot{Q}_{\text{ext}} \quad (2.49)$$

Chacun des trois termes du membre droit est détaillé ci-après.

Flux thermique de l'appoint d'eau fraîche. L'eau d'appoint entre à la température T_{feed} , supposée égale à la température du réservoir T_{tank} dans les conditions nominales — l'appoint étant préalablement équilibré thermiquement avec le réservoir avant introduction. Le flux advectif correspondant est :

$$\dot{Q}_{\text{feed}} = \dot{m}_{\text{feed}} c_p (T_{\text{feed}} - T_{\text{tank}}) \quad \text{avec } T_{\text{feed}} = T_{\text{tank}} \quad (2.50)$$

En pratique, cette hypothèse implique que l'appoint d'eau fraîche ne contribue pas au bilan thermique tant que sa température est identique à celle du réservoir. Elle constitue une borne conservative : si l'eau d'appoint était plus froide, elle refroidirait légèrement le réservoir, tendance non capturée ici.

Flux thermique de la recirculation anodique. Le flux de recirculation $\dot{m}_{\text{rec,liq}}$ retourne au réservoir à la température du stack T_{stack} , qui est supérieure à T_{tank} en régime nominal. Ce flux constitue donc une source de chaleur pour le réservoir, qui tend à l'élever progressivement en température si aucun refroidissement actif n'est mis en œuvre :

$$\dot{Q}_{\text{rec}} = \dot{m}_{\text{rec,liq}} c_p (T_{\text{recirc}} - T_{\text{tank}}) \quad \text{avec } T_{\text{recirc}} = T_{\text{stack}} \quad (2.51)$$

C'est précisément ce couplage thermique entre le stack et le réservoir (via la recirculation) qui justifie la présence de l'échangeur de chaleur en amont du stack : sans lui, la température de l'eau d'alimentation dériverait vers T_{stack} , réduisant la capacité de refroidissement du circuit hydraulique.

Pertes thermiques vers l'environnement. Les pertes convectives vers l'ambiance sont modélisées par analogie électro-thermique :

$$\dot{Q}_{\text{ext}} = R_{\text{tank}} (T_{\text{tank}} - T_{\text{amb}}) \quad (2.52)$$

où R_{tank} est la conductance thermique globale entre le réservoir et l'air ambiant. Ce paramètre est identifié expérimentalement à partir du refroidissement naturel du réservoir à l'arrêt.

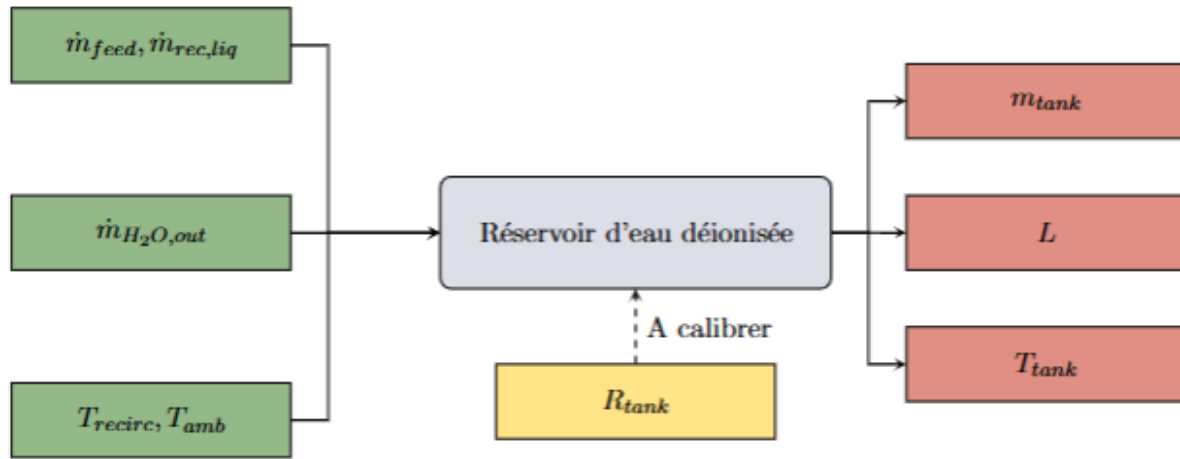


FIGURE 2.7 – Schéma bloc du modèle du réservoir d'eau déionisée

2.3.1.3 Récapitulatif du modèle

Le modèle du réservoir d'eau déionisée est de nature **différentielle** : ses deux états dynamiques sont la masse d'eau m_{tank} (ou de manière équivalente le niveau L) et la température T_{tank} , intégrées respectivement par les équations (2.46) et (2.49). Il est couplé au reste du système par trois interfaces :

- en **entrée thermique** : T_{stack} via le flux de recirculation $\dot{Q}_{\text{rec}}$, qui fait du réservoir un accumulateur thermique passif reflétant l'état du stack ;
- en **sortie hydraulique** : T_{tank} et $\dot{m}_{\text{H}_2\text{O,out}}$ vers la pompe d'alimentation, puis vers l'échangeur de chaleur ;
- en **boucle de contrôle** : le niveau L est la variable mesurée par le régulateur ON/OFF de remplissage.

TABLE 2.5 – Variables et paramètres du modèle du réservoir d'eau déionisée.

Catégorie	Symbole	Unité
Entrées	$\dot{m}_{\text{feed}}$	kg/s
	$\dot{m}_{\text{rec,liq}}$	kg/s
	$\dot{m}_{\text{H}_2\text{O,out}}$	kg/s
	$T_{\text{stack}}, T_{\text{amb}}$	K
Sorties	m_{tank}	kg
	L	m
	T_{tank}	K
Paramètres à calibrer	R_{tank}	W/K
	D	m

2.3.2 Modèle de la pompe d'alimentation en eau

La pompe d'alimentation assure le transfert de l'eau déionisée depuis le réservoir vers le stack PEM. Elle impose le débit volumique $\dot{V}_{\text{H}_2\text{O}}$ nécessaire à l'alimentation anodique, en élevant la pression de l'eau de la pression du réservoir P_{in} à la contre-pression anodique P_{out} . Le modèle retenu est un modèle **stationnaire** : les conditions en sortie de pompe (pression, température et puissance électrique absorbée) sont calculées algébriquement à partir des conditions d'entrée et du débit demandé, sous hypothèse de rendements isentropique et mécanique constants. Cette approche est justifiée par la dynamique très rapide de la pompe devant les constantes de temps thermiques et fluidiques du système, qui rend toute description transitoire du moteur sans effet observable sur le comportement global du banc d'essais.

Hypothèses simplificatrices

- H1** La pompe est supposée atteindre instantanément son point de fonctionnement à chaque pas de temps. La dynamique propre du moteur est négligée devant les constantes de temps des sous-modèles voisins.
- H2** Le rendement isentropique η_{is} et le rendement mécanique η_{mec} sont supposés constants sur la plage de fonctionnement considérée. Cette hypothèse est acceptable pour une pompe opérant autour de son point nominal, où les courbes de rendement sont relativement plates.
- H3** Le travail isentropique est formulé à partir de la différence de pression et non d'un rapport de volumes (fluide incompressible), ce qui distingue ce modèle des formulations compressibles utilisées pour le compresseur (section 2.3.5).
- H4** La relation entre la hauteur manométrique H et le débit volumique $\dot{V}_{\text{H}_2\text{O}}$ est supposée linéaire, conformément à la courbe caractéristique du constructeur dans sa plage de fonctionnement nominal.

2.3.2.1 Loi de commande : relation vitesse/débit

La vitesse de rotation du moteur est directement pilotée par la consigne de débit vers le stack. La relation entre la vitesse angulaire ω et le débit volumique délivré est supposée linéaire, identifiée expérimentalement à partir des données constructeur de la pompe KNF :

$$\dot{V}_{\text{H}_2\text{O}} = k_0 \omega + k_1 \quad (2.53)$$

où k_0 et k_1 sont des coefficients empiriques calibrés sur les données du banc PIELIZ. Cette relation constitue le bloc de commande de la pompe : à partir d'un débit cible imposé

par le régulateur de température du stack, elle fournit la consigne de vitesse angulaire ω .

2.3.2.2 Différence de pression : courbe H-Q

La pression différentielle fournie par la pompe est reliée à la hauteur manométrique H par :

$$\Delta P = P_{\text{out}} - P_{\text{in}} = \rho_{\text{H}_2\text{O}} g H \quad (2.54)$$

La hauteur manométrique H est elle-même donnée par la courbe caractéristique H-Q du constructeur, supposée linéaire dans la plage de fonctionnement :

$$H = k_2 \dot{V}_{\text{H}_2\text{O}} + k_3 \quad (2.55)$$

Les coefficients k_2 et k_3 sont identifiés à partir du datasheet de la pompe. La combinaison des équations (2.54) et (2.55) fournit directement la pression de refoulement P_{out} en fonction du débit imposé, sans qu'il soit nécessaire de résoudre l'équation du mouvement du rotor.

2.3.2.3 Elévation de température en sortie de pompe

La compression isentropique d'un fluide incompressible se traduit par une légère élévation de température entre l'entrée et la sortie de la pompe. Cette élévation est calculée à partir du travail isentropique massique w_{is} et du rendement isentropique η_{is} :

$$\Delta T = T_{\text{out}} - T_{\text{in}} = \frac{w_{\text{is}}}{c_p} \left(\frac{1}{\eta_{\text{is}}} - 1 \right) \quad (2.56)$$

Le travail isentropique massique, pour un fluide incompressible, se réduit à :

$$w_{\text{is}} = \frac{\Delta P}{\rho_{\text{H}_2\text{O}}} \quad (2.57)$$

Cette formulation, issue de la thermodynamique des fluides incompressibles, diffère de la formulation isentropique compressible utilisée pour le compresseur, où le rapport de température dépend du rapport de pression élevé à la puissance $(\gamma - 1)/\gamma$. Pour l'eau liquide, la variation d'enthalpie due à la compression est entièrement convertie en échauffement visqueux dès lors que $\eta_{\text{is}} < 1$, d'où le facteur $(1/\eta_{\text{is}} - 1)$ dans l'équation (2.56). En pratique, cet échauffement est faible ($\Delta T < 1^\circ\text{C}$ dans les conditions nominales de PIELIZ) mais contribue au bilan thermique du réservoir via la recirculation.

2.3.2.4 Puissances électrique et hydraulique

La puissance électrique absorbée par le moteur de la pompe est calculée à partir de la tension d'alimentation E_{alim} et du courant moteur I_{motor} [3] :

$$P_{\text{elec}} = E_{\text{alim}} \cdot I_{\text{motor}} \quad (2.58)$$

La puissance hydraulique utile, effectivement transmise au fluide, est le produit de la différence de pression et du débit volumique [3] :

$$P_{\text{hyd}} = \Delta P \cdot \dot{V}_{\text{H}_2\text{O}} \quad (2.59)$$

Le rendement global de la pompe relie ces deux puissances et se décompose en rendements isentropique et mécanique [3] :

$$\eta_{\text{pompe}} = \frac{P_{\text{hyd}}}{P_{\text{elec}}} = \eta_{\text{is}} \cdot \eta_{\text{mec}} \quad (2.60)$$

Cette décomposition distingue les pertes irréversibles de compression (captées par η_{is}) des pertes mécaniques par frottement dans les paliers et le joint d'étanchéité (captées par η_{mec}). La puissance électrique P_{elec} contribue au bilan de puissance auxiliaire P_{aux} utilisé dans le calcul de la consommation spécifique nette du système.

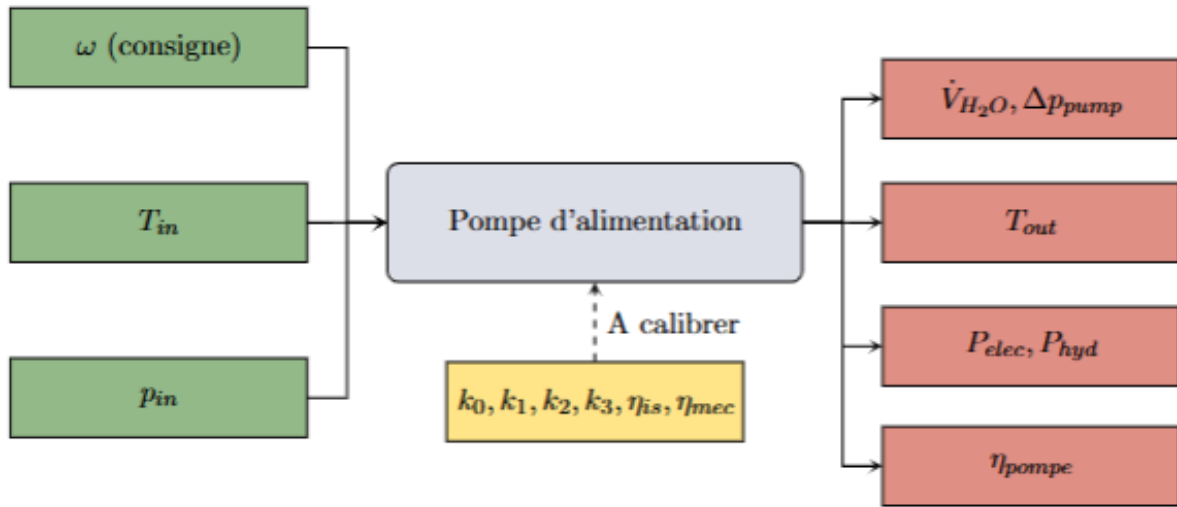


FIGURE 2.8 – Schéma bloc du modèle de la pompe d'alimentation

2.3.2.5 Récapitulatif du modèle

Le modèle de la pompe est entièrement **algébrique** : il ne contient aucune équation différentielle propre et produit ses sorties instantanément à partir des entrées courantes. Sa séquence de calcul est la suivante : le débit cible $\dot{V}_{\text{H}_2\text{O}}$ imposé par la consigne détermine la vitesse ω via (2.53), puis la pression différentielle ΔP via (2.55) et (2.54), l'échauffement ΔT via (2.56), et enfin les puissances via (2.58)–(2.60).

TABLE 2.6 – Variables et paramètres du modèle de la pompe d'alimentation.

Catégorie	Symbole	Unité
Entrées	$\dot{V}_{\text{H}_2\text{O}}$	m^3/s
	T_{in}	K
	P_{in}	Pa
Sorties	ΔP	Pa
	T_{out}	K
	$P_{\text{elec}}, P_{\text{hyd}}$	W
	η_{pompe}	—
Paramètres à calibrer	k_0, k_1	$\text{m}^3/(\text{s}\cdot\text{rad}/\text{s}), \text{m}^3/\text{s}$
	k_2, k_3	$\text{m}/(\text{m}^3/\text{s}), \text{m}$
	$\eta_{\text{is}}, \eta_{\text{mec}}$	—

2.3.3 Modèle de l'échangeur de chaleur

L'échangeur de chaleur est un refroidisseur à plaques en contre-courant intercalé entre la pompe d'alimentation et l'entrée anodique du stack. Son rôle est de ramener la température de l'eau d'alimentation (élevée par la recirculation anodique chaude) à une valeur nominale contrôlée, garantissant ainsi la capacité de refroidissement du circuit hydraulique et la stabilité thermique du stack. La méthode retenue pour la modélisation est la méthode **efficacité–NUT** (*effectiveness–Number of Transfer Units*, ε –NTU), particulièrement adaptée aux situations où les températures de sortie sont inconnues *a priori* et doivent être déterminées pour des débits et des températures d'entrée donnés. Cette approche évite les itérations fastidieuses inhérentes à la méthode de la différence de température logarithmique moyenne (LMTD), tout en conservant une formulation algébrique compacte compatible avec la simulation dynamique système.

Hypothèses simplificatrices

- H1** L'échangeur est modélisé comme un dispositif en régime permanent : les débits massiques de chaque fluide sont constants et les propriétés aux entrées/sorties sont stables à chaque pas de temps. Les changements d'énergie cinétique et potentielle des fluides sont négligeables.
- H2** L'échangeur est à plaques, de structure modulaire : il est assimilé à une séquence de sous-unités identiques, avec distribution uniforme des fluides entre les canaux. La configuration retenue est le contre-courant, qui maximise la différence de température motrice et donc l'efficacité thermique.
- H3** Les capacités thermiques massiques $c_{p,i}$ et les coefficients de transfert thermique global U sont supposés constants sur la plage de fonctionnement. Cette hypothèse est acceptable dans la plage de température de fonctionnement de (40–60°C).
- H4** La conduction thermique le long de la direction d'écoulement est négligée, de même que la résistance thermique des plaques et les pertes vers l'environnement extérieur. Ces simplifications évitent des itérations spatiales complexes qui pénaliseraient la vitesse de simulation sans apport significatif de précision à l'échelle système.
- H5** Le volume de fluide contenu dans les canaux est supposé négligeable devant le volume des composants principaux du système. Seule la dynamique thermique liée à la capacité calorifique des matériaux de l'échangeur est conservée.

2.3.3.1 Efficacité de l'échangeur en contre-courant

La méthode ε -NTU repose sur la définition d'un paramètre sans dimension, l'**efficacité** ε , définie comme le rapport entre le taux de transfert de chaleur réel et le taux maximal théoriquement atteignable :

$$\varepsilon = \frac{\dot{Q}}{\dot{Q}_{\max}} \quad (2.61)$$

Pour une configuration en contre-courant, l'efficacité s'exprime analytiquement en fonction du nombre d'unités de transfert NTU et du rapport de capacités thermiques c [7] :

$$\varepsilon = \frac{1 - \exp(-NTU(1 - c))}{1 - c \cdot \exp(-NTU(1 - c))} \quad (2.62)$$

avec :

$$c = \frac{C_{\min}}{C_{\max}} \quad \text{NTU} = \frac{U A_s}{C_{\min}} \quad (2.63)$$

Le rapport $c \in [0; 1]$ compare les capacités thermiques des deux fluides : lorsque $c \rightarrow 0$, l'un des fluides a une capacité thermique très supérieure à l'autre (typiquement un fluide de refroidissement à grand débit) et l'efficacité tend vers $1 - e^{-\text{NTU}}$. Le nombre NTU caractérise la taille thermique de l'échangeur : un NTU élevé signifie une grande surface d'échange A_s ou un coefficient de transfert global U important, tous deux favorables à l'efficacité.

2.3.3.2 Taux de transfert de chaleur réel et maximal

Le taux de transfert de chaleur maximal théorique correspond au cas limite où le fluide de capacité minimale atteindrait la température d'entrée du fluide chaud ou inversement. Il est borné par le fluide dont la capacité thermique est la plus faible, car c'est lui qui épuiserait en premier son potentiel d'échange [7] :

$$\dot{Q}_{\max} = C_{\min} (T_{h,\text{in}} - T_{c,\text{in}}) \quad (2.64)$$

où $T_{h,\text{in}}$ et $T_{c,\text{in}}$ sont les températures d'entrée du fluide chaud (eau d'alimentation issue de la pompe) et du fluide froid (fluide de refroidissement) respectivement. Le taux de transfert réel est alors directement déduit de l'efficacité [7] :

$$\dot{Q} = \varepsilon \cdot \dot{Q}_{\max} = C_c (T_{c,\text{out}} - T_{c,\text{in}}) = C_h (T_{h,\text{in}} - T_{h,\text{out}}) \quad (2.65)$$

Cette double égalité exprime la conservation de l'énergie : la chaleur cédée par le fluide chaud est intégralement absorbée par le fluide froid, sans pertes vers l'extérieur. Elle permet de calculer simultanément les deux températures de sortie $T_{h,\text{out}}$ et $T_{c,\text{out}}$ sans itération, ce qui est l'avantage central de la méthode ε -NTU.

2.3.3.3 Capacités thermiques des fluides

Les capacités thermiques massiques des deux fluides sont définies par [7] :

$$C_i = c_{p,i} \dot{m}_i \quad i \in \{h, c\} \quad (2.66)$$

avec $C_{\min} = \min(C_h, C_c)$ et $C_{\max} = \max(C_h, C_c)$. Dans la configuration de PIELIZ, le fluide chaud est l'eau d'alimentation issue de la pompe (débit $\dot{m}_h$ contrôlé par la pompe) et le fluide froid est l'eau du circuit de refroidissement externe (débit $\dot{m}_c$ piloté par le régulateur PI de température, section 1.4). Selon les débits respectifs et les capacités calorifiques, le fluide minimisant C_i peut changer de rôle en cours de simulation, ce que la formulation ε -NTU gère naturellement via le calcul de $C_{\min}$.

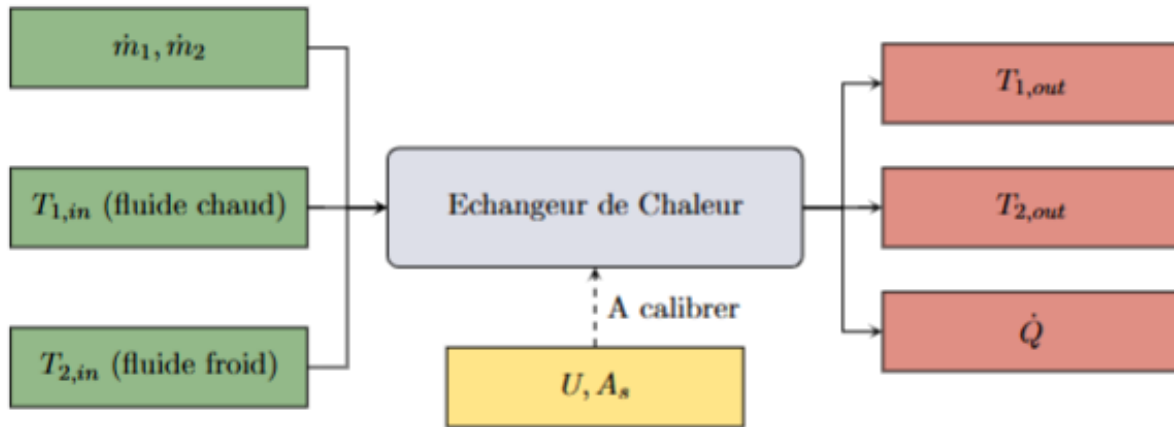


FIGURE 2.9 – Schéma bloc du modèle de l'échangeur de chaleur

2.3.3.4 Récapitulatif du modèle

Le modèle de l'échangeur de chaleur est entièrement **algébrique** : à partir des débits massiques et des températures d'entrée des deux fluides, la séquence de calcul est la suivante. Les capacités thermiques C_h et C_c sont évaluées par (2.66), puis $C_{\min}$, c et NTU par (2.63), l'efficacité ε par (2.62), le flux maximal $\dot{Q}_{\max}$ par (2.64), le flux réel $\dot{Q}$ et les températures de sortie par (2.65). Aucune équation différentielle n'est résolue : la dynamique thermique de l'échangeur est supposée négligeable devant celle du stack et du réservoir.

La température de sortie du fluide chaud $T_{h,out}$ constitue la température d'entrée de l'eau dans le stack T_{elc}^{in} , qui intervient dans le terme de refroidissement $\dot{Q}_{cool}$ du bilan thermique du stack (2.20). Ce lien assure la cohérence thermique entre le circuit hydraulique auxiliaire et le stack PEM.

TABLE 2.7 – Variables et paramètres du modèle de l'échangeur de chaleur.

Catégorie	Symbole	Description	Unité
Entrées	$\dot{m}_h$	kg/s	
	$\dot{m}_c$	kg/s	
	$T_{h,\text{in}}$	K	
	$T_{c,\text{in}}$	K	
Sorties	ε	—	
	NTU	—	
	$\dot{Q}, \dot{Q}_{\text{max}}$	W	
	$T_{h,\text{out}}$	K	
	$T_{c,\text{out}}$	K	
Paramètres à calibrer	U	W/(m ² ·K)	
	A_s	m ²	

2.3.4 Modèle du séparateur H₂/H₂O

Le séparateur H₂/H₂O est un réservoir dans lequel le mélange gazeux issu de la cheminée cathodique du stack s'accumule et se refroidit progressivement. Sous l'effet de ce refroidissement, la vapeur d'eau se condense et se sépare par gravité de la phase gazeuse, permettant d'évacuer l'hydrogène sec en tête de réservoir et l'eau liquide en fond. Des bilans dynamiques de masse et d'énergie sont résolus pour calculer en temps réel la masse accumulée, la température interne et les débits sortants du séparateur.

Hypothèses simplificatrices

- H1** L'équilibre thermodynamique entre la phase vapeur et la phase liquide est supposé toujours satisfait dans le réservoir. La phase vapeur est un mélange d'hydrogène et de vapeur d'eau en conditions saturées.
- H2** La solubilité de l'hydrogène dans la phase liquide est supposée négligeable, de sorte que la phase liquide est assimilée à de l'eau pure.
- H3** La température est supposée uniforme dans tout le volume du séparateur. Cette hypothèse de mélange parfait est cohérente avec la faible taille des séparateurs du banc d'essais et avec la turbulence induite par le flux entrant depuis la cheminée cathodique.
- H4** Les échanges thermiques avec l'environnement extérieur sont modélisés par une résistance thermique globale, via un coefficient d'échange convectif h_{ext} et une surface externe A_{ext} . Un refroidissement additionnel par un fluide caloporteur peut également être pris en compte via la résistance R_{sep} .
- H5** Le terme d'accumulation d'énergie est limité à la chaleur sensible de l'eau liquide contenue dans le séparateur. La chaleur stockée dans les parois métalliques est négligée, conformément à l'hypothèse retenue pour le réservoir d'eau déionisée.

2.3.4.1 Bilan de masse dynamique

Le bilan de masse global sur le séparateur traduit l'accumulation nette entre le flux entrant depuis le stack et les deux flux sortants, l'hydrogène gazeux est évacué en tête et l'eau liquide purgée en fond [1] :

$$\frac{dm_{\text{sep}}}{dt} = \dot{m}_{\text{in}} - \dot{m}_{\text{liq,out}} - \dot{m}_{\text{gas,out}} \quad (2.67)$$

La masse accumulée m_{sep} constitue l'état dynamique du modèle. Son évolution détermine le niveau d'eau dans le séparateur, variable surveillée par la logique de contrôle ON/OFF de purge : lorsque m_{sep} dépasse un seuil maximal $m_{\text{acc,max}}$, la vanne de purge s'ouvre pour évacuer l'eau accumulée et prévenir l'inondation du séparateur ; lorsqu'elle descend sous un seuil minimal, la vanne se referme pour éviter l'assèchement.

Le débit entrant est la somme des débits massiques d'hydrogène et de vapeur d'eau issus de la cheminée cathodique :

$$\dot{m}_{\text{in}} = \dot{m}_{\text{H}_2,\text{in}} + \dot{m}_{\text{H}_2\text{O},\text{in}} \quad (2.68)$$

Ces deux débits sont directement issus des sorties du modèle fluide du stack

(débits molaires cathodiques convertis en débits massiques), ce qui assure la cohérence massique entre le stack et le séparateur.

2.3.4.2 Bilan d'énergie dynamique

Sous les hypothèses de mélange parfait et de capacité thermique des parois négligée, le bilan enthalpique du séparateur est gouverné par l'accumulation de chaleur sensible de l'eau liquide, équilibrée par les flux convectifs entrants et les pertes thermiques [1] :

$$C_v \frac{dT_{\text{sep}}}{dt} = \dot{Q}_{\text{in}} - \dot{Q}_{\text{amb}} - \dot{Q}_{\text{cool}} \quad (2.69)$$

La capacité thermique effective du séparateur est limitée à la chaleur sensible de l'eau liquide accumulée :

$$C_v = \rho_{\text{H}_2\text{O}} c_{p,\text{H}_2\text{O}} V_L \quad (2.70)$$

où V_L est le volume de liquide présent dans le séparateur à l'instant considéré. Ce terme évolue donc au cours de la simulation en fonction de m_{sep} , introduisant un couplage entre le bilan de masse (2.67) et le bilan d'énergie (2.69).

Les trois termes thermiques du membre droit sont définis comme suit.

Flux thermique entrant. Le mélange $\text{H}_2/\text{H}_2\text{O}$ entrant depuis la cheminée cathodique apporte de l'énergie sensible à la température d'entrée T_{in} , supposée égale à T_{stack} en sortie du stack :

$$\dot{Q}_{\text{in}} = (\dot{m}_{\text{H}_2,\text{in}} c_{p,\text{H}_2} + \dot{m}_{\text{H}_2\text{O},\text{in}} c_{p,\text{H}_2\text{O}}) (T_{\text{in}} - T_{\text{sep}}) \quad (2.71)$$

Ce terme est positif tant que $T_{\text{in}} > T_{\text{sep}}$, c'est-à-dire tant que le mélange entrant est plus chaud que le contenu du séparateur, ce qui est le cas nominal. Il décroît à mesure que le séparateur se réchauffe, traduisant la régulation naturelle du système vers un équilibre thermique.

Pertes thermiques vers l'environnement. Les pertes convectives vers l'air ambiant sont modélisées par analogie électro-thermique, avec un coefficient d'échange convectif externe h_{ext} sur la surface externe A_{ext} du séparateur :

$$\dot{Q}_{\text{amb}} = h_{\text{ext}} A_{\text{ext}} (T_{\text{sep}} - T_{\text{amb}}) \quad (2.72)$$

Ce terme est proportionnel à l'écart de température entre le séparateur et l'ambiante T_{amb} . Le produit $h_{\text{ext}} A_{\text{ext}}$ est un paramètre empirique identifié expérimentalement, représentant la conductance thermique globale entre le séparateur et son environnement.

Refroidissement actif. Un refroidissement additionnel par fluide caloporteur, piloté par la résistance thermique R_{sep} , permet d'accélérer la condensation de la vapeur d'eau et donc la séparation des phases :

$$\dot{Q}_{cool} = R_{sep} (T_{sep} - T_{cool}) \quad (2.73)$$

où T_{cool} est la température du fluide de refroidissement. Ce terme est activé lorsque la température du séparateur dépasse une consigne de condensation, assurant une séparation efficace de la vapeur d'eau même à charge élevée du stack.

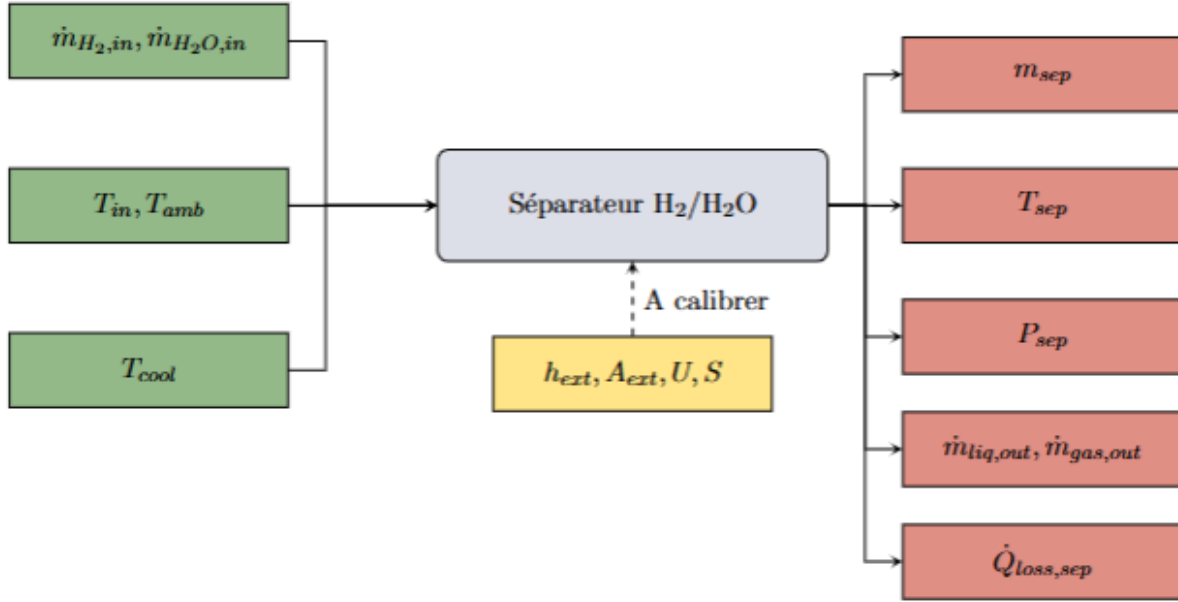


FIGURE 2.10 – Schéma bloc du modèle du séparateur H₂/H₂O

2.3.4.3 Récapitulatif du modèle

Le modèle du séparateur est de nature **différentielle** : ses deux états dynamiques sont la masse accumulée m_{sep} et la température interne T_{sep} , intégrées respectivement par les équations (2.67) et (2.69). Il est couplé au reste du système par trois interfaces :

- en **entrée** : les débits et températures issus du modèle fluidique du stack ($\dot{m}_{H_2,in}$, $\dot{m}_{H_2O,in}$, T_{stack}) ;
- en **sortie gazeuse** : le débit d'hydrogène $\dot{m}_{gas,out}$ vers le compresseur, à la pression p_{H_2} et à la température T_{sep} ;
- en **boucle de contrôle** : la masse accumulée m_{sep} est la variable surveillée par la logique ON/OFF de purge, et la pression cathodique p_{H_2} est régulée par le régulateur PI de contre-pression (section 1.4).

2.3.5 Modèle du compresseur

Le compresseur reçoit l'hydrogène sec issu du séparateur H₂/H₂O et l'élève de la pression de refoulement du séparateur p_{in} à la pression nominale du réservoir de stockage p_{out} . Il constitue le dernier maillon actif de la chaîne de conditionnement du gaz avant le stockage. Le modèle retenu est un modèle **isentropique stationnaire** : la compression est supposée adiabatique et réversible dans un premier temps, puis corrigée par les rendements

TABLE 2.8 – Variables et paramètres du modèle du séparateur H_2/H_2O .

Catégorie	Symbole	Unité
Entrées	$\dot{m}_{H_2,in}$	kg/s
	$\dot{m}_{H_2O,in}$	kg/s
	$\dot{m}_{gas,out}$	kg/s
	$\dot{m}_{liq,out}$	kg/s
	T_{amb}, T_{cool}	K
Sorties	m_{sep}	kg
	T_{sep}	K
	$\dot{Q}_{amb}$	W
Paramètres à calibrer	$h_{ext} A_{ext}$	W/K
	R_{sep}	W/K

isentropique η_{is} et mécanique η_{mec} pour tenir compte des irréversibilités réelles. Cette approche, classique en thermodynamique des turbomachines, fournit une estimation fiable de la puissance de compression et de l'échauffement du gaz sans résoudre l'écoulement interne du compresseur.

Hypothèses simplificatrices

- H1** Le compresseur est modélisé comme un dispositif en régime permanent : le débit massique d'hydrogène est identique en entrée et en sortie, $\dot{m}_{H_2,in} = \dot{m}_{H_2,out}$. La dynamique propre du compresseur est négligée devant les constantes de temps du séparateur et du réservoir de stockage.
- H2** Le processus de compression est d'abord modélisé comme isentropique (adiabatique et réversible), puis les irréversibilités sont prises en compte via les rendements η_{is} et η_{mec} , supposés constants sur la plage de fonctionnement.
- H3** L'hydrogène est traité comme un gaz parfait de coefficient isentropique $\gamma = c_p/c_v \approx 1,4$. Cette hypothèse est valide dans la plage de pression et de température du banc d'essais ($p_{out} \leq 32$ bar, $T_{in} \approx T_{sep}$), où le facteur de compressibilité de H_2 reste proche de l'unité.
- H4** Les rendements isentropique η_{is} et mécanique η_{mec} sont supposés constants. Cette hypothèse distingue le modèle compresseur du modèle pompe : pour l'eau incompressible, le travail isentropique se réduisait à $\Delta P/\rho$; ici, pour un gaz compressible, il dépend du rapport de pression et de γ .

2.3.5.1 Puissance de compression

La puissance mécanique requise par le compresseur est le produit du débit massique d'hydrogène par le travail de compression réel massique w_{rel} [14] :

$$P_{\text{comp}} = \dot{m}_{\text{H}_2, \text{in}} w_{\text{rel}} \quad (2.74)$$

avec $\dot{m}_{\text{H}_2, \text{in}} = \dot{m}_{\text{H}_2, \text{out}}$ en régime stationnaire. Cette puissance contribue au bilan de puissance auxiliaire P_{aux} du système, utilisé dans le calcul de la consommation spécifique nette.

2.3.5.2 Travail de compression isentropique et réel

Pour un gaz parfait de coefficient isentropique γ , le travail isentropique massique est donné par la relation thermodynamique issue de l'intégration de l'équation d'état le long d'une isentropique [14] :

$$w_{\text{is}} = \frac{\gamma}{\gamma - 1} r T_{\text{in}} \left[\left(\frac{p_{\text{out}}}{p_{\text{in}}} \right)^{\frac{\gamma-1}{\gamma}} - 1 \right] \quad (2.75)$$

où $r = R_u/M_{\text{H}_2}$ est la constante spécifique de l'hydrogène, T_{in} sa température d'entrée et $p_{\text{in}}/p_{\text{out}}$ les pressions d'entrée et de sortie. Le terme entre crochets traduit l'effet du rapport de compression sur l'énergie requise : plus p_{out} est élevée par rapport à p_{in} , plus le travail isentropique est important. Cette dépendance en loi de puissance, caractéristique des gaz compressibles, contraste avec le modèle de pompe incompressible où $w_{\text{is}} = \Delta P/\rho$ ne dépend que linéairement de la différence de pression.

Le travail réel tient compte des irréversibilités internes au compresseur via les rendements isentropique et mécanique :

$$w_{\text{rel}} = \frac{w_{\text{is}}}{\eta_{\text{is}} \eta_{\text{mec}}} \quad (2.76)$$

Le rendement isentropique η_{is} capture les irréversibilités thermodynamiques internes — frottements visqueux, recirculations, chocs — tandis que le rendement mécanique η_{mec} rend compte des pertes par frottement dans les paliers et les joints. Leur produit $\eta_{\text{is}} \eta_{\text{mec}}$ constitue le rendement global de compression, qui détermine l'écart entre la puissance idéale et la puissance électrique effectivement consommée.

2.3.5.3 Rapport de compression

Le rapport de compression r_c caractérise le niveau d'élévation de pression réalisé par le compresseur [14] :

$$r_c = \frac{p_{\text{out}}}{p_{\text{in}}} \quad (2.77)$$

Dans la configuration de PIELIZ, p_{in} est la pression de refoulement du séparateur $\text{H}_2/\text{H}_2\text{O}$, pilotée par le régulateur PI de contre-pression cathodique, et p_{out} est la pression nominale du réservoir de stockage. Le rapport r_c n'est donc pas constant au cours d'une

simulation : il évolue avec le remplissage du réservoir et les variations de consigne de pression imposées par le système de contrôle.

2.3.5.4 Température de sortie du gaz comprimé

La loi isentropique pour un gaz parfait relie les températures et pressions en entrée et en sortie selon [14] :

$$\frac{T_{\text{out}}}{T_{\text{in}}} = \left(\frac{p_{\text{out}}}{p_{\text{in}}} \right)^{\frac{\gamma-1}{\gamma}} = \left(\frac{V_{\text{in}}}{V_{\text{out}}} \right)^{\gamma-1} \quad (2.78)$$

La température de sortie $T_{\text{out,comp}}$ est donc supérieure à la température d'entrée T_{in} : la compression adiabatique réchauffe le gaz. Cet échauffement est d'autant plus marqué que le rapport de compression r_c est élevé. Dans les conditions nominales de PIELIZ, cet effet thermique est non négligeable et doit être pris en compte pour le dimensionnement du réservoir de stockage et la vérification des contraintes de température des équipements aval.

2.3.5.5 Quantité molaire d'hydrogène comprimé

Sous l'hypothèse des gaz parfaits, le nombre de moles d'hydrogène comprimé injecté dans le réservoir de stockage est calculé à partir des conditions de sortie du compresseur par la loi des gaz parfaits [3] :

$$n_{\text{H}_2,\text{comp}} = \frac{p_{\text{out}} V_{\text{out}}}{R T_{\text{out,comp}}} \quad (2.79)$$

où V_{out} est le volume spécifique du gaz en sortie de compresseur. Ce débit molaire constitue l'entrée du modèle de réservoir de stockage, qui l'intègre dans le temps pour calculer la pression interne du réservoir (section 2.3.7).

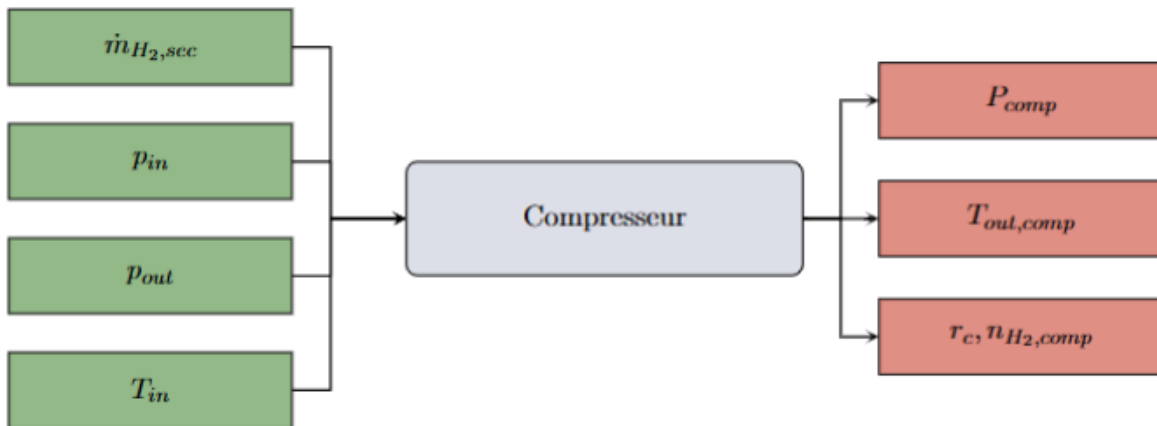


FIGURE 2.11 – Schéma bloc du modèle du compresseur

2.3.5.6 Récapitulatif du modèle

Le modèle du compresseur est entièrement **algébrique** : à partir du débit massique d'hydrogène entrant, des pressions p_{in} et p_{out} et de la température d'entrée T_{in} , la séquence de calcul est la suivante. Le rapport de compression r_c est évalué par (2.77), le travail isentropique w_{is} par (2.75), le travail réel w_{rel} par (2.76), la puissance P_{comp} par (2.74),

la température de sortie $T_{\text{out,comp}}$ par (2.78) et enfin le débit molaire injecté $n_{\text{H}_2,\text{comp}}$ par (2.79). Aucune équation différentielle n'est résolue : la dynamique du système de compression est entièrement portée par les états du séparateur amont et du réservoir aval.

TABLE 2.9 – Variables et paramètres du modèle du compresseur.

Catégorie	Symbole	Unité
Entrées	$\dot{m}_{\text{H}_2,\text{dry}}$	kg/s
	p_{in}	bar
	p_{out}	bar
	T_{in}	K
Sorties	P_{comp}	W
	$T_{\text{out,comp}}$	K
	r_c	—
	$n_{\text{H}_2,\text{comp}}$	mol/s
Paramètres fixés	η_{is}	—
	η_{mec}	—
	$\gamma = c_p/c_v$	—

2.3.6 Modèle du redresseur

Le redresseur est l'interface électrique entre le réseau alternatif et le stack PEM. Il convertit la puissance AC fournie par le réseau P_{AC} en puissance DC P_{in} adaptée à l'alimentation du stack, en abaissant et en redressant la tension pour délivrer le courant continu I imposé comme consigne au stack. Dans le contexte de l'intégration au réseau électrique — objectif central du banc PIELIZ — le redresseur constitue le point d'entrée de toute fluctuation de puissance : une variation de la consigne de courant se répercute instantanément sur P_{in} , qui pilote à son tour l'ensemble de la dynamique du système.

Le modèle retenu est un modèle **stationnaire à rendement simplifié** : le rendement du convertisseur η_{conv} est supposé constant, égal à la valeur nominale $\eta_{\text{inv}} = 93\%$ identifiée dans la littérature pour les redresseurs industriels de cette gamme de puissance. Cette approche, justifiée par la plage de fonctionnement relativement étroite de PIELIZ, évite l'identification d'une courbe de rendement variable en fonction de la charge, tout en fournissant une estimation raisonnable des pertes électriques du convertisseur.

Hypothèses simplificatrices

- H1** La dynamique propre du convertisseur (commutation des semi-conducteurs, filtrage LC) est négligeable devant les constantes de temps thermiques et fluidiques du système. Le redresseur est donc modélisé comme un bloc algébrique instantané.
- H2** Le rendement η_{conv} est supposé constant sur la plage de fonctionnement du banc d'essais. Une modélisation plus fine pourrait introduire un rendement variable selon la charge, via des coefficients de perte à vide et proportionnels.
- H3** Les pertes de câblage et de connexion entre le redresseur et le stack sont négligées.

2.3.6.1 Puissance DC délivrée au stack

La puissance DC délivrée au stack est obtenue à partir de la puissance absorbée par le stack P_{stack} et du rendement du convertisseur. Par définition du rendement, la puissance en entrée du convertisseur (puissance AC prélevée au réseau) est :

$$P_{\text{in}} = \frac{P_{\text{stack}}}{\eta_{\text{conv}}} \quad (2.80)$$

où $P_{\text{stack}} = E_{\text{stack}} \cdot I$ est la puissance électrique absorbée par le stack, calculée à partir de la tension de stack E_{stack} issue du modèle électrochimique et du courant I imposé par la consigne. Cette équation traduit le fait que le réseau doit fournir davantage que ce que le stack consomme, pour compenser les pertes internes du redresseur.

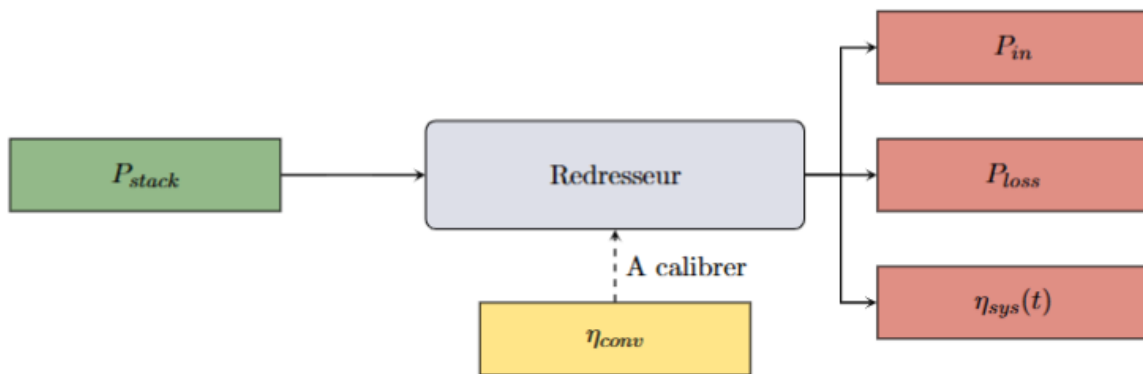


FIGURE 2.12 – Schéma bloc du modèle du redresseur

2.3.6.2 Pertes totales du convertisseur

Les pertes électriques dissipées dans le convertisseur sont la différence entre la puissance absorbée au réseau et la puissance utile délivrée au stack :

$$P_{\text{loss}} = P_{\text{in}} - P_{\text{stack}} = P_{\text{stack}} \left(\frac{1}{\eta_{\text{conv}}} - 1 \right) \quad (2.81)$$

Ce terme est directement proportionnel à la puissance du stack : plus le stack opère à charge élevée, plus les pertes absolues du convertisseur sont importantes, bien que les pertes relatives restent constantes. Ces pertes sont dissipées sous forme de chaleur dans les composants électroniques du redresseur et ne contribuent pas au bilan thermique du stack.

2.3.6.3 Rendement système instantané

Le rendement système instantané $\eta_{\text{sys}}(t)$ exprime l'efficacité globale de conversion de l'énergie électrique en hydrogène à la sortie du système. Il rapporte le pouvoir calorifique inférieur de l'hydrogène produit $\dot{m}_{\text{H}_2, \text{out}}(t) \cdot \text{LHV}_{\text{H}_2}$ à la puissance électrique totale prélevée au réseau P_{in} :

$$\eta_{\text{sys}}(t) = \frac{\dot{m}_{\text{H}_2, \text{out}}(t) \cdot \text{LHV}_{\text{H}_2}}{P_{\text{in}}} \quad (2.82)$$

avec $\text{LHV}_{\text{H}_2} = 33,3 \text{ kWh/kg}$. Ce rendement est un indicateur de performance dynamique : il varie au cours d'une simulation en fonction des conditions opératoires du stack, des pertes auxiliaires et du débit d'hydrogène produit. Il est distinct de la consommation spécifique qui intègre la puissance auxiliaire totale P_{aux} [1].

$$C_{\text{H}_2, \text{net}} \left[\frac{\text{kWh}_e}{\text{kg}_{\text{H}_2}} \right] = \frac{\left(\frac{P_{\text{in}}}{\eta_{\text{conv}}} + P_{\text{aux}} \right) [\text{kW}_e]}{\dot{m}_{\text{H}_2, \text{SysOut}} [\text{kg}_{\text{H}_2}/\text{s}] \cdot 3600 [\text{s/h}]} \quad (2.83)$$

Il convient de noter que $\eta_{\text{sys}}(t)$ est particulièrement faible en phase de démarrage, lorsque le stack monte en température et que le débit d'hydrogène est encore réduit, il atteint son maximum en régime nominal. Son suivi en temps réel constitue donc un indicateur pertinent pour la stratégie de contrôle, permettant d'identifier les phases de fonctionnement sous-optimal.

2.3.6.4 Récapitulatif du modèle

Le modèle du redresseur est entièrement **algébrique** : à partir de P_{stack} et de η_{conv} , la puissance réseau P_{in} est calculée par (2.80), les pertes P_{loss} par (2.81), et le rendement système $\eta_{\text{sys}}(t)$ par (2.82). Il constitue le premier maillon de la chaîne de calcul à chaque pas de temps : c'est lui qui traduit la consigne de puissance réseau en courant I délivré au stack, pilotant ainsi l'ensemble de la dynamique du système.

2.3.7 Modèle du réservoir de stockage d'hydrogène

Le réservoir de stockage est le composant terminal de la chaîne de production d'hydrogène. Il collecte l'hydrogène comprimé délivré par le compresseur et en calcule en temps réel la masse accumulée et la pression interne. C'est la pression du réservoir P_{storage} qui détermine la contre-pression imposée en sortie du compresseur et, par cascade, la pression de refoulement du séparateur pilotée par le régulateur PI (section 1.4). Le suivi de cette pression est donc à la fois un indicateur d'état du stockage et une variable de couplage avec la stratégie de contrôle du système.

Le modèle repose sur la **loi des gaz parfaits**, avec un facteur de compressibilité

TABLE 2.10 – Variables et paramètres du modèle du redresseur AC/DC.

Catégorie	Symbole	Unité
Entrées	P_{stack}	W
	$\dot{m}_{\text{H}_2, \text{out}}$	kg/s
Sorties	P_{in}	W
	P_{loss}	W
	$\eta_{\text{sys}}(t)$	—
Paramètres fixés	η_{conv}	—
	LHV_{H_2}	kWh/kg

$Z \approx 1$ pour l'hydrogène dans la plage de pression et de température considérée. Cette hypothèse, vérifiée pour H_2 à des pressions inférieures à 200 bar, fournit une estimation suffisamment précise de la pression interne sans recourir à une équation d'état plus complexe telle que l'équation de van der Waals ou de Peng-Robinson. Le réservoir est supposé initialement vide, et l'hydrogène produit à la pression souhaitée le remplit progressivement au cours de la simulation.

Hypothèses simplificatrices

- H1** L'hydrogène est traité comme un gaz parfait de facteur de compressibilité unitaire. Cette approximation est valide pour H_2 dans la plage de fonctionnement ($p \leq 32$ bar, $T \approx T_{\text{amb}}$), où les interactions intermoléculaires restent négligeables.
- H2** La simulation démarre avec un réservoir vide, $m_{\text{stk}}(t_0) = 0$ et $P_{\text{storage}}(t_0) = P_{\text{initial}}$. Cette condition initiale est représentative d'un démarrage à froid du banc après vidange complète du réservoir.
- H3** La température du gaz dans le réservoir T_{tube} est supposée uniforme et constante au cours du remplissage.

2.3.7.1 Bilan de masse dynamique

Le bilan de masse sur le réservoir traduit l'accumulation nette d'hydrogène entre le flux entrant depuis le compresseur $\dot{m}_{\text{in,stk}}$ et le flux sortant vers un consommateur éventuel $\dot{m}_{\text{out,stk}}$:

$$\dot{m}_{\text{stk}}(t) = \dot{m}_{\text{in,stk}}(t) - \dot{m}_{\text{out,stk}}(t) \quad (2.84)$$

La masse totale d'hydrogène présente dans le réservoir à l'instant $t_0 + \Delta t$ est obtenue par intégration temporelle du débit net :

$$m_{\text{stk}}(t_0 + \Delta t) = \int_{t_0}^{t_0 + \Delta t} \dot{m}_{\text{in,stk}}(t) dt + m_{\text{stk}}(t_0) \quad (2.85)$$

Cette intégration est réalisée numériquement dans l'environnement Matlab/Simulink par un bloc intégrateur, dont l'état initial est $m_{\text{stk}}(t_0) = 0$. La masse accumulée $m_{\text{stk}}(t)$ constitue l'état dynamique du modèle et est convertie en nombre de moles par $n_{\text{H}_2} = m_{\text{stk}}/M_{\text{H}_2}$ pour le calcul de la pression.

2.3.7.2 Pression interne du réservoir

Sous l'hypothèse des gaz parfaits avec $Z \approx 1$, la pression interne du réservoir est calculée à partir du nombre de moles accumulées n_{H_2} , de la température du gaz T_{tube} et du volume du réservoir V_{tube} [14] :

$$P_{\text{storage}} = \frac{n_{\text{H}_2} R_u T_{\text{tube}}}{V_{\text{tube}}} + P_{\text{initial}} \quad (2.86)$$

où $R_u = 8,314 \text{ J}/(\text{mol} \cdot \text{K})$ est la constante universelle des gaz et P_{initial} est la pression résiduelle dans le réservoir à $t = t_0$. L'ajout de P_{initial} permet de prendre en compte un réservoir partiellement rempli en début de simulation, cas qui se présente lors d'un redémarrage du banc après un arrêt partiel.

Le terme $n_{\text{H}_2} R_u T_{\text{tube}}/V_{\text{tube}}$ traduit directement la loi des gaz parfaits $pV = nRT$: à volume et température constants, la pression croît linéairement avec le nombre de moles accumulées. Cette linéarité est une propriété centrale du modèle : elle garantit que P_{storage} évolue de manière prévisible et monotone lors du remplissage, facilitant la conception du régulateur de pression.

La pression P_{storage} est transmise en retour vers le compresseur comme pression de refoulement p_{out} , créant ainsi une **boucle de couplage dynamique** entre le réservoir et le compresseur : à mesure que le réservoir se remplit, P_{storage} augmente, ce qui accroît le rapport de compression r_c (2.77) et donc la puissance de compression P_{comp} (2.74). Ce couplage est essentiel pour simuler fidèlement le comportement énergétique du système lors d'une campagne de remplissage prolongée.

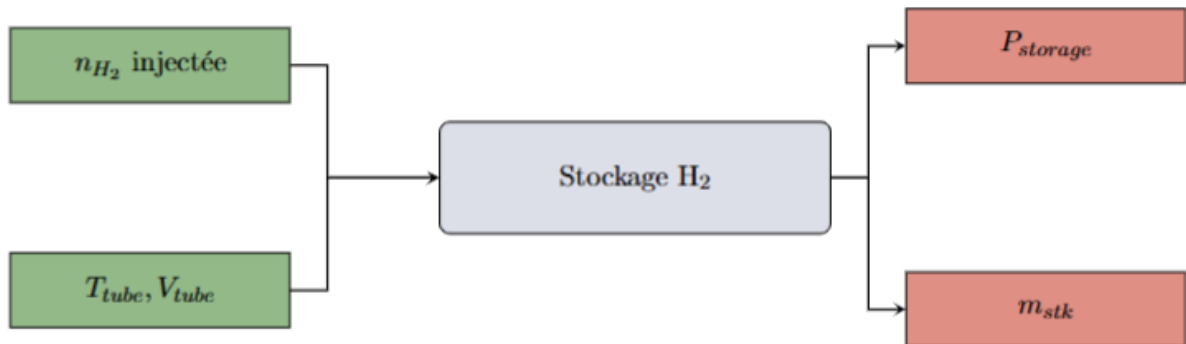


FIGURE 2.13 – Schéma bloc du modèle du réservoir de stockage H_2

2.3.7.3 Récapitulatif du modèle

Le modèle du réservoir de stockage est de nature **différentielle** : son unique état dynamique est la masse accumulée $m_{\text{stk}}(t)$, intégrée par l'équation (2.85). La pression P_{storage} en est une sortie algébrique directe via (2.86). Le modèle est couplé au reste du système par deux interfaces :

- en **entrée** : le débit massique $\dot{m}_{\text{in,stk}}$ issu du compresseur, qui dépend lui-même de la pression de sortie du séparateur et du courant du stack ;
- en **retour** : P_{storage} constitue la contre-pression de refoulement du compresseur, bouclant la chaîne de conditionnement du gaz.

TABLE 2.11 – Variables et paramètres du modèle du réservoir de stockage d'hydrogène.

Catégorie	Symbole	Unité
Entrées	$\dot{m}_{\text{in,stk}}$	kg/s
	T_{tube}	K
Sorties	$m_{\text{stk}}(t)$	kg
	P_{storage}	Pa
Paramètres fixés	V_{tube}	m ³
	R_u	J/(mol·K)
	P_{initial}	Pa

Chapitre 3

Implémentation numérique et identification paramétrique du simulateur

Le simulateur est développé en langage *Python*, sous l'environnement de développement intégré Visual Studio Code (VS Code). Ce choix repose sur trois arguments complémentaires.

3.1. Architecture modulaire du simulateur

3.1.1 Principe de modularité

L'architecture du simulateur reflète directement la décomposition en sous-modèles physiques établie. A chaque composant du système correspond une **classe Python** autonome, contenue dans un fichier source dédié. Cette approche orientée objet présente trois avantages pour un simulateur multi-physique :

- **Isolation** : la modification des équations d'un sous-modèle n'affecte pas les autres classes.
- **Testabilité** : chaque classe peut être testée indépendamment dans un notebook *Jupyter*, avant d'être intégrée dans la boucle de simulation complète ;
- **Flexibilité d'utilisation** : Plusieurs configurations du système peuvent être simulées, et ce en enlevant des composants si nécessaire pour l'adapter à la réalité.

3.1.2 Organisation des fichiers et des répertoires

L'arborescence du projet est organisée en quatre répertoires principaux, dont le rôle est décrit dans le tableau 3.1.

3.1.2.1 Arborescence complète du projet

```
1 PEM_MODEL/  
2   config/  
3     stack_parameters.yaml  
4   data/  
5     raw/
```

TABLE 3.1 – Organisation des répertoires du simulateur PIELIZ.

Répertoire	Contenu et rôle
<code>src/</code>	Code source du simulateur. Contient les classes des sous-modèles, les constantes physiques et les fonctions thermodynamiques partagées.
<code>config/</code>	Fichier de configuration regroupant l'ensemble des paramètres spécifiques du système.
<code>data/</code>	Données expérimentales brutes (<code>raw/</code>) et prétraitées (<code>processed/</code>), organisées par type de mesure (électrochimique ELC, thermique THE).
<code>notebooks/</code>	Notebooks Jupyter de validation unitaire de chaque sous-modèle et de validation du modèle couplé.

```

6      2024_06_07_Pola_40C_1L.csv
7      2024_06_07_Pola_60C_1L.csv
8      2024_06_10_Pola_50C_1L.csv
9  processed/
10     clean_data/
11         ELC/
12             Pola_data_40C.csv
13             Pola_data_50C.csv
14             Pola_data_60C.csv
15         THE/
16             Thermal_data_60C.csv
17     notebooks/
18         Pola_data_40C_preprocess.ipynb
19         Pola_data_50C_preprocess.ipynb
20         Pola_data_60C_preprocess.ipynb
21 notebooks/
22     01_electrochemistry_validation.ipynb
23     02_thermodynamics_validation.ipynb
24     03_fluidic_validation.ipynb
25     04_coupled_validation.ipynb
26     05_BoP_validation.ipynb
27 src/
28     constants.py
29     thermodynamics.py
30 stack/
31     electrochemistry.py
32     thermal.py
33     fluidic.py
34     geometry.py
35     coupled_model.py
36     identification/

```

```

37         genetic_algorithm.py
38         objective_function.py
39         parameters.py
40         parameter_bounds.py
41     BoP/
42         compressor.py
43         converter.py
44         H2_separator.py
45         heat_exchanger.py
46         pump.py
47         storage_tank.py
48         water_tank.py

```

3.1.3 Structure du répertoire source (src/)

Il constitue le cœur du simulateur, et est organisé en deux sous-modules principaux (`stack/` et `BoP/`) ainsi que deux fichiers partagés à la racine.

Fichiers partagés

- Le fichier `constants.py` regroupe l'ensemble des constantes physiques universelles utilisées par tous les sous-modèles.
- Le fichier `thermodynamics.py` implémente les fonctions thermodynamiques partagées entre les sous-modèles.

Sous-module `stack/`

Le sous-module `stack/` regroupe les quatre classes décrivant la physique interne du stack PEM, ainsi que le modèle couplé et le sous-module d'identification paramétrique. Le tableau 3.2 en décrit le contenu.

Le sous-répertoire `identification/` regroupe les outils d'identification paramétrique du stack, détaillés en section 3.3 :

- `genetic_algorithm.py` : implémentation de l'algorithme génétique utilisé pour minimiser la fonction objectif ;
- `objective_function.py` : calcul de l'écart quadratique entre la courbe de polarisation simulée et les données expérimentales ;
- `parameters.py` : définition des paramètres à identifier et de leurs valeurs initiales ;
- `parameter_bounds.py` : bornes physiques imposées aux paramètres lors de l'optimisation.

Sous-module `BoP/`

Le sous-module `BoP/` regroupe les sept classes des auxiliaires, avec une correspondance directe avec les sections du chapitre 2.3.1 à 2.3.6.

TABLE 3.2 – Classes du sous-module **stack/** et correspondance avec les équations du chapitre 3.

Fichier	Classe	Équations implémentées
<code>geometry.py</code>	<code>StackGeometry</code>	Paramètres géométriques du stack : A_{cell} , N_{cells} , δ_{mem} , volumes anodique et cathodique.
<code>electrochemistry.py</code>	<code>ElectrochemicalModel</code>	Eq. (2.2)–(2.13) : tension réversible, surtensions d’activation, ohmique, de diffusion et de bulles.
<code>thermal.py</code>	<code>ThermalModel</code>	Eq. (2.14)–(2.21) : bilan enthalpique dynamique du stack, T_{stack} état dynamique.
<code>fluidic.py</code>	<code>FluidicModel</code>	Eq. (2.23)–(2.45) : bilans de matière anode/cathode, transport membranaire, pressions partielles.
<code>coupled_model.py</code>	<code>CoupledStackModel</code>	Orchestration du couplage électro-thermo-fluidique (section 2.2.4) : appel séquentiel des trois classes selon la séquence de calcul 2.2.4.2.

3.1.4 Tests des modèles

Le répertoire `notebooks/` contient cinq notebooks Jupyter de validation, suivant une progression du sous-modèle isolé vers le système complet :

- `01_electrochemistry_validation.ipynb` Validation du modèle électrochimique par comparaison des courbes de polarisation simulées aux données expérimentales du banc PIELIZ à 40 °C, 50 °C et 60 °C.
- `02_thermodynamics_validation.ipynb` Validation du modèle thermique : comparaison de la réponse dynamique de T_{stack} aux données expérimentales lors d’échelons de courant.
- `03_fluidic_validation.ipynb` Validation du modèle fluidique : vérification des bilans de matière, des flux transmembranaires et des pressions partielles à l’état stationnaire.
- `04_coupled_validation.ipynb` Validation du modèle couplé complet du stack : simulation d’un profil de courant dynamique et comparaison aux données expérimentales.
- `05_BoP_validation.ipynb` Validation des auxiliaires : vérification du bilan de masse et d’énergie de chaque composant auxiliaire et cohérence des échanges inter-composants.

3.1.5 Bibliothèques Python utilisées

Le simulateur s’appuie sur six bibliothèques Python :

NumPy Fournit les structures de données vectorielles et matricielles ainsi que les opérations mathématiques associées. Elle est utilisée dans toutes les classes pour l’évaluation des équations algébriques et le stockage des états dynamiques.

TABLE 3.3 – Classes du sous-module BoP/ et correspondance avec les équations du chapitre 3.

Fichier	Classe	Équations implémentées
<code>water_tank.py</code>	<code>WaterTankModel</code>	Eq. (2.46)–(2.52) : bilans masse et énergie du réservoir d’eau déionisée, états dynamiques m_{tank} et T_{tank} .
<code>pump.py</code>	<code>PumpModel</code>	Eq. (2.53)–(2.60) : loi débit/vitesse, courbe H-Q, élévation de température, puissances.
<code>heat_exchanger.py</code>	<code>HeatExchangerModel</code>	Eq. (2.62)–(2.65) : méthode ε -NTU, températures de sortie des deux fluides.
<code>H2_separator.py</code>	<code>SeparatorModel</code>	Eq. (2.67)–(2.73) : bilans masse et énergie du séparateur, états dynamiques m_{sep} et T_{sep} .
<code>compressor.py</code>	<code>CompressorModel</code>	Eq. (2.74)–(2.79) : travail isentropique, puissance, température et débit de sortie.
<code>storage_tank.py</code>	<code>StorageTankModel</code>	Eq. (2.84)–(2.86) : intégration de la masse H_2 , calcul de P_{storage} .
<code>converter.py</code>	<code>ConverterModel</code>	Eq. (2.80)–(2.82) : puissance réseau, pertes du convertisseur, rendement système instantané.

SciPy Utilisée pour l'intégration numérique des équations différentielles ordinaires via `solve_ivp`, ainsi que pour les routines d'optimisation employées lors de l'identification paramétrique (section 3.3).

Matplotlib Assure la visualisation des résultats de simulation : courbes de polarisation, évolutions temporelles des états dynamiques (T_{stack} , pressions, débits) et comparaisons avec les données expérimentales.

Pandas Utilisée pour la lecture, le prétraitement et la manipulation des fichiers de données expérimentales au format `.csv` stockés dans `data/raw/` et `data/processed/`.

PyYAML Assure le chargement du fichier de configuration `stack_parameters.yaml` au démarrage du simulateur, permettant la distribution des paramètres aux classes concernées sans modification du code source.

Jupyter Fournit l'environnement interactif des notebooks de validation, permettant d'exécuter et de documenter les tests unitaires de chaque sous-modèle de manière progressive et reproductible.

3.2. Présentation du banc d'essais expérimental PIELIZ

Le banc d'essais PIELIZ est un électrolyseur PEM de puissance nominale 1 kW, implanté au laboratoire FEMTO-ST. Il constitue le support expérimental du présent travail de modélisation : les données qu'il fournit servent à la fois à l'identification des paramètres du simulateur et à la validation de ses prédictions. Cette section en présente l'architecture physique, les composants principaux et l'instrumentation disponible.



FIGURE 3.1 – Photographie du banc d'essais.

3.2.1 Stack électrolyseur

Le stack PEM **Leancat** (modèle LCWE-25) est constitué de $N_{\text{cells}} = 10$ cellules électrochimiques montées en série. Ses caractéristiques nominales sont récapitulées dans le tableau 3.4.

TABLE 3.4 – Caractéristiques nominales du stack Leancat LCWE-25.

Grandeur	Valeur	Remarque
Puissance nominale	1 kW	
Nombre de cellules	10	En série
Surface active	25 cm ²	Par cellule
Plage de courant	0–46 A	50 A en pratique au labo
Tension stack mesurée	17,8 V à 30 A	$\approx 1,78$ V/cellule
Plage de température	30–75 C	Nominale : 56 C
Pression cathodique H ₂	0–25 barg	Limite système : 12 bar
Production H ₂	jusqu'à 207 NL/h	2 NL/min à 30 A
Temps de démarrage	≈ 30 min	Montée à 56 C

Le stack ne nécessite pas de purge à l'azote avant arrêt, contrairement aux systèmes industriels de plus grande puissance : l'évacuation des canalisations s'effectue automatiquement en quelques heures. La pureté de l'hydrogène produit est actuellement estimée à 99,5 % au niveau du laboratoire, contre un objectif de 99,995 % (grade H₂ 4.5) ; l'écart est principalement attribué à la présence d'oxygène résiduel dans le flux H₂, en l'absence d'un capteur O₂ dédié à ce stade.

3.2.2 Architecture des circuits

Le banc d'essais est organisé en trois circuits fonctionnels distincts, dont le synoptique est représenté en figure 3.2.

Circuit primaire (eau de process). L'eau déionisée est soutirée du réservoir d'alimentation, filtrée par le déionisateur, mise en pression par la pompe (0,8 L/min, maximum 1 L/min), refroidie par l'échangeur de chaleur, puis injectée côté anode du stack. En sortie du stack, le mélange eau/O₂ est retourné au réservoir, où l'oxygène est évacué en tête. Il est à noter que 97 % du débit du circuit primaire sert à la régulation thermique du stack, seuls 3 % participant effectivement à la réaction d'électrolyse.

Circuit secondaire (régulation thermique). Un réservoir d'eau chaude, maintenu à 60 C par un réchauffeur électrique, alimente le côté chaud de l'échangeur de chaleur. Ce circuit assure le préchauffage de l'eau d'alimentation en phase de démarrage et la régulation de T_{stack} entre 40 et 70 C en régime nominal.

Chaîne de traitement H₂. L'hydrogène humide sortant du stack est séché par un condenseur à deux plaques à effet Peltier (face froide ≈ 4 C), ramenant l'humidité résiduelle à ≤ 1 %. Le flux H₂ sec traverse ensuite un régulateur de débit et un régulateur de pression PI (pression maximale système : 12 bar) avant d'être mis à disposition. Le banc ne dispose pas de compresseur : la pression est régulée exclusivement par l'ouverture d'une vanne.

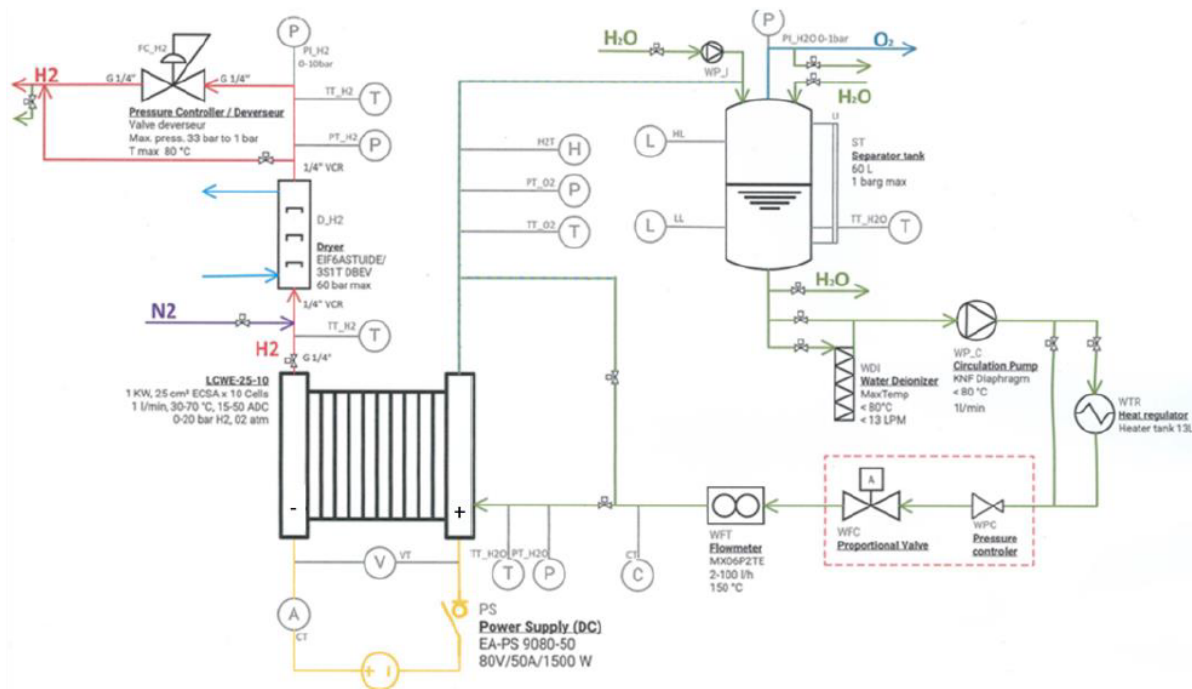


Figure 46: Synoptique du banc d'essais.

FIGURE 3.2 – Synoptic du banc d'essais PIELIZ (1 kW) [11]

3.2.3 Comportement thermique du stack

Le stack présente deux régimes thermiques distincts selon le courant appliqué, résumés dans le tableau 3.5. En dessous de 12 A, la réaction d'électrolyse est endothermique nette : le stack se refroidit spontanément. Au-delà de 12 A, les pertes par effet Joule dominant et le stack s'échauffe, nécessitant une régulation thermique active par le circuit primaire. Cette transition correspond au passage de $E_{\text{cell}} < V_{\text{th}}$ à $E_{\text{cell}} > V_{\text{th}}$, prédit par le modèle thermique (2.18).

TABLE 3.5 – Régimes thermiques du stack PIELIZ en fonction du courant appliqué.

Plage	Régime	Comportement	Mécanisme dominant
0–12 A	Faible courant	Refroidissement	Réaction endothermique
> 12 A	Nominal	Echauffement	Effet Joule (pertes ohmiques)

L'interface de contrôle-commande est assurée par un système **dSpace**, recevant les signaux des capteurs (4–20 mA convertis via une résistance de 500 Ω) et délivrant les consignes aux actionneurs.

3.2.4 Exigences sur la qualité de l'eau

La qualité de l'eau d'alimentation est un paramètre critique pour la durée de vie de la membrane Nafion : une conductivité élevée traduit la présence d'ions susceptibles de dégrader les sites d'acide sulfonique et d'accroître la surtension ohmique. Le tableau 3.6 résume les exigences et les valeurs mesurées au laboratoire.

TABLE 3.6 – Paramètres de qualité de l’eau du banc PIELIZ.

Paramètre	Valeur cible	Valeur mesurée	Conséquence si hors plage
Conductivité	$\leq 0,10 \mu\text{S}/\text{cm}$	$0,30 \mu\text{S}/\text{cm}$	Dégradation membrane
Débit	max 1 L/min	0,8 L/min	Sous-refroidissement stack
Température	40–70 C	56 C (nominal)	Endommagement stack
Pression	1 bar (circuit primaire)	max 12 bar (système)	Destruction composants

La conductivité mesurée en sortie du déionisateur ($0,30 \mu\text{S}/\text{cm}$) est actuellement trois fois supérieure à la valeur cible. Cet écart, attribué à la qualité de l’eau du réseau du laboratoire, fait l’objet d’une surveillance régulière. Un bypass de la pompe vers le réservoir est maintenu en permanence pour permettre un retour direct de l’eau sans passage par le stack, tant que la conductivité dépasse le seuil ou que le débit n’est pas stabilisé, protégeant ainsi la membrane contre toute eau insuffisamment filtrée.

3.3. Identification et paramétrage des sous-modèles

Le simulateur distingue trois catégories de paramètres selon leur mode de détermination : Les constantes physiques universelles (constante de Faraday F , constante des gaz parfaits R_u), Les paramètres constructeur (surface active A_{cell} , nombre de cellules N_{cells}), et les **paramètres électrochimiques et thermiques**, en revanche, ne sont pas accessibles directement par la mesure à l’échelle du système : ils sont identifiés par calage sur les données expérimentales du banc d’essais, selon la procédure décrite dans cette section.

3.3.1 Algorithme génétique d’identification

L’identification des paramètres électrochimiques est un problème d’optimisation non linéaire : il s’agit de trouver le vecteur de paramètres θ qui minimise l’écart entre la courbe de polarisation simulée et les données expérimentales. La fonction objectif retenue est l’erreur quadratique moyenne (RMSE) sur l’ensemble des trois températures de mesure :

$$\mathcal{L}(\theta) = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{k=1}^N (E_{\text{stack}}^{\text{sim}}(i_k, T_k, \theta) - E_{\text{stack}}^{\text{exp}}(i_k, T_k))^2} \quad (3.1)$$

Principe de l’algorithme génétique

Un algorithme génétique est une méthode d’optimisation inspirée de l’évolution naturelle. Il opère sur une **population** de solutions candidates qu’il fait évoluer itérativement par trois opérateurs biologiques : la **sélection**, le **croisement** et la **mutation**. A chaque génération, les individus dont la fonction objectif $\mathcal{L}$ est la plus faible ont une probabilité plus élevée de transmettre leurs caractéristiques à la génération suivante, orientant progressivement la population vers la région optimale de l’espace de recherche.

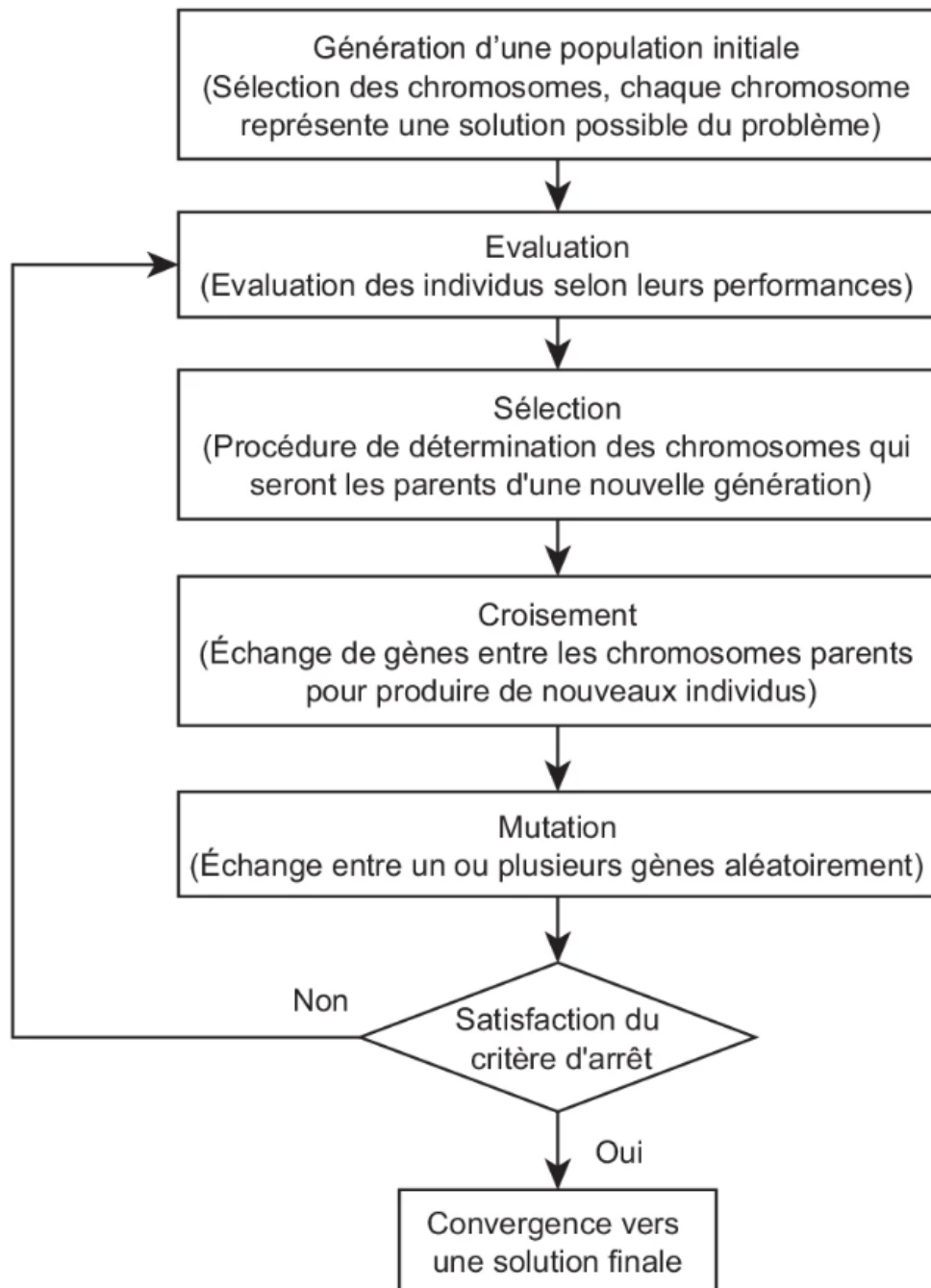


FIGURE 3.3 – Organigramme de l'algorithme d'optimisation (Algorithme Génétique)

La séquence d'exécution est la suivante :

1. **Initialisation** : une population de N_{pop} vecteurs θ est générée aléatoirement dans les bornes physiques définies dans `parameter_bounds.py`.
2. **Evaluation** : chaque individu est évalué par `objective_function.py`, qui appelle le modèle électrochimique avec le vecteur θ courant et calcule $\mathcal{L}(\theta)$ sur les trois courbes de polarisation.
3. **Sélection** : les individus de plus faible $\mathcal{L}$ sont sélectionnés préférentiellement pour la reproduction, par tournoi ou par roulette.
4. **Croisement** : deux individus parents échangent des portions de leur vecteur de paramètres pour produire deux individus enfants, combinant les caractéristiques des deux parents.
5. **Mutation** : une perturbation aléatoire de faible amplitude est appliquée à certains paramètres des individus enfants, assurant la diversité génétique de la population et évitant la convergence prématurée vers un minimum local.
6. **Convergence** : les étapes 2 à 5 sont répétées jusqu'à ce que $\mathcal{L}$ cesse de décroître significativement ou que le nombre maximal de générations N_{gen} soit atteint.

Chapitre 4

Résultats, validation et perspectives

4.1. Protocole de validation

La validation du simulateur multi-physique développé dans ce travail repose sur une comparaison systématique des sorties du modèle aux données expérimentales acquises sur le banc d'essais PIELIZ. La démarche adoptée suit une logique de validation modulaire et progressive : chaque sous-modèle est validé indépendamment avant toute intégration dans la boucle couplée, ce qui permet d'isoler les sources d'écart et de garantir la traçabilité des résultats.

Données expérimentales disponibles

Les campagnes de mesure réalisées sur le banc d'essais ont fourni les jeux de données suivants :

- **Courbes de polarisation** (U_{cell} vs. i) mesurées à trois températures de stack distinctes, permettant de couvrir la plage de fonctionnement nominale de l'électrolyseur ;
- **Evolution temporelle de la température du stack** $T_{\text{stack}}(t)$ lors d'un transitoire de montée en charge, utilisée pour la validation du modèle thermique ;
- **Données d'identification du BoP** : relevés expérimentaux du débit d'eau $\dot{m}_{\text{H}_2\text{O}}$, de la vitesse de commande de la pompe et de la tension d'alimentation, exploités pour l'identification des coefficients de la loi de commande k_0 et k_1 .

4.1.1 Résultats de la validation électrochimique

La figure 4.1 présente la comparaison entre les courbes de polarisation simulées et mesurées pour les trois températures considérées.

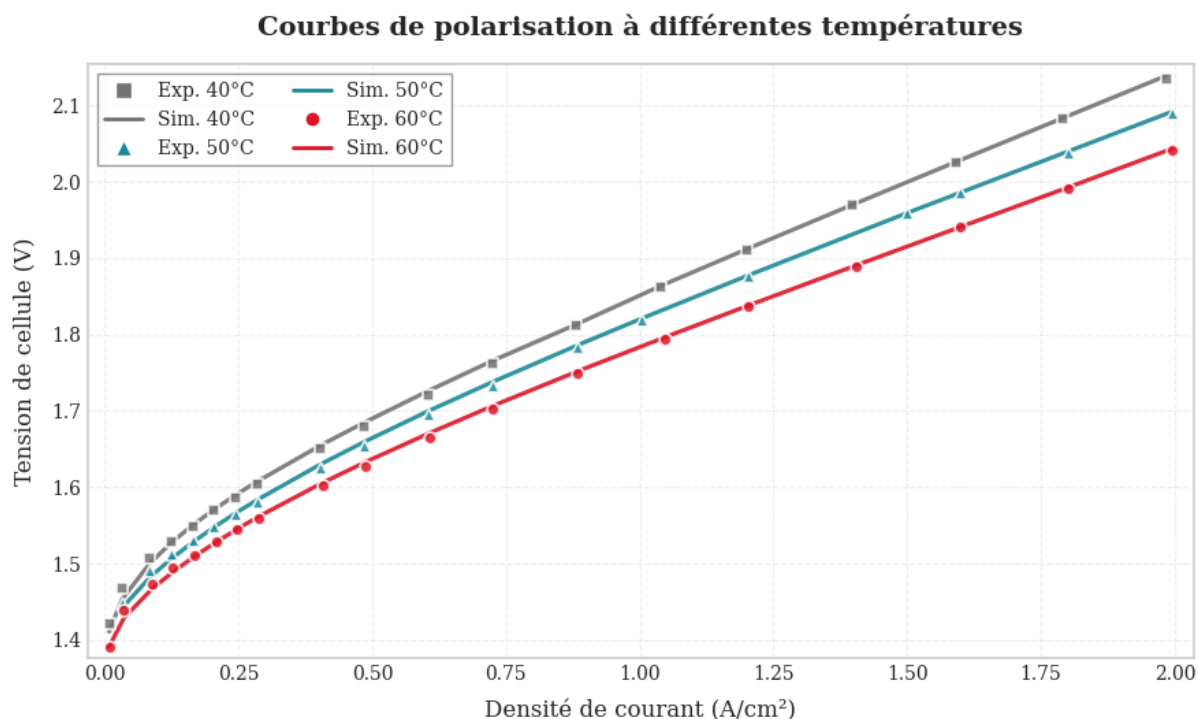


FIGURE 4.1 – Comparaison des courbes de polarisation simulées et expérimentales à Paramètres identifiés par algorithme génétique.

Le modèle reproduit fidèlement l'allure générale des courbes de polarisation sur l'ensemble de la plage de courant explorée. La zone d'activation (faibles densités de courant), dominée par les pertes de Butler-Volmer, ainsi que la zone ohmique (densités de courant intermédiaires) sont bien restituées par le modèle. Le tableau 4.2 synthétise les valeurs de RMSE obtenues courbe par courbe ainsi que la RMSE globale.

Les paramètres identifiés, leurs bornes de recherche ainsi que les hyperparamètres de l'algorithme génétique sont récapitulés dans le tableau 4.1.

TABLE 4.1 – Paramètres identifiés par algorithme génétique : bornes, valeurs optimales et hyperparamètres de l'algorithme.

Paramètre	Description	Bornes	Valeur calibrée
α_{an}	Coefficient de transfert anodique	(0.7, 1.2)	8.441549×10^{-1}
α_{ca}	Coefficient de transfert cathodique	(0.2, 0.5)	3.194084×10^{-1}
$i_{0,an}$	Densité de courant d'échange anodique	$(10^{-7}, 10^{-5})$	4.665525×10^{-7}
$i_{0,ca}$	Densité de courant d'échange cathodique	$(10^{-3}, 10^{-1})$	10^{-1}
δ_{mem}	Epaisseur de la membrane	(0.01, 0.02)	2×10^{-2}
i_L	Densité de courant limite	(2, 3)	2.434394

TABLE 4.2 – Hyperparamètres et résultats du modèle

Hyperparamètre	Valeur	Condition	RMSE (V)
Taille de la population	150	$T = 40C$	0.00122
Nombre de générations	300	$T = 50C$	0.00127
Probabilité de croisement	0.8	$T = 60C$	0.00120
Probabilité de mutation	0.15		

Ce jeu de paramètres est ensuite utilisé pour simuler les trois courbes de polarisation, validant ainsi la capacité du modèle à reproduire le comportement électrochimique du stack sur l'ensemble de sa plage de température opératoire.

4.2. Validation du modèle thermique

4.2.1 Identification des paramètres thermiques

Les paramètres thermiques du stack ont été identifiés par algorithme génétique en minimisant la RMSE entre la température simulée $T_{\text{stack}}(t)$ et la température mesurée sur le banc PIELIZ lors d'un essai transitoire. Le profil de courant appliqué lors de cet essai est en échelon.

Le tableau 4.3 récapitule les bornes de recherche, les valeurs identifiées ainsi que les hyperparamètres de l'algorithme.

TABLE 4.3 – Paramètres thermiques identifiés par algorithme génétique.

Paramètre	Description	Bornes	Valeur calibrée
C_{th}	Capacité thermique équivalente du stack	$(10^4, 2.5 \times 10^4)$	20131.43
R_{th}	Résistance thermique stack/fluide	$(0.1, 0.18)$	0.174704

4.2.2 Résultats de la validation thermique

La figure 4.2 compare l'évolution temporelle de la température du stack simulée et mesurée sur l'ensemble du profil d'essai.

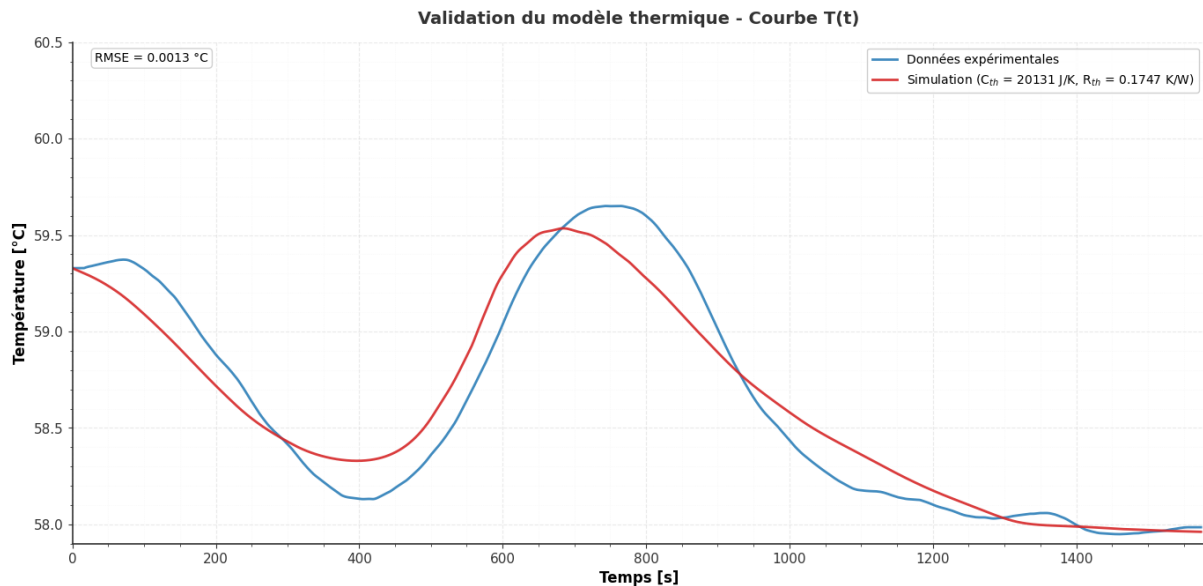


FIGURE 4.2 – Evolution temporelle de la température du stack : comparaison entre simulation et mesure expérimentale.

La dynamique générale de la montée en température est bien reproduite par le modèle. La RMSE calculée sur l'ensemble de la courbe temporelle est de 0.0013, ce qui atteste d'une précision satisfaisante compte tenu de la simplicité du modèle thermique à capacité et résistance équivalentes. L'écart résiduel observé en régime transitoire est attribuable à la difficulté de reproduire les conditions expérimentales lors de la simulation (pertes thermiques, erreurs de mesures).

4.2.3 Validation des débits molaires simulés

Le modèle fluide prédit les débits molaires d'hydrogène $\dot{n}_{H_2}$ et d'oxygène $\dot{n}_{O_2}$ produits par l'électrolyse de l'eau.

La figure 4.3 présente les débits molaires simulés en fonction du courant appliqué.

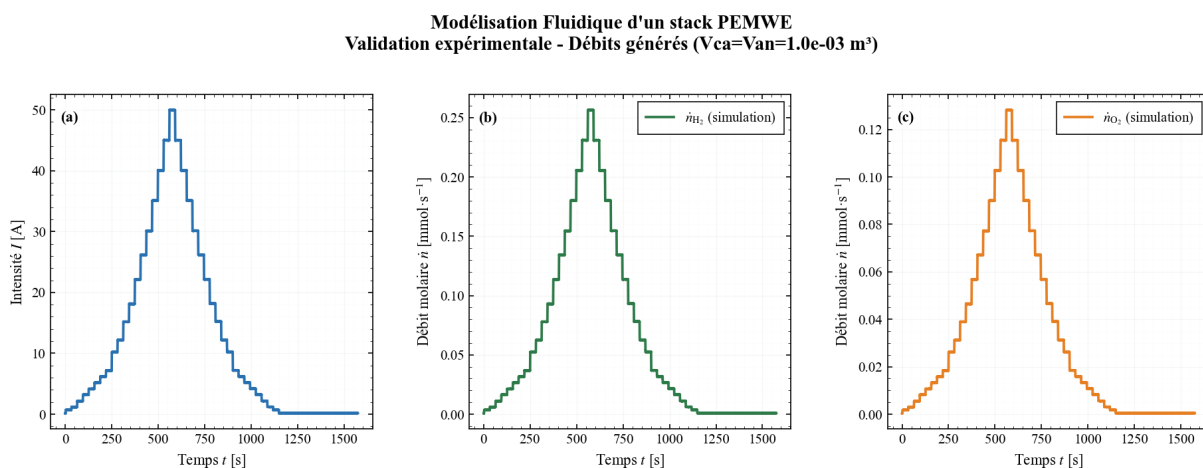


FIGURE 4.3 – Débits molaires d'hydrogène et d'oxygène simulés par le modèle fluide en fonction du courant de stack.

En l'absence de débitmètre hydrogène/oxygène exploitable sur le banc PIELIZ dans la plage de courant complète, la validation formelle de ces débits par comparaison

directe avec des mesures expérimentales n'a pas pu être conduite. La cohérence du modèle fluide est néanmoins assurée par la vérification analytique de la loi de Faraday et par la cohérence avec les ordres de grandeur attendus du stack.

4.3. Validation des auxiliaires

4.3.1 Identification de la loi de commande de la pompe

La validation complète du Balance of Plant (BoP) dépasse le cadre des données expérimentales disponibles à ce stade. Toutefois, une étape d'identification préliminaire a été conduite afin d'établir la loi de commande de la pompe à membrane, dont le rôle est d'assurer la circulation du liquide caloporteur dans la boucle thermique du stack. Les coefficients k_0 et k_1 ont été identifiés par régression linéaire à partir des relevés expérimentaux du débit d'eau, de la vitesse de commande et de la tension d'alimentation de la pompe, acquis sur le banc PIELIZ.

La figure 4.4 présente les données expérimentales utilisées pour cette identification : évolution conjointe du débit $\dot{V}_{H_2O}$, de la vitesse de consigne et de la tension U_{pump} , révélant la relation quasi-linéaire entre ces grandeurs sur la plage de fonctionnement explorée.

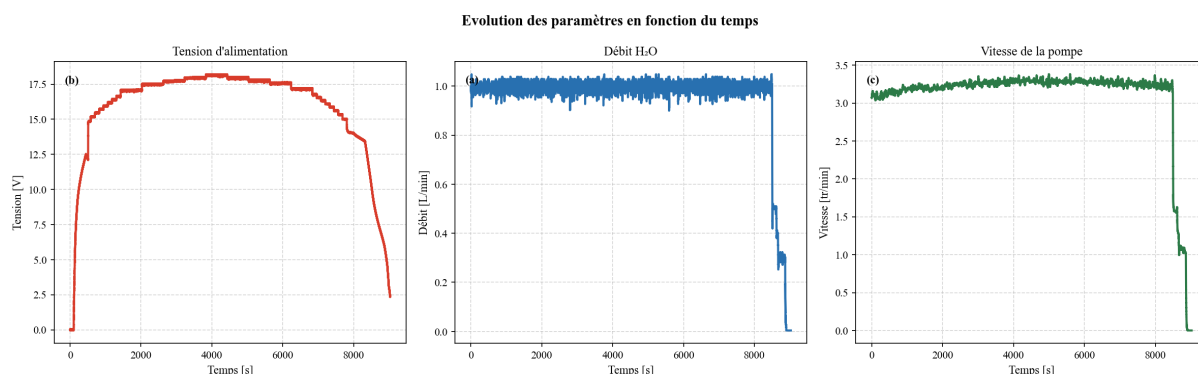


FIGURE 4.4 – Données expérimentales utilisées pour l'identification des coefficients k_0 et k_1 de la loi de commande de la pompe d'alimentation.

Le tableau 4.4 récapitule les coefficients identifiés.

TABLE 4.4 – Coefficients de la loi de commande de la pompe identifiés par régression linéaire.

Paramètre	Description	Valeur identifiée
k_0	Ordonnée à l'origine (débit résiduel)	0
k_1	Pente (sensibilité débit/tension)	3.208

4.4. Discussion : Verrous scientifiques et techniques rencontrés

Les résultats obtenus validant le comportement individuel des principaux sous-modèles du stack PEM, le développement de ce simulateur multi-physique a néanmoins mis en lumière plusieurs verrous d'ordre scientifique et technique, dont la résolution constitue un enjeu majeur pour les travaux futurs.

- 1. Hétérogénéité des constantes de temps :** Le couplage électro-thermo-fluidique met en jeu des dynamiques opérant à des échelles de temps radicalement différentes. La réponse électrochimique du stack est quasi-instantanée (de l'ordre de la milliseconde), tandis que la dynamique thermique se développe sur plusieurs minutes ($\tau_{th} \sim 5-20$ min) et que les dynamiques fluidiques des auxiliaires (remplissage du réservoir, pressurisation du séparateur) s'étendent sur des dizaines de minutes. Cette dispersion d'échelles impose un compromis délicat dans le choix du pas de temps Δt : un pas trop grand introduit une erreur de couplage sur les grandeurs électriques, tandis qu'un pas trop petit rend la simulation du système complet coûteuse en temps de calcul.
- 2. Complexité du couplage en boucle fermée :** Si les trois sous-modèles internes du stack (électrochimique, thermique et fluidique) ont été couplés avec succès, l'intégration complète des auxiliaires (BoP) en boucle fermée n'a pas pu être finalisée. La difficulté réside dans la gestion simultanée des boucles de régulation (PI et ON/OFF), des conditions aux limites inter-composants, et de la stabilité numérique du système d'équations algébro-différentielles résultant. En particulier, le couplage entre le séparateur H_2/H_2O , le compresseur et le réservoir de stockage introduit une boucle de rétroaction en pression dont la stabilisation numérique requiert une attention particulière.
- 3. Insuffisance des données expérimentales pour la validation du BoP :** La validation expérimentale a pu être conduite avec succès pour les sous-modèles du stack (courbes de polarisation à 40, 50 et 60 °C, évolution temporelle de la température $T_{stack}(t)$ et loi de commande de la pompe). En revanche, l'absence de capteurs dédiés sur le banc PIELIZ au moment des expérimentations n'a pas permis de conduire une validation formelle de ces composants. À ce stade, leur cohérence repose uniquement sur la vérification analytique des bilans (loi de Faraday, conservation de l'énergie) et sur la conformité aux ordres de grandeur du constructeur.
- 4. Hypothèses simplificatrices et limites de validité :** L'ensemble du modèle repose sur l'hypothèse des volumes localisés (paramètres concentrés, 0D), supposant des propriétés spatialement uniformes au sein de chaque composant. Cette approche, bien qu'adaptée à la simulation système en temps réel, présente une limite intrinsèque puisqu'elle ne permet pas de capturer les gradients internes.

4.5. Perspectives

Les travaux réalisés ouvrent plusieurs axes de développement, organisés selon une logique de progression du simulateur vers un outil de conception et d’optimisation à part entière.

Axes de perspectives et travaux futurs

Afin de prolonger les travaux de recherche et de dépasser les verrous identifiés, cinq axes de développement prioritaires sont envisagés pour le simulateur multi-physique :

Axe 1 - Finalisation du couplage système complet : Intégration de l’ensemble des auxiliaires dans la boucle de simulation fermée. Cet axe cible principalement la stabilisation numérique de la boucle de rétroaction entre le compresseur et le réservoir de stockage, ainsi que la validation du bilan de puissance auxiliaire (P_{aux}).

Axe 2 - Simulation de scénarios d’intégration aux EnR : Soumission du simulateur complet à des profils de puissance intermittents (photovoltaïque, éolien, régulation de fréquence réseau). L’objectif est d’évaluer la réponse du système face aux fluctuations et leur impact sur la stabilité thermique du stack et l’intégrité des composants.

Axe 3 - Optimisation de la stratégie de contrôle-commande : Implémentation des stratégies de régulation (PI indépendants et logique ON/OFF), afin de maximiser l’efficacité du système (η_{sys}) et la production d’hydrogène tout en préservant la durée de vie du matériel.

Axe 4 - Intégration d’un modèle de vieillissement : Couplage du simulateur dynamique avec des modèles de dégradation physique (dissolution de l’iridium à l’anode, amincissement de la membrane Nafion, dégradation des PTL). Cette approche permettra de prédire l’évolution de la courbe de polarisation et d’estimer la durée de vie utile du stack selon son profil d’usage.

Axe 5 - Validation expérimentale approfondie et analyse de sensibilité : Mise en place d’une campagne d’instrumentation complémentaire sur le banc PIELIZ pour valider formellement les auxiliaires. Ce travail sera complété par une analyse de sensibilité paramétrique axée sur les variables clés (tension, température, débits).

Conclusion générale

La transition énergétique mondiale impose de repenser en profondeur les vecteurs de stockage et de transport de l'énergie. Dans ce contexte, l'hydrogène vert produit par électrolyse de l'eau alimentée en énergies renouvelables s'impose comme l'une des solutions les plus prometteuses pour décarboner les secteurs industriels et assurer la flexibilité du réseau électrique. Les électrolyseurs à membrane échangeuse de protons (PEM), grâce à leur temps de réponse rapide et leur haute densité de puissance, sont particulièrement bien positionnés pour répondre à cette exigence. Leur exploitation optimale requiert cependant une maîtrise fine de leur comportement dynamique, qui ne peut être acquise sans outils de simulation multi-physiques fiables et complets.

C'est précisément l'objectif que s'est fixé ce travail de fin d'études, réalisé au sein de l'équipe SHARPAC du département Energie du laboratoire FEMTO-ST. Un simulateur Python modulaire et multi-physique a été développé, intégrant le stack PEM dans toute sa complexité électro-thermo-fluidique, ainsi que l'ensemble de ses auxiliaires essentiels (Balance of Plant). Chaque composant est gouverné par des bilans dynamiques de masse et d'énergie, couplés par des interfaces physiques cohérentes, et l'identification des paramètres du modèle a été conduite par algorithme génétique sur les données expérimentales du banc d'essais PIELIZ.

Les résultats obtenus sont encourageants : le modèle électrochimique reproduit fidèlement les courbes de polarisation du stack PEM à trois températures avec une RMSE inférieure à 1,3 mV, le modèle thermique restitue la dynamique de la température du stack avec une RMSE de 0,0013 °C, et les débits molaires simulés sont cohérents avec les prédictions analytiques de la loi de Faraday. La loi de commande de la pompe a par ailleurs été identifiée à partir des relevés expérimentaux disponibles.

Ce travail pose ainsi les fondations d'un outil de simulation système à vocation opérationnelle, destiné à appuyer les activités de recherche de l'équipe SHARPAC sur la durabilité et l'intégration des systèmes d'électrolyse. Les perspectives identifiées : finalisation du couplage en boucle fermée, simulation de scénarios d'intégration aux sources renouvelables, optimisation de la commande, et l'implémentation d'un modèle de vieillissement et analyse de sensibilité, tracent une feuille de route ambitieuse pour la poursuite de ces travaux.

Au-delà des aspects techniques, cette expérience aura permis de comprendre la complexité inhérente à la modélisation des systèmes énergétiques multi-physiques, et la richesse scientifique d'un environnement de recherche international tel que FEMTO-ST. Elle constitue une contribution modeste mais sincère à l'effort collectif vers un système énergétique plus durable.

Références bibliographiques

1. Crespi et al. (2023). *Experimental and theoretical evaluation of a 60 kW PEM electrolysis system for flexible dynamic operation.*
2. Sood et al. (2020). *Generic Dynamical Model of PEM Electrolyser under Intermittent Sources.*
3. Yigit et al. (2016). *Mathematical modeling and dynamic Simulink simulation of high-pressure PEM electrolyzer system.*
4. Benmehel et al. (2024). *PEM water electrolyzer modeling : Issues and reflections.*
5. Covna Stark. (2025). *Ion Exchange Resin Pressure Drop : A Complete Guide to Calculation & Troubleshooting.*
<https://stark-water.com/blog/ion-exchange-resin-pressure-drop-guide/>
6. MathWorks. (2025). *Heat exchanger for systems with thermal liquid and controlled flows.*
<https://www.mathworks.com/help/hydro/ref/heatexchangertl.html>
7. Yunus A. Cengel (1998). *Heat Transfer : A Practical Approach.*
8. Majumdar et al. (2023). *Control and control-oriented modeling of PEM water electrolyzers : A review.*
9. Louli et al. (2026). *Optimized multiphysics model for a Proton Exchange Membrane Water Electrolyzer.*
10. Zerrougui et al. (2025). *Investigating bubble impacts on PEM electrolysis performance through enhanced multiphysics modeling.*
11. Emma Nguyen. (2025). *Electrolyse basse-température en fonctionnement intermittent : caractérisation des impacts et aide au pilotage.*
12. Abdin et al. (2015). *Modelling and simulation of a proton exchange membrane (PEM) electrolyser cell.*
13. U. Remme (2024). *Global Hydrogen Review 2024.*
14. Kréhi Serge Agbli. (2012). *Modélisation multiphysique des flux énergétiques d'un couplage photovoltaïque-électrolyseur PEM-pile à combustible PEM en vue d'une application stationnaire.*
15. Louli et al. (2025). *A Critical Review of Green Hydrogen Production by Electrolysis : From Technology and Modeling to Performance and Cost.*