

**THÈSE DE DOCTORAT
DE
L'UNIVERSITÉ D'ÉVRY-VAL D'ESSONNE**

Spécialité : **Mécanique**

Présentée par

Zhiming ZHANG

pour obtenir le grade de

DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ D'ÉVRY-VAL D'ESSONNE

Sujet de la thèse :

Modélisation mécanique des interfaces multi-contacts dans une pile à combustible

Soutenance prévue le 30 novembre 2010 devant le jury composé de :

Q.-C. HE	Professeur, Université Paris-Est, Rapporteur
M. HJIAJ	Professeur, INSA de Rennes, Rapporteur
C. VALLÉE	Professeur, Université de Poitiers, Examineur
Z.-Q. FENG	Professeur, Université d'Évry - Val d'Essonne, Directeur de thèse
C. RENAUD	Maître de Conférences, Université d'Évry - Val d'Essonne, Co-directeur de thèse

Résumé :

La pile à combustible transforme l'énergie chimique en énergie électrique grâce à un empilement de différentes structures lamellaires. Des phénomènes mécaniques présents aux interfaces agissent de manière plus ou moins directe sur les performances et la durée de vie de la pile. Nous avons montré que la précompression par boulons tirants pendant l'assemblage, la déformation de la couche de diffusion gazeuse (GDL), le contact et la configuration de la plaque bipolaire (BPP) avaient des influences importantes sur la résistance de contact, la porosité et la perméabilité de la pile. La résistance de contact est déterminée par la zone de contact et la pression de contact. La porosité et la perméabilité sont liées à la déformation aux interfaces. Le contact entre les différentes structures a un rôle majeur dans le fonctionnement de la pile. Ce problème a été modélisé par la méthode des éléments finis. Différents paramètres de la pile comme la précompression, la structure géométrique des dents de la plaque BPP ou encore la porosité de la GDL ont été étudiés et ont permis de connaître l'état de contact ainsi que les déformations dans les structures. L'influence de certains paramètres sur les résultats mécaniques de la pile a ensuite été abordée. L'objectif de cette étude est de fournir des valeurs optimales de ces paramètres pour obtenir la meilleure performance possible de la pile.

Mots clés : pile à combustible - phénomènes mécaniques - contact - éléments finis

Abstract :

The fuel cell transforms chemical energy to electrical power sources through a stack of different planar structures. Mechanical phenomena presented on the multi-contact interface acts more or less the fuel cell's performance and lifetime. We have shown that the pre-load by stacking bolts, the deformation of the gas diffusion layer (GDL), the contact and the configuration of the bipolar plate (BPP) had influences on the contact resistance, the porosity and the permeability of the fuel cell. The contact resistance is determined by the contact area and contact pressure. The porosity and permeability are related to the interfacial deformation. The contact between the different structures has a major role in the fuel cell operation. This problem is solved by the finite element method. Various parameters of the fuel cell as the pre-load, the geometric structure of teeth of BPP as well as the porosity of the GDL were studied and allowed to know the contact behavior and the deformation. The influence of some parameters on the mechanical results of fuel cell stack was then tackled. The purpose of this study is to provide optimum values of these parameters to obtain the best performance of fuel cells.

Key words : fuel cell - mechanical phenomena - contact - finite element

Table des matières

Avant-propos	i
Résumé	i
Abstract	i
Table des matières	iii
Introduction générale	1
Cadre du problème	1
Objectif de l'étude	1
Plan du document	1
1 Présentation de la pile à combustible	7
1.1 Introduction	7
1.2 Problématique énergétique et hydrogène	7
1.2.1 Problématique énergétique	7
1.2.2 Technologie d'hydrogène	8
1.3 Description générale d'une pile à combustible	9
1.3.1 Aperçu historique de la pile	9
1.3.2 Types de piles à combustible	12
1.4 Piles à combustible de type PEM	13
1.4.1 Principe de fonctionnement de la pile	13
1.4.2 Performance actuelle de la pile	15
1.4.3 Structure de la pile à combustible	17
1.4.4 Assemblage de la pile à combustible	18
1.4.5 Le processus opératoire de la PAC	18
1.4.6 Composants de la PAC, leurs rôles et leurs caractéristiques	21
1.4.6.1 Assemblage membrane des électrodes (MEA)	21
1.4.6.2 Couches de diffusion gazeuse (GDL)	22
1.4.6.3 Plaques bipolaires (BPP)	23

1.4.6.4	Joints d'étanchéité	25
1.5	Étude mécanique de la structure avec des interfaces multi-contacts	26
1.5.1	Force de serrage	26
1.5.2	Porosité de la GDL	28
1.5.3	Optimisation des composants	32
1.6	Interactions des effets mécaniques aux interfaces d'une PAC	33
1.6.1	Forces de serrage	33
1.6.2	Déformation de la GDL	34
1.6.3	Contact	35
1.6.4	Endommagement mécanique	35
1.6.5	Pression fluïdique	36
1.7	Conclusions	36
2	Méthodes numériques et résolution du problème de contact	37
2.1	Introduction	37
2.2	Méthode des éléments finis (MEF)	37
2.2.1	Principe	38
2.2.2	Maillage	38
2.2.3	Fonctions d'interpolation	39
2.2.4	Assemblage	41
2.2.4.1	Élasticité linéaire	41
2.2.4.2	Élasticité non linéaire	44
2.3	Cinématique du contact	46
2.3.1	Notion du problème de contact	46
2.3.2	Conditions de contact de Signorini	47
2.3.3	Loi de frottement - modèle de Coulomb	49
2.3.4	Loi de contact avec frottement	51
2.4	Méthodes de résolution des problèmes de contact	52
2.4.1	Formulation par des fonctions de pénalité	53
2.4.1.1	Formulation implicite	53
2.4.1.2	Formulation explicite	54
2.4.2	Formulations par des multiplicateurs de Lagrange	55
2.4.2.1	Formulation par adhérence	55
2.4.2.2	Formulation par glissement sans frottement	55
2.4.3	Formulations lagrangiennes augmentées	56
2.4.3.1	Pseudo-potentiels	56
2.4.3.2	Bi-potentiel	57
2.5	Application numérique	59

2.6	Conclusions	64
3	Étude des effets mécaniques dans une cellule de la pile	65
3.1	Introduction	65
3.2	Simplification et propriétés du modèle numérique	65
3.2.1	Description et simplification du modèle	65
3.2.2	Propriétés mécaniques du modèle	66
3.3	Modèle des éléments finis de la PAC	67
3.3.1	Description du modèle	67
3.3.2	Maillage	69
3.3.3	Définition de l'objet "zones de contact"	70
3.3.4	Conditions aux limites	72
3.3.5	Chargement de précompression de la PAC	72
3.4	Études des contacts dans la PAC	73
3.4.1	Étude de deux zones de contacts (GDL/BPP et GDL/MEA)	73
3.4.2	Étude d'une zone de contact (GDL/BPP) avec l'angle droit	75
3.4.3	Modélisation avec congé au niveau de la dent	76
3.4.3.1	Contrainte dans les plaques	77
3.4.3.2	Pression de contact	80
3.4.3.3	Aire de contact (longueur de contact)	80
3.4.3.4	Déformation de la plaque GDL	82
3.4.3.5	Déformation de la plaque GDL avec pores	84
3.5	Conclusions	88
4	Influence des principaux paramètres sur la performance des piles	89
4.1	Introduction	89
4.2	Précompression de la PAC	89
4.2.1	Pression de contact	90
4.2.2	Aire de contact (longueur de contact)	92
4.2.3	Porosité de la plaque GDL	94
4.3	Rayon du congé des dents de la plaque BPP	97
4.3.1	Pression de contact	97
4.3.2	Aire de contact (longueur de contact)	100
4.3.3	Porosité de la plaque GDL	101
4.4	Largeur des dents de la plaque BPP	103
4.5	Épaisseur de la plaque GDL	107
4.6	Épaisseur de la membrane MEA	108
4.7	Étude de la géométrie à l'interface	110

4.7.1	Influence des aspérités de l'interface	112
4.7.2	Influence des hauteurs de dents de la BPP	116
4.8	Conclusions	119
	Conclusions et perspectives	119
	Références bibliographiques	125
	Liste des figures	135
	Liste des tableaux	138

Introduction générale

Cadre du problème :

De nos jours, avec le développement de l'industrie, nous consommons de plus en plus de ressources en énergies, comme le charbon, le pétrole et le gaz naturel, etc.. Les limites de ces ressources deviennent un problème auquel le public s'intéresse. Les questions énergétiques recouvrent à l'heure actuelle deux domaines. L'un est lié au risque d'épuisement des ressources fossiles et fissiles, l'autre est le problème de la pollution environnementale, tels que le réchauffement par effet de serre et les pluies acides.

Face à la diminution des ressources énergétiques et à l'augmentation de la pollution des énergies, il est impératif de diminuer la pollution dans le monde (un premier pas a été le Protocole de Kyoto signé en 1997), et de rechercher des alternatives énergétiques possédant les mêmes propriétés que les hydrocarbures. Dans ce contexte, l'hydrogène est une solution sérieuse et intéressante en tant que source d'énergie durable et renouvelable.

L'hydrogène, qui n'existe pas à l'état naturel, peut en effet être synthétisé à partir des énergies renouvelables. Il est particulièrement intéressant car son stockage est possible sous différents états (gaz, liquide et solide). D'autre part, il est léger et "propre". Mais il ne peut pas être utilisé directement, et nécessite la transformation d'une énergie chimique en énergie électrique. Cette production d'énergie a lieu dans une pile à combustible.

La pile à combustible est un générateur efficace d'énergie électrique à partir de l'énergie chimique, elle utilise la réaction électrochimique d'oxydoréduction entre l'hydrogène et l'oxygène pour donner de l'électricité. En fait, des recherches sur les piles à combustibles ont été faites depuis une centaine d'années. Les avantages offerts par la technologie des piles à combustibles comme l'efficacité, la protection de l'environnement et la construction modulaire, sont tels qu'elles ont suscité un intérêt permanent pour leur développement depuis 1893.

Après 170 ans de recherches, différentes piles ont déjà été développées en particulier, la pile à combustible de type PEM (Membrane Échangeuse des Protons), qui peut être employée dans une position fixe ou embarquée (dans le transport comme par exemple le véhicule électrique). La stabilité des composants comme la nouvelle membrane, la plaque bipolaire, le flux et la température nominaux ont été étudiés, mais ce n'est pas encore suffisant

pour la commercialisation à grande échelle de la pile. En effet, les influences mécaniques sur la performance des piles sont reconnues et les interactions entre les effets mécanique et la performance des piles doivent être étudiés. Dans ces travaux, nous nous sommes intéressés aux interactions des effets mécaniques au sein de la pile à combustible sur la performance et la durée de vie des piles.

Dans cette thèse, nous entendrons par :

- Empilement de la pile à combustible (PAC) : un empilement de cellules électrochimiques sans les auxiliaires (système de refroidissement, d'alimentation en gaz).
- Système PAC : une pile à combustible avec ses auxiliaires (système de refroidissement, d'alimentation en gaz) et ses organes de contrôle et de commande.

Nous considérerons principalement le cas d'un empilement de la pile. Nous ne nous intéresserons jamais au système entier de la pile à combustible.

Objectifs de l'étude :

Ce travail a été réalisé au sein du laboratoire LMÉEÉ (Laboratoire de Mécanique et d'Énergétique d'Évry). La thèse est consacrée aux travaux de modélisation des effets mécaniques sur les interfaces de contact en vue d'étudier ses interactions sur la performance des piles à combustibles de type PEM et sur leur durée de vie.

Le principe de fonctionnement de la pile est une réaction électrochimique inverse de l'électrolyse à partir d'hydrogène et d'oxygène. En fait, la pile à combustible qui n'est pas parfaitement utilisée, a des pertes de performance et des dégradations irréversibles du cœur de la pile qui font chuter la durée de vie des piles. La perte de la performance est surtout due à la résistance de contact de la pile à combustible causée par la structure lamellaire. La pile à combustible est constituée d'un empilement d'éléments comme le MEA (Assemblage des membranes électrodes) et la GDL (Couche de Diffusion Gazeuse), qui sont pris en sandwich entre des plaques bipolaires (BPP) formant ainsi une "cellule". Ces cellules sont reliés en série électrique pour former un "empilement". Pour un fonctionnement normal de la pile, la force de serrage par boulons tirants constitue le chargement qui maintient les éléments en contact. Ainsi la pile à combustible peut être regardée comme une structure lamellaire que nous appellerons structure multi-contact.

Le contact est un phénomène non linéaire, complexe et s'appliquant sur des zones pas toujours faciles à déterminer, sa prise en compte entre les éléments de la PAC est pourtant importante pour étudier le comportement mécanique aux interfaces. Il est évident que les effets mécaniques sur les interfaces comme la force de contact joue un rôle fondamental dans le comportement de la structure : non seulement la surface de contact et l'état de contact, mais aussi sa déformation, son déplacement, la distribution des efforts doivent être connus afin d'améliorer la performance de la pile.

Lorsqu'un empilement de la pile est serré par boulons tirants, la force de serrage induit des efforts normaux et tangentiels de contact aux différentes interfaces. La force de contact, la déformation et la zone de contact sont liées entre elles. La déformation des éléments est liée à leur porosité et à leur perméabilité aux gaz réactifs, la zone de contact détermine donc la voie de transfert des électrons. Par ailleurs, une force de contact très élevée peut provoquer la fissure mécanique. Ainsi une étude de ces interactions est pertinente afin de caractériser leur influence sur la performance de la pile et sa durée de vie. Sur les interfaces, plus la force de contact est élevée, et l'aire de contact grande, plus la résistance de contact est petite et meilleure est la performance de la PAC. En revanche, plus la porosité et la perméabilité de GDL sont petites (sous de fortes déformations) et plus le risque d'endommagement mécanique sur MEA et GDL est réel car ils sont très minces et fragiles. Comme la pile à combustible est un empilement multi-contacts en série électrique, l'endommagement d'un élément de la pile peut conduire au dysfonctionnement de tout l'empilement. Ainsi le compromis entre une perméabilité élevée et une petite résistance de contact est un problème clé dans la recherche d'une puissance optimale de la pile.

De par la configuration rectangulaire des petits dents de la BPP, des concentrations de contraintes peuvent apparaître aux angles droits des dents, la distribution de la force de contact sur les interfaces entre GDL et les petits dents de BPP n'est en effet pas uniforme. Par conséquent, la distribution de la perméabilité et de la résistance de contact sur les interfaces ne sont pas uniformes, ce qui peut provoquer des problèmes : d'une part, une distribution non uniforme de l'alimentation des gaz réactifs, d'autre part, une distribution non uniforme de la résistance de contact entre des éléments de la PAC quand il faut obtenir une réaction électrochimique la plus régulière possible dans la PAC.

Ainsi, l'influence de ces paramètres interagissant au niveau des interfaces multi-contacts sur la performance de la pile à combustible doit être étudiée.

L'étude expérimentale des phénomènes de contact étant complexe, une simulation numérique est plus simple et appropriée. Une modélisation est proposée dans nos études. Elle est basée sur la méthode des éléments finis et prend en considération les problèmes de contact qui ne peuvent pas être résolus analytiquement. Les objectifs de la thèse sont les suivants :

- Identifier les effets mécaniques et leurs interactions sur les interfaces multi-contacts liées à la performance des piles à combustibles, déterminer des paramètres importants qui peuvent influencer la performance de la pile ;
- Modéliser une cellule de la pile avec ses différents contact en utilisant la méthode des éléments finis afin d'obtenir les résultats précis ;
- Développer un modèle paramétrique permettant d'optimiser l'état de contact mécanique sur les interfaces (distribution des contraintes, distribution de la pression de contact, zone de contact et déformation) afin d'étudier leurs influences sur la performance de la pile.

Avant d'aborder les paramètres importants dans un empilement de pile, un travail sur la modélisation et sur la caractérisation des éléments mécaniques de la pile à combustible s'est avéré nécessaire.

La pile à combustible est un système multi-physique : mécanique, électrochimique, thermique et fluide. Notre approche se limite à l'étude des phénomènes mécaniques au sein d'un empilement de cellules soumis à un chargement purement mécanique, sans considérer les aspects thermique et fluide. Nous avons retenu une approche simple sans considérer les conditions opératoires comme la pression des gaz réactifs, la température et l'hydratation des membranes. Dans cette approche, nous abordons la modélisation des états de contact mécaniques au sein de la pile à combustibles de type PEM pour connaître leur impact sur la performance et la durée de vie.

Plan du document :

Dans le cadre de la modélisation d'un empilement de la pile, les modèles développés sont bidimensionnels et les matériaux élastiques isotropes dans l'étude.

Le premier chapitre présente les objectifs et les enjeux de la thèse. Nous commençons par la description d'un état problématique de nature énergétique et environnementale dans le monde. L'énergie d'hydrogène est une solution prometteuse et favorable à l'environnement qui permet d'obtenir de l'électricité grâce à la pile à combustible. Nous étudierons ensuite le principe, la structure et la performance d'une pile à combustible. Parce que la pile à combustible de type PEM est une structure lamellaire, l'état de contact mécanique entre éléments de la pile a un rôle important sur sa performance. Les effets mécaniques comme le contact, la déformation sont décrits en détail, leurs interactions sur la performance de la pile sont discutées. La modélisation numérique est un moyen d'approfondir les connaissances sur les phénomènes mécaniques aux interfaces multi-contacts des piles à combustibles.

Le second chapitre présente l'approximation d'un problème de contact avec frottement par la méthode des éléments finis. On commencera par présenter la méthode des éléments finis, puis nous aborderons la formulation des problèmes de contact unilatéral avec frottement de Coulomb. Nous présenterons ensuite différentes méthodes de résolution numérique de ces problèmes, en donnant, pour terminer, une application numérique d'un cas test.

Dans le troisième chapitre, les phénomènes mécaniques au niveau des interfaces entre éléments de la pile ont été étudiés. Afin de simplifier la modélisation, nous nous sommes limités à regarder les effets mécaniques pour une seule cellule de l'empilement soumise à un chargement statique. Après avoir décrit le modèle éléments finis utilisé (géométrie, maillage, conditions aux limites, etc.), nous avons présenté les résultats obtenus sur les états de contact (zones de contact, pression de contact) et sur les déformations. Un modèle prenant en compte la porosité de la GDL est également abordé.

La quatrième et dernière partie porte sur l'influence de certains paramètres sur la performance de la pile. Les résultats obtenus en faisant varier des paramètres comme la charge de précompression, le rayon du congé et la largeur des dents de la BPP, les épaisseurs des éléments GDL et MEA ou encore des aspérités de l'interface sont présentés. L'objectif est ici de dégager des valeurs optimales de ces paramètres pour la performance de la pile.

Nous terminerons la thèse par une conclusion générale qui synthétisera les résultats obtenus et présentera des perspectives de recherche.

Chapitre 1

Présentation de la pile à combustible

1.1 Introduction

Nous débutons le chapitre par une description de la problématique énergétique et environnementale. L'énergie provenant de l'hydrogène est un des meilleurs choix en matière d'énergie propre à condition de savoir le transformer en énergie électrique, ce que permet la pile à combustible. Nous retracerons brièvement l'historique de la pile à combustible. Par la suite, nous présenterons les caractéristiques intéressantes de la pile à combustible de type PEM (membrane échangeuse des protons) : basse température, légèreté et facilité de construction. Elle est prometteuse dans le cadre d'une application au transport (véhicule électrique). Des problèmes existent dans la structure de la PAC comme une température non uniforme sur les interfaces, une résistance de contact élevée et un endommagement des composants, ce qui peut conduire à une fissure mécanique et à un manque de performance de la PAC. L'exploration des interactions des états mécaniques concernant la performance de la pile et sa durabilité apparaît comme une phase essentielle avant la commercialisation de la pile à combustible. Ces interactions sont présentées en détail.

1.2 Problématique énergétique et hydrogène

1.2.1 Problématique énergétique

Avec le développement de l'industrie depuis plusieurs décennies, nous consommons de plus en plus de ressources d'énergies pour pouvoir satisfaire les besoins croissants en énergie de la population. Presque 80% de la production mondiale d'énergie provient du charbon, du pétrole, du gaz naturel et le reste du nucléaire, etc. [Hoo03]. L'épuisement de ces ressources devient être un problème qui préoccupe chacun d'entre nous, les questions énergétiques recouvrent à l'heure actuelle deux domaines. L'un est lié au risque d'épuisement des ressources

fossiles et fissiles, notamment celle du pétrole qui au rythme actuel de consommation, est prévue pour dans un siècle ou moins. L'autre est le problème de la pollution environnementale, notamment l'émission de CO_2 (gaz à effet de serre) et de gaz polluants (SO_2 , NO_x , CO , CH_4 , photofluorographies, particules solides, etc.), provenant des véhicules de transport ou de l'entreprise industrielle (figure 1.1).



FIG. 1.1: Pollution environnementale

Depuis le 19^{ème} siècle, de plus en plus de CO_2 est libéré (figure 1.2), il est désormais important de stopper cette progression et de la réduire le plus possible.

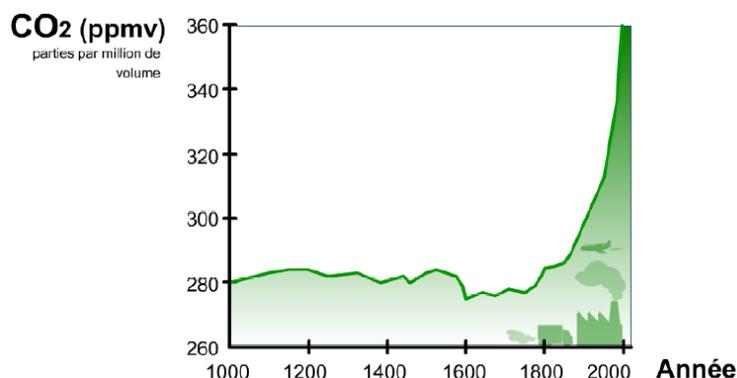


FIG. 1.2: Accroissement de CO_2 depuis le 19^{ème} siècle

1.2.2 Technologie d'hydrogène

Face à l'accroissement incessant de la consommation énergétique et aux problèmes environnementaux qu'il soulève, il est urgent d'opérer des choix de société. Deux solutions sont proposées. Un est de réduire la consommation globale d'énergie. Plusieurs gouvernements, conscients de cette situation, se sont mis d'accord au Japon en 1997 et ont signé le Protocole de Kyoto qui vise à réduire et à stabiliser les émissions du CO_2 pour la période 2008-2012, à des valeurs correspondant à 1990. Malheureusement, on connaît les limites de ces accords.

La seconde solution consiste à développer des technologies nouvelles plus favorables à

l'environnement. L'énergie d'hydrogène apparaît comme l'une des solutions les plus prometteuses car elle présente plusieurs caractéristiques intéressantes [Hoo03] :

- énergie efficace : par rapport au pétrole ou au charbon, l'hydrogène de poids équivalent libère environ 3 fois plus d'énergie que le pétrole, environs 6 fois plus d'énergie que le charbon.
- énergie propre : production d'eau sans pollution.
- source fiable : l'hydrogène est très abondant et très accessible dans la nature.

Grâce aux nombreux avantages, l'hydrogène est une énergie très respectueuse de l'environnement. La recherche de nouvelles technologies d'utilisation a été encouragée et entreprise, afin de développer des systèmes de conversion ou de production d'énergie électrique. Les piles à combustible apparaissent comme l'une des meilleures solutions pour la transformation de l'hydrogène en énergie électrique.

1.3 Description générale d'une pile à combustible

Une pile à combustible est un générateur d'énergie électrique. Elle transforme directement l'énergie chimique du combustible en énergie électrique. C'est un système qui ne produit pratiquement pas de nuisances sonores, puisqu'il ne comporte pas de composants mécaniques en mouvement, comme les turbines et les moteurs. De plus, le courant électrique est produit tant que la pile est alimentée conjointement en combustible (hydrocarbures, alcools, biomasse, gaz naturel, hydrogène) et en comburant (oxygène de l'air). C'est ce qui la différencie des batteries, accumulateurs et autres piles, où se trouve stockée sous forme chimique une quantité limitée d'énergie électrique et qui doivent soit être rechargés lorsque c'est possible (batterie de véhicule), soit être remplacés (piles pour poste de radio).

1.3.1 Aperçu historique de la pile

En 1806, Sir Humphry Davy réalisait l'électrolyse de l'eau distillée et obtenait de l'hydrogène et de l'oxygène en consommant de l'électricité. C'est Christian Friedrich Schoenbein le premier qui, en 1838, observe le principe des piles à combustible. Dans son expérience, il utilise un tube en U avec deux électrodes de platine. Grâce à un courant électrique, il parvient à obtenir de l'hydrogène et de l'oxygène. En coupant l'alimentation, il constate que les gaz produisent un courant électrique en sens inverse du premier. William Robert Grove a rencontré Schoenbein lors d'une conférence à Birmingham en 1839. Les deux hommes sympathisèrent et se mirent au courant de leurs recherches. En 1839, Grove a démontré le principe de la pile à combustible [Gro39].

Dans sa célèbre expérience, il utilisait des tubes en U (figure 1.3), il s'agissait d'une cellule hydrogène-oxygène avec des électrodes de platine poreux et de l'acide sulfurique comme

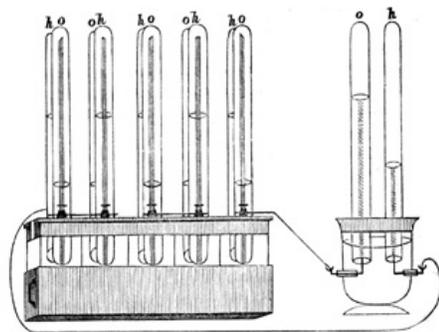


FIG. 1.3: Pile inventée par Grove [Gro39]

électrolyte. Un courant constant circule entre les électrodes en platine dont une extrémité est immergée dans un récipient d'acide sulfurique et l'autre dans des récipients scellés permettant de recueillir l'oxygène et de l'hydrogène. Les récipients scellés ont tenu l'eau comme les gaz, et il a noté que le niveau d'eau était monté dans les deux tubes tant que le courant circulait. En combinant plusieurs ensembles de ces électrodes dans un circuit en série, il a créé ce qu'il a appelé une " Pile de gaz " , nom donné en 1889 par Ludwig Mond et Carl Langer [Mos03] qui ont introduit les catalyseurs (platine) et ont perfectionné l'électrolyte.

À la fin du 19^{ème} siècle, Friedrich Wilhelm Ostwald, le physico-chimiste qui a fourni une grande partie de la compréhension théorique du fonctionnement des piles, en étudiant la relation entre la propriété physique et les réactions chimiques, a amélioré la pile de Grove. En 1893, il a déterminé expérimentalement les rôles interactifs entre différents composants de la pile : des électrodes, des électrolytes, oxydants et ions, etc. Ses travaux en chimie ont donné les bases de la pile à combustible aux chercheurs. Plus tard, il a également démontré que les piles étaient plus efficaces que le moteur à combustion interne [Sri06].

Dans les années 1930, un autre scientifique célèbre, Francis Thomas Bacon (figure 1.4) a entrepris de développer un dispositif opérationnel à partir de l'expérience de Grove. Il a amélioré le catalyseur platine onéreux d'une PAC hydrogène-oxygène en utilisant un électrolyte alcaline moins corrosif et une électrode moins coûteuse en nickel, appelé pile de combustible alcaline (AFC, Alkaline Fuel Cell). En 1959, Bacon et ses collègues ont abouti à la réalisation d'une pile à combustible hydrogène-oxygène d'une puissance de 5 KWs capable d'alimenter une machine. La température de fonctionnement allait de 40 °C à 200 °C. Plus tard, la pile de Bacon a été modifiée pour le projet spatial de Gemini de 1960 afin d'obtenir de l'électricité et de l'eau pour les voyages dans l'espace [SNCH00].

Pour que la pile à combustible soit aussi efficace que la pile de Bacon, l'électrolyte doit être tel que les ions le traversent aussi facilement qu'un flux d'électrons. On découvre plus tard que plusieurs cellules empilées permettent d'obtenir une puissance plus élevée.

La pile à combustible moderne avec une membrane (Électrolyte solide à membrane échangeuse de protons [PEM]) a permis l'application dans un milieu immobile ou mobile.



FIG. 1.4: Francis Thomas Bacon et la pile à combustible [Sri06]

La pile à combustible de type PEM est aussi appelé polymère solide pile à combustible en raison de l'utilisation de l'électrolyte solide. La première pile à combustible de type PEM représentée sur la figure 1.5, a été conçue par la compagnie General Electric au début des années 1960 grâce au travail de Thomas Grubb et Leonard Niedrach [GN60].

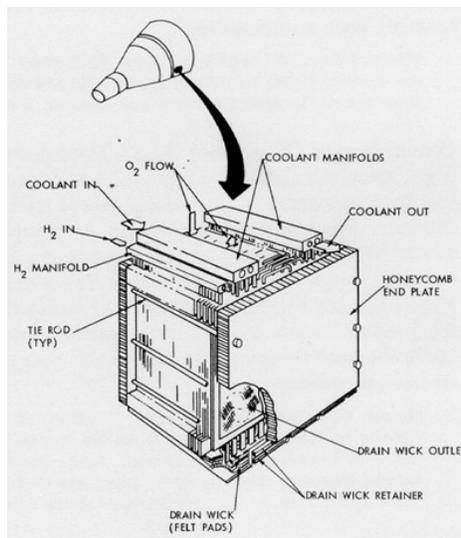


FIG. 1.5: Pile à combustible de PEM utilisée dans le programme Gemini [GHV69]

La technologie de la pile de PEM a servi dans le cadre du Projet-Gemini début 1960. En 1970, l'entreprise Dupont a mis au point, pour un autre usage, la membrane Nafion, qui a permis de relancer les piles à combustible de PEM. Un grand nombre de produits dérivés des modifications de Nafion et d'autres polymères (par exemple sulfonées polyetherketones ou SPEK) font leur apparition dans un large éventail de prototypes de la pile. Le développement des piles à combustible a largement suivi l'histoire des membranes.

Le très fort développement des recherches sur les piles à combustible de PEM dans les années 1970 résulte de la première crise du pétrole. En 1972, plus de 30 projets de recherche sont menés aux États-Unis sur le stockage de l'hydrogène embarqué ou sur sa fabrication embarquée.

Dans les années 1980, la technologie de la pile a commencé à être testée par les services publics et les constructeurs automobiles. Des avancées techniques ont été faites avec le développement du premier véhicule muni d'une pile à combustible de PEM en 1993 par la société canadienne Ballard [Can08].

Depuis, l'objet de la recherche sur les cellules de la pile est au niveau de l'application pratique : l'amélioration de la performance et de la durée de vie en utilisation.

1.3.2 Types de piles à combustible

La classification des piles à combustible se fait généralement selon la nature de l'électrolyte car celui-ci détermine, d'une part, la température à laquelle la pile fonctionne et, d'autre part, le type d'ion assurant la conduction ionique. La classification repose essentiellement sur :

- La nature de la membrane : liquide ou solide
- La température de fonctionnement de la pile : basse (60 °C-250 °C) ou haute (600 °C-1000 °C)

Pile à combustible	Electrolyte	Température °C	Combustible	Comburant	Domaine d'utilisation/ gamme de puissance
AFC	Alcaline KOH, NaOH	60-120	H_2 pur	Air ou O_2 pur	Transport spatial et véhicule 1-100kW
PEMFC	Membrane à échange de proton (Nafion)	60-120	H_2 pur	Air ou O_2 pur	Portable, transport, stationnaire 10kW-250kW
DMFC	Membrane à échange de proton (H_2SO_4)	60-120	CH_3OH	Air ou O_2 pur	Portable, transport 5kW
PAFC	Acide phosphorique H_3PO_4	150-220	$\text{H}_2, \text{CH}_4,$ CH_3OH	Air	Stationnaire 250W-11MW
MCFC	Mélange de Li_2CO_3 et de K_2CO_3	600-800	H_2, CH_4	Air	Stationnaire 1kW-25MW
SOFC	Oxyde de zirconium stabilisé ZrO_2 et Y_2O_3	750-1050	$\text{H}_2, \text{CH}_4,$ $\text{CH}_3\text{OH}, \text{CO}$	Air	Stationnaire 500W-10MW

TAB. 1.1: Types des piles à combustibles

Il existe 6 types de piles à combustible qui se différencient entre elles par leur température de fonctionnement et par l'électrolyte donnant son nom à la pile.

Les piles à basse température fonctionnent entre 60 °C-250 °C :

- la pile à combustible alcaline ou alkaline fuel cell (AFC)
- la pile à combustible à membrane échangeuse de proton (polymer electrolyte membrane fuel cell : PEMFC)
- la pile à combustible à méthanol direct (direct methanol fuel cell : DMFC)
- la pile à combustible à acide phosphorique (phosphoric acid fuel cell : PAFC)

Les piles à haute température fonctionnent entre 600 °C-1000 °C :

- la pile à combustible à oxyde solide (solid oxide fuel cell : SOFC)
- la pile à combustible à carbonates fondus (molten carbonate fuel cell : MCFC)

Dans le tableau 1.1, sont présentées les principales caractéristiques de ces différentes familles de piles ainsi que leurs domaines d'application.

1.4 Piles à combustible de type PEM

Parmi toutes les familles existantes, la pile à combustible de type PEM suscite de nombreux travaux de recherche et développement à travers le monde. La technologie évolue vite, d'autant plus qu'elle est poussée par la volonté des constructeurs de piles de proposer le plus rapidement possible des produits économiquement viables et fiables.

Nous ne nous intéresserons qu'à la pile à combustible de type PEM, parce que cette technologie semble effectivement être la plus proche de la commercialisation dans le domaine du transport. En comparaison avec d'autres types des piles à combustibles, la pile de PEM a plusieurs caractéristiques attractives [HCCP05] comme :

- Densité de puissance plus élevée ;
- Fort rendement de transformation d'énergie chimique en énergie électrique ;
- Basses températures, rapide et facile à démarrer ;
- Polymère solide ce qui réduit les soucis liés à la construction, au transport et à la fiabilité ;
- Plus compacte et légère : une meilleure densité de puissance volumique ;
- Modulaire donc facile à installer.

1.4.1 Principe de fonctionnement de la pile

Une pile à combustible fonctionne sur le principe inverse de l'électrolyse de l'eau. Des réactifs chimiques permettent la production d'énergie électrique. De manière générale, le combustible est de l'hydrogène et il se combine avec de l'oxygène pour former de l'eau selon une réaction chimique globale universellement connue :



La réaction électrochimique met en œuvre une membrane d'électrolyte solide conductrice de protons, et théoriquement imperméable aux gaz réactifs (Hydrogène et Oxygène). L'électrolyte est prise en sandwich entre deux électrodes (l'anode et la cathode). L'assemblage membrane d'électrodes (MEA, Membrane Electrode Assembly), est représentée schématiquement sur la figure 1.6.

Les électrodes mettent en jeu des catalyseurs pour activer la réaction d'un côté. À l'anode,

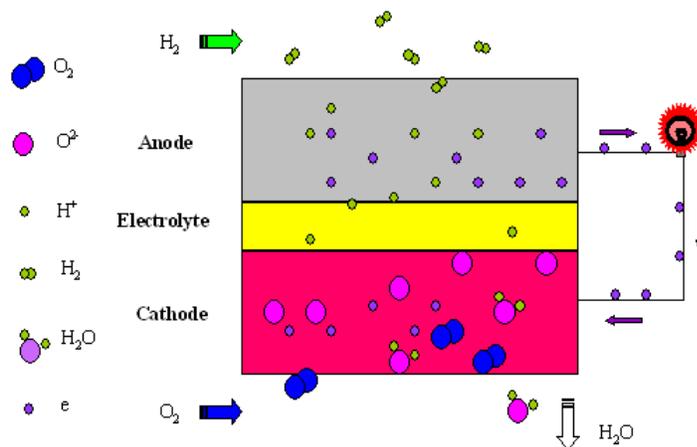


FIG. 1.6: Schéma d'une MEA relatif au principe de fonctionnement d'une pile de PEM

les ions et les électrons sont produits par l'oxydation du combustible (hydrogène), selon l'équation 1.2. Les électrons sont toujours transférés de l'anode à la cathode. Et puis, à la cathode, les électrons permettent la réduction de l'oxydant (oxygène de l'air) et la production des ions d'oxygènes comme l'équation 1.3. Les réactions électrochimiques peuvent être représentées de façon schématique par :

À l'anode :



À la cathode :



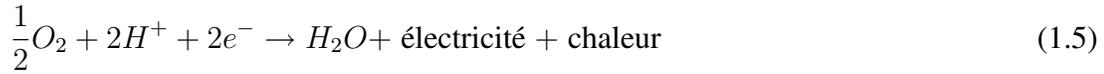
Comme l'électrolyte est un conducteur protonique, le matériau ne permet que le passage des ions. Les ions produits sur l'anode sont toujours transférés de l'anode à la cathode. Finalement, à la cathode, les ions se combinent avec les ions oxygènes pour donner des molécules d'eau. Les réactions électrochimiques peuvent être représentées de façon schématique par l'équation 1.4.

À la cathode :



Cette relation correspond à celle de la combustion de l'hydrogène et l'oxygène. L'énergie de la réaction est libérée sous forme de chaleur et sous forme d'électricité. La combustion se produit à l'aide d'un catalyseur en platine (Pt).

La réaction chimique globale de la pile est la suivante :



1.4.2 Performance actuelle de la pile

La pile à combustible convertit directement l'énergie chimique en énergie électrique. L'énergie chimique libérée peut être calculée par la variation de l'énergie libre de Gibbs (Δg_f), qui est la différence entre l'énergie des produits et l'énergie des réactifs. L'énergie libre de Gibbs est utilisée pour calculer l'énergie disponible pour effectuer le travail externe. La variation de l'énergie libre de Gibbs pour la pile à combustible est [LD03] :

$$\Delta g_f = (g_f)_{\text{des produits}} - (g_f)_{\text{des réactifs}} = (g_f)_{H_2O} - (g_f)_{H_2} - \frac{1}{2}(g_f)_{O_2} \quad (1.6)$$

La variation de l'énergie libre de Gibbs dépend de la température et de la pression comme :

$$\Delta g_f = \Delta g_f^0 - RT \ln \left[\frac{p_{H_2} p_{O_2}^{\frac{1}{2}}}{p_{H_2O}} \right] \quad (1.7)$$

où Δg_f^0 est la variation de l'énergie libre de Gibbs à la pression standard (1 bar) qui dépend de la température T exprimée en Kelvin. p_{H_2} , p_{O_2} et p_{H_2O} sont les pressions d'hydrogène, d'oxygène et de vapeur d'eau. R est la constante universelle des gaz ($8,31451 \text{ J.kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$). Notons que la valeur de Δg_f^0 est négative ($-237.2 \text{ kJ.mol}^{-1}$) car l'énergie est libérée par la réaction. S'il n'y avait pas de pertes dans la pile à combustible, toute l'énergie libre de Gibbs serait convertie en énergie électrique. Pour chaque môle d'hydrogène, deux électrons passent par le circuit électrique externe et le travail électrique est égal à la variation de l'énergie libre de Gibbs si le système est sans pertes, le travail électrique effectué est :

$$\Delta g_f = -nFE \quad (1.8)$$

où F est la constante de Faraday (96,485 Coulombs/mole) qui représente la charge électrique d'une môle d'électrons. n correspond au nombre de moles d'électrons de la réaction : pour l'hydrogène n = 2, mais pour d'autres carburant, cette valeur peut être plus élevée (n = 6 pour le méthanol, par exemple). E est la tension de circuit ouvert de la pile à combustible.

La tension ouverte de circuit de pile à combustible peut donc être écrite comme :

$$E = \frac{-\Delta g_f}{2F} = \frac{-\Delta g_f^0}{2F} + \frac{RT}{2F} \ln \left[\frac{p_{H_2} p_{O_2}^{\frac{1}{2}}}{p_{H_2O}} \right] \quad (1.9)$$

En pratique, le fonctionnement des piles à combustible s'accompagnent de pertes, une

partie de l'énergie chimique est convertie en chaleur. Le terme $-\Delta g_f/2F$ varie en fonction du point de fonctionnement. Il est égal à 1,229 volt à l'état standard (25 °C) et 1 bar. On peut exprimer la tension E sous la forme [BL05] :

$$E = 1.299 - 0.85 \times 10^{-3} \cdot (T - 298.15) + 4.3085 \times 10^{-5} T \cdot \left[\ln(p_{H_2}) + \frac{1}{2}(p_{O_2}) \right] \quad (1.10)$$

La tension dépend de la température, de la pression de l'hydrogène et de l'oxygène (Eq.1.10).

La courbe de polarisation de la pile de PEM est décrite comme un modèle statique ; proposé par de nombreux travaux ([CFC04] [Iqb03] et [LLA98]). En fonctionnement, lorsque la pile produit du courant, la tension est toujours inférieure à la tension à vide. En fait, des pertes de tension existent dans la pile à combustible à cause de différentes polarisations. Ces chutes de tension sont parfois appelées polarisations ou surtensions en référence à l'électrolyse (overpotential en anglais). Elles sont liées :

- aux vitesse de transferts de charges (on parle de polarisations d'activation),
- aux vitesse de transfert (d'alimentation) des réactifs (on parle de polarisations de concentration),
- aux résistances (on parle de polarisations d'ohm)

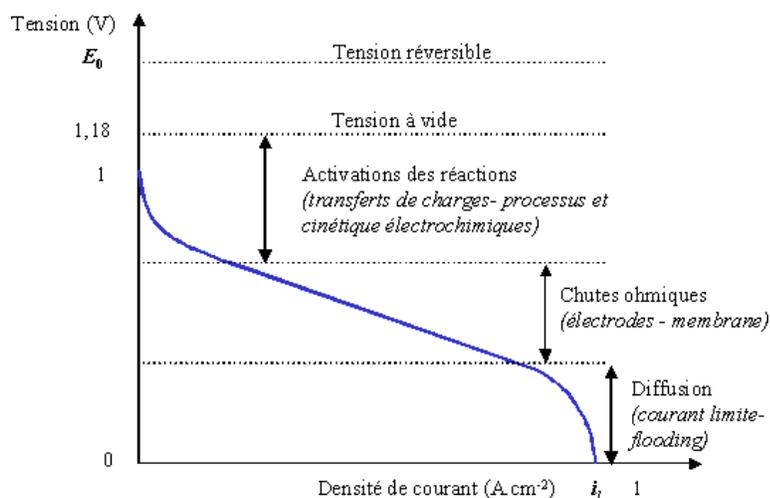


FIG. 1.7: Courbe de polarisation de la pile PEM

La tension V_{FC} est la somme de quatre termes : la tension à vide E , la surtension d'activation V_{act} (ou chute d'activation de la région 1), la surtension ohmique V_{ohm} (ou chute ohmique de la région 2) et la surtension de concentration V_{conc} (ou chute de concentration de la région 3) :

$$V_{FC} = E - V_{act} - V_{ohm} - V_{conc} \quad (1.11)$$

Les pertes ohmiques sont dûes à la résistance qu’opposent les électrodes et les plaques bipolaires à la circulation des électrons et l’électrolyte au passage des protons. La chute de tension ohmique correspondante s’écrit :

$$V_{ohm} = R_m(I_{FC} + i_n) \quad (1.12)$$

où R_m est la résistance totale de la pile à combustible, I_{FC} est le courant délivré par la pile à combustible, i_n est le courant interne permettant de tenir compte d’une éventuelle traversée de gaz et/ou d’électrons à travers l’électrolyte. Sur la figure 1.7, nous pouvons constater que la perte ohmique correspond à un grand domaine dans la courbe, la résistance a donc un rôle important dans la performance des piles. Ces pertes sont proportionnelles au courant électrique. La résistance totale comprend la résistance ohmique et la résistance de contact. La résistance ohmique est due à la résistance électrique du matériau par les composants eux-mêmes de la pile comme MEA, GDL et BPP. La résistance de contact est due à la résistance de la conductivité sur les interfaces entre les composants de la pile telles que MEA et GDL ou GDL et BPP. La résistance de contact peut conduire à une performance médiocre de la pile à combustible et produire de la chaleur susceptible de provoquer une fissure thermique. Les résistances existantes sont dues à la structure de la pile à combustible et au processus opératoire que nous allons présenter par la suite.

1.4.3 Structure de la pile à combustible

Comme mentionné dans la performance actuelle de la pile, la tension d’une seule cellule à l’état standard (25 °C et 1 bar) est d’environ 1.299 V. Par ailleurs, la tension d’une cellule sous le chargement est environ 0.6 V - 0.7 V. Par conséquent, il est nécessaire de disposer des cellules en série électrique, formant un “empilement” afin d’atteindre une tension suffisante. La tension d’un empilement est alors la somme de toutes les tensions des cellules. L’empilement de la pile peut satisfaire les besoins en tension de systèmes alimentés électriquement.

La structure de la pile de PEM est simple par rapport aux autres types de piles à combustibles parce que les composants de la pile sont solides et modulaires. Aujourd’hui, beaucoup de développeurs ont proposé leur conception des piles. Une structure typique de la pile de PEM a été introduite, la figure 1.8 montre un schéma de la structure d’un empilement de la pile PEM.

Un empilement de la pile est constitué de cellules unitaires, serrées par des plaques de serrage (PS) aux deux extrémités pour la conductivité électrique entre ces plaques.

Une cellule unitaire comprend 5 éléments : Un assemblage membrane des électrodes (MEA), deux couches de diffusion gazeuses (GDL) et deux plaques bipolaires (BPP). La plaque MEA est insérée entre deux GDLs en carbone poreuses enduites de PTFE [Pou63]

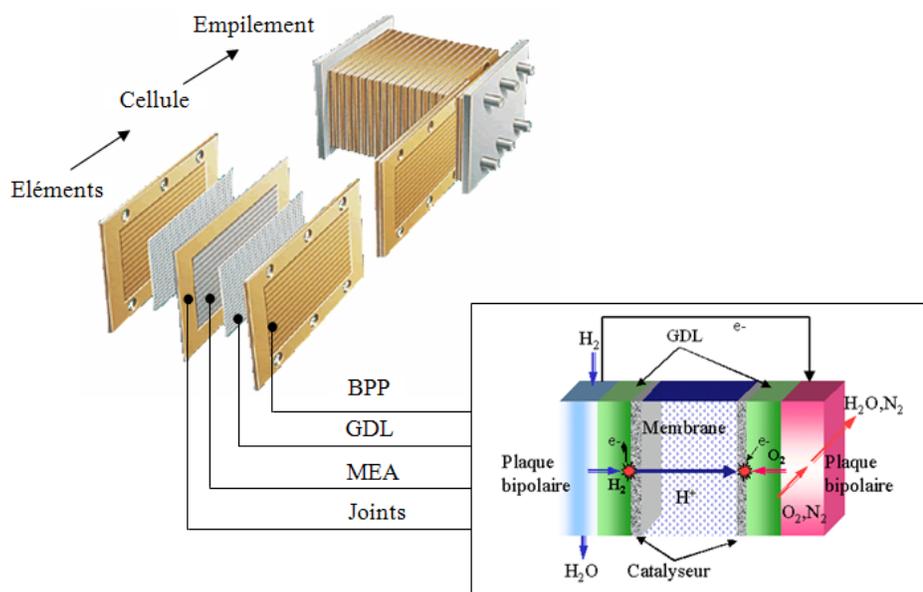


FIG. 1.8: Schéma de la structure d'un empilement de la pile de PEM

pour distribuer les combustibles sur les électrodes. Les GDLs et la plaque MEA sont encore pris en sandwich entre deux BPPs en graphite, sur lesquelles la distribution des canaux gravés et des dents est alternée.

La réalisation complète d'une telle structure comprend 4 étapes principales comme :

- l'alimentation des gaz réactifs ;
- la réaction électrochimique ;
- la conductivité ionique par l'électrolyte et conductivité électrique de l'anode à la cathode ;
- l'évacuation de l'eau produite.

1.4.4 Assemblage de la pile à combustible

L'assemblage de la pile à combustible est indiqué dans la figure 1.9 et la figure 1.10.

1.4.5 Le processus opératoire de la PAC

Le schéma 1.11 montre le processus opératoire dans un empilement de la pile avec deux cellules comme exemple. Des gaz réactifs (hydrogène et oxygène) alimentent la pile à combustible parallèlement, ils circulent dans les canaux gravés de la BPP, puis traversent la GDL et atteignent le MEA où la réaction électrochimique se passe conformément à ce qui est décrit dans le principe de la pile à combustible de PEM (figure 1.6).

Comme dans l'équation 1.2, l'oxydation de l'hydrogène produit les ions et les électrons à l'anode du MEA à l'aide du catalyseur. Le transfert ionique est en sens inverse par rapport à

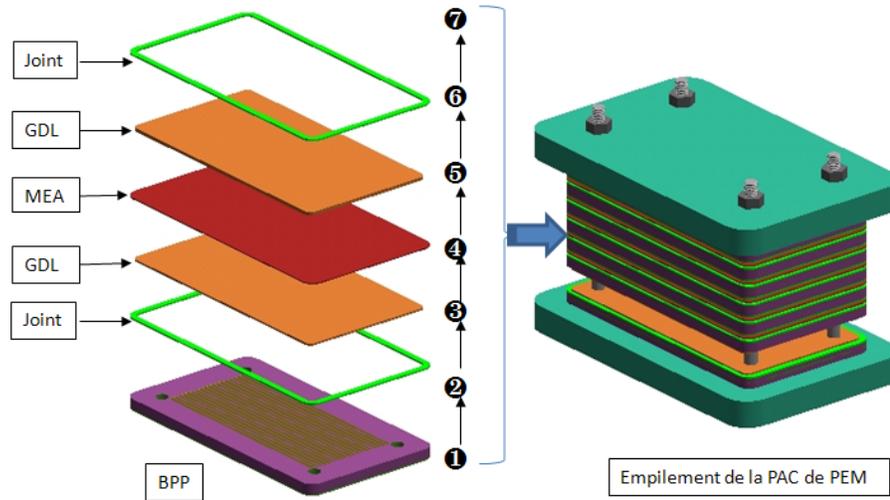


FIG. 1.9: Assemblage d'une cellule de la PAC de PEM avec tous les composants

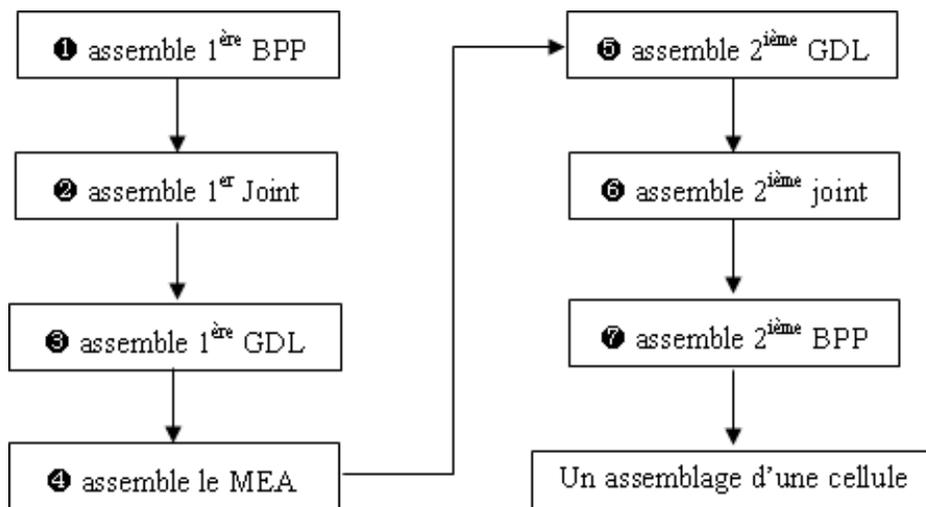


FIG. 1.10: Processus de l'assemblage d'une cellule de la PAC

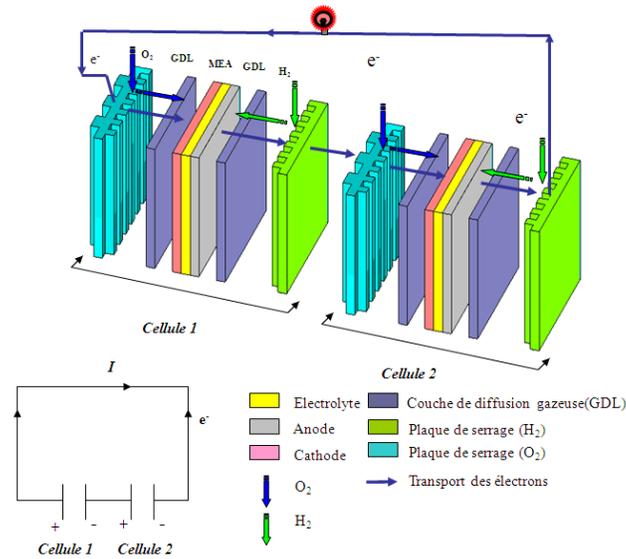


FIG. 1.11: Schéma du processus opératoire de la réaction de la pile

la conductivité électrique dans le schéma 1.11. Les ions passent par la membrane échangeuse de l'anode à la cathode. En revanche, les électrons doivent parcourir une longue distance, traverser les GDLs, BPPs de l'anode d'un MEA à l'autre cathode du MEA suivant. Ainsi, la conductivité électrique se passe entre les plaques de l'empilement de la PAC d'un côté à l'autre.

La résistance électrique est inévitable pendant la conductivité électrique, ce qui conduit à une perte de performance comme on le présente dans la courbe de polarisation (figure 1.7). La résistance des plaques et la résistance entre les plaques ont des influences importantes sur la performance de la PAC. Pour les ions, la résistance est déterminée par l'épaisseur du MEA. Une épaisseur mince facilite la conductivité des ions et réduit donc la résistance. La conductivité électrique est due non seulement aux résistances des plaques eux-mêmes, mais aussi aux résistances de contact aux interfaces entre GDL et MEA, GDL et BPP. Les caractéristiques mécaniques aux interfaces de la PAC sont donc importantes.

Tout comme une bonne conductivité des électrons, l'alimentation efficace des gaz est aussi importante. Il est nécessaire d'alimenter les gaz réactifs de manière continue pour une production continue des électrons de la pile. Par ailleurs, la demande des gaz réactifs est forte pour un niveau élevé en courant électrique. L'alimentation uniforme des gaz offre un temps suffisant de la réaction. L'alimentation des gaz réactifs est réalisée par canaux gravés sur la BPP et par porosité de la GDL. D'une part, la configuration, la forme et la taille des canaux des BPPs sont fondamentales dans l'alimentation des gaz réactifs ; et d'autre part, la porosité

des GDLs est importante dans le transfert des gaz réactifs vers les MEAs pour la réaction électrochimique.

1.4.6 Composants de la PAC, leurs rôles et leurs caractéristiques

La réalisation de la PAC met en œuvre un grand nombre de composants et de couches multiples dans la structure lamellaire des piles à combustibles. Ainsi une connaissance approfondie des composants, leurs rôles et leurs caractéristiques mécaniques est fortement demandée pour l'amélioration de la performance de la pile.

1.4.6.1 Assemblage membrane des électrodes (MEA)

Sur la figure 1.12, un profil de MEA est représenté. Il se compose d'une membrane échangeuse (ou membrane d'électrolyte de polymère) solide serrée entre deux électrodes, l'anode et la cathode. Les électrodes fournissent l'interface entre les gaz réactifs et l'électrolyte. Elles doivent permettre le passage des gaz réactifs humides, fournir une surface de réaction où les gaz entrent en contact avec l'électrolyte, être conductrices aux électrons libres et assurer le passage des ions vers la cathode.

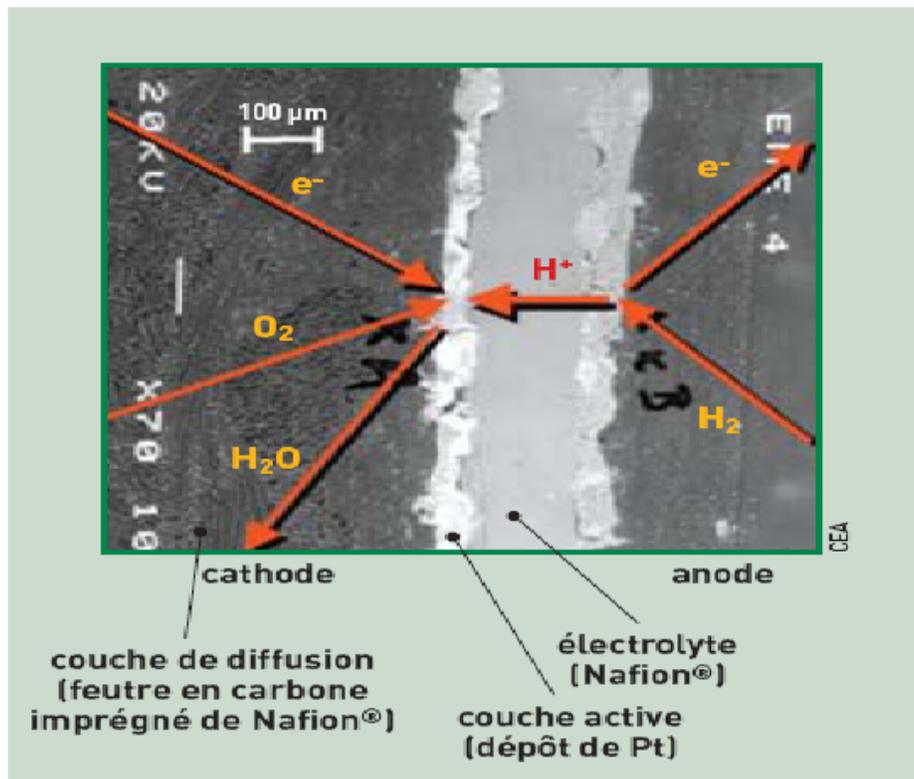


FIG. 1.12: Profil de la MEA (électrolyte, anode et cathode) et GDL [CEA06]

Un catalyseur à base de platine est intégré entre membrane et électrodes. Le catalyseur

améliore la réaction chimique en fournissant les sites de réaction mais n'est pas consommé dans le procédé. Le platine est typiquement utilisé en raison de sa haute activité, sa stabilité et sa conductivité électrique.

La membrane d'électrolyte est très mince, son épaisseur varie de 50 à 200 microns, dans le but de conduire les protons de l'anode vers la cathode tout en étant un excellent isolant des électrons. Son épaisseur est issue d'un compromis entre le gain en performance et une certaine épaisseur permettant de séparer les gaz hydrogène et oxygène, sans quoi, les deux demi-réactions d'oxydoréduction seraient alors localisées au même endroit et aucun électron ne circulerait par le circuit externe.

Enfin, la membrane très mince et fragile doit tenir mécaniquement car étant au cœur de la pile, son endommagement peut diminuer la durée de vie des piles. D'ailleurs dans un empilement de la pile, assemblé en série électrique, un dysfonctionnement d'un composant d'une cellule peut conduire aux dysfonctionnements de tout l'empilement de la pile.

Un certain nombre de membranes commerciales sont disponibles, dont la série de *Nafion*[®] [DuP06] de perfluorosulfonic acid (PFSA) d'utilisation très large, produit par Dupont, dont les caractéristiques sont indiquées dans le tableau 1.2.

TAB. 1.2: Caractéristiques des MEAs de la série de Nafion

Propriétés	Unit	Nafion-112	Nafion-113	Nafion-115	Nafion-117
Épaisseur	mm	0.051	0.091	0.127	0.183
Densité	g/cm^3	1.0	1.9	2.5	3.6
Conductivité	S/cm	0.083	0.083	0.083	0.083
Limite tensile maximale					
50%RH	Mpa	43	43	43	43
23	Mpa	34	34	34	34
100	Mpa	25	25	25	25

1.4.6.2 Couches de diffusion gazeuse (GDL)

La figure 1.12 montre que la GDL s'est imprégnée du MEA, pour fournir une plus grande interface possible et jouer un triple transport des gaz réactifs, des électrons et de l'eau produite sur toute la surface de l'électrode.

Cette couche conductrice et poreuse est classiquement en tissu, mousse, hydrophobe (non-mouillable) et non-corrosive. Les couches poreuses sont là d'une part pour assurer une répartition uniforme des gaz de canaux sur l'ensemble des électrodes, d'autre part, pour évacuer l'eau produite à la cathode durant la réaction électrochimique. Des particules hydrophobes de polytétrafluoroéthylène (PTFE) sont ajoutées aux couches poreuses, afin d'éviter l'accumulation d'eau durant la réaction électrochimique. Afin de mieux connaître la structure d'une

GDL, des images par microscope électronique à balayage (SEM) ont été capturées sur la couche de fibre carbone de la GDL (figure 1.13).

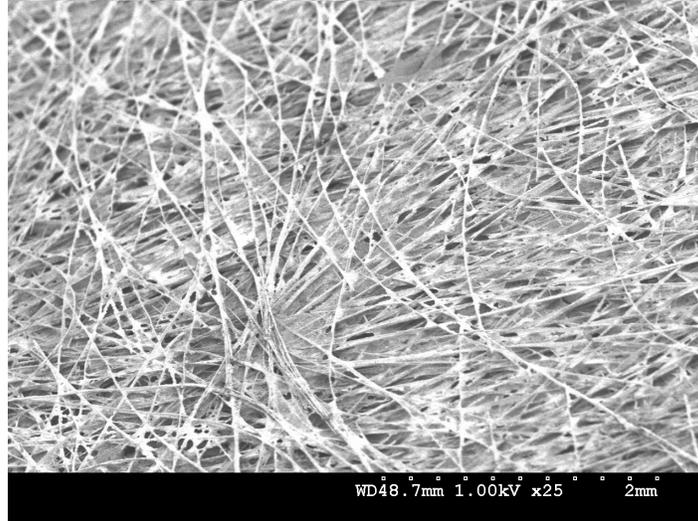


FIG. 1.13: Image SEM des couches fibres carbonées de la GDL [Mac09]

L'épaisseur des couches est de quelques centaines de microns pour faciliter la conductivité des électrons de l'anode à la cathode. En fait, l'utilisation des GDLs est venue de TOARY au Japon, SGL en Allemagne et BALLARD au Canada, etc.. Etant donné le coût de la GDL, la série de TGP-H de TORAY est prise en compte dans nos études. Les caractéristiques des GDLs de la série de TGP-H de TORAY sont indiqués dans le tableau 1.3 [Jap08].

TAB. 1.3: Tableau des caractéristiques de GDL de la série de TGP-H

Propriétés	Unit	TGP-H-030	TGP-H-060	TGP-H-090	TGP-H-120
Épaisseur	mm	0.11	0.192	0.28	0.377
Densité	g/cm^3	0.40	0.44	0.44	0.45
Porosité	%	80	78	78	78
Rugosité	μm	8	8	8	8
Perméabilité du gaz	ml·mm/ ($cm^2 \cdot hr \cdot mmAq$)	2500	1900	1700	1500
Résistivité électrique					
Par plat	$m\Omega cm$	80	80	80	80
Dans plat	$m\Omega cm$	5.8	5.8	5.6	4.7
Limite en flexion	Mpa	40	40	40	40
Module en flexion	Gpa	8	10	10	10

1.4.6.3 Plaques bipolaires (BPP)

Les plaques bipolaires sont comme une frontière entre deux cellules de la pile et interviennent dans leur tenue mécanique. Elles constituent 80% du poids d'un empilement de

la pile. L'utilisation des plaques nécessite un usinage de petits canaux et de petits dents alternés à la surface des plaques bipolaires afin d'approvisionner les gaz et de transférer les électrons. Les plaques peuvent prendre des formes diverses et variées. On trouve ainsi les configurations parallèles, serpentins, parallèle-serpentins, grille, etc. comme indiqué dans la figure 1.14.

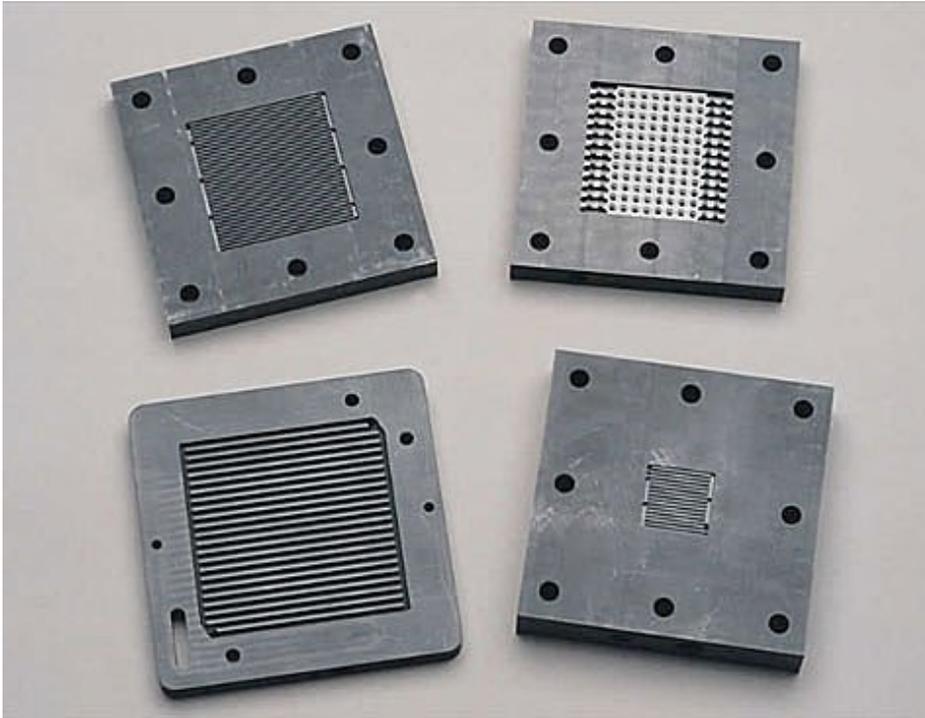


FIG. 1.14: Profils des plaques bipolaires commerciales [Men00]

Elles ont plusieurs rôles comme :

- l'approvisionnement des gaz (hydrogène et oxygène) à travers les microcanaux sur les interfaces réactives,
- la tenue mécanique des cellules élémentaires,
- la conductivité des électrons à travers les microdents de l'anode d'une cellule à la cathode de la cellule suivante,
- évacuer les gaz non consommés et l'eau produite par la réaction électrochimique.

La plupart des plaques bipolaires sont généralement réalisées dans un matériau à base de carbone (graphite). La structure graphite a une masse volumique de 2g/cm^3 . Les plaques bipolaires doivent être minces avec des zones de contacts uniformes avec les GDLs afin de réduire la résistance de contact électrique et thermique. Sans diminuer la performance des piles, il est intéressant de minimiser l'épaisseur de la BPP pour abaisser le volume, le poids et le coût de la procédure de fabrication [Hoo03]. Dans une cellule unitaire, la tenue mécanique est réalisée en serrant les MEA, GDL et BPP ensemble, en créant des zones de contact permettant la conductivité du courant électrique par les interfaces, en particulier,

entre la GDL et les petits dents de la BPP. La configuration des dents est donc un paramètre important pour la performance de la PAC. Les canaux sont significatifs pour l'alimentation des gaz réactifs et les dents de la BPP en contact avec la GDL déterminent la conductivité des électrons produits.

Des caractéristiques des bipolaires et des paramètres sont indiqués dans le tableau suivant [All09].

TAB. 1.4: Caractéristiques des BPPs de la SGL

Propriétés	Unit	BPP4	PPG86
Densité	g/cm^3	1.98	1.85
Rugosité	μm	4	4
Conductivité			
Par plat	s/cm	210	500
Dans plat	$m\Omega cm$	80	180
Limite flexion	Mpa	53.1	40
Limite compression	Mpa	76	76
Limite traction	Mpa	25.1	25.1
Température d'opération	$^{\circ}C$	180	80

1.4.6.4 Joints d'étanchéité

La parfaite étanchéité est une condition indispensable pour le bon fonctionnement de la pile à combustible. Des joints d'étanchéité doivent être interposés périphériquement entre les BPPs pour éviter toute perte de fluides possible. En effet, la perte des gaz peut réduire la puissance de la pile et la rencontre directe de l'oxygène et l'hydrogène conduit à une explosion dans la pile [AUW05][HSK07]. Les joints d'étanchéité correspondent à la taille de la BPP et sont conçus avec une dimension intérieure de la taille de la GDL. L'épaisseur des joints doit correspondre aux épaisseurs de MEA et GDL comme indiqué dans la figure 1.15.

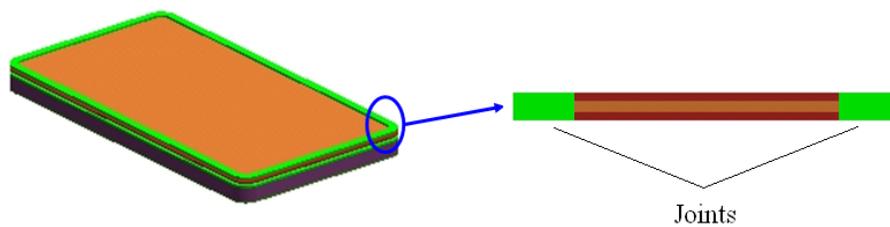


FIG. 1.15: Schéma de la localisation des joints dans une cellule de la PAC

Une compression suffisante des joints est nécessaire pour assurer une parfaite étanchéité

de la PAC. En effet, le niveau minimum de compression des joints est donné par :

$$\varepsilon = \frac{\Delta d}{d_0} \times 100\% \quad (1.13)$$

où ε est le ratio de compression des joints, d_0 l'épaisseur de la section et Δd est le niveau de compression des joints. Dans une étude sur l'assemblage d'un empilement de pile à combustible, la condition indispensable à soumettre est la parfaite étanchéité afin d'éviter toutes pertes des gaz au sein de chaque cellule. En fait, le niveau de compression des joints est de 10% à 30% [Fri01].

1.5 Étude mécanique de la structure avec des interfaces multi-contacts

Comme le procédé de la réaction dans une structure lamellaire, le contact sur les interfaces entre les couches multiples des piles est une condition indispensable pour garantir la conductivité électrique. La structure de la pile peut être regardée comme une structure multi-contacts. La figure 1.16 montre un schéma permettant de localiser les interfaces multi-contacts dans une cellule unitaire. Des contacts multiples existent sur les interfaces comme (1) : contact entre MEA et GDL, (2) : contact entre BPP et GDL ou plus précisément entre GDL et les petits dents de BPP.

Comme l'indique la courbe de la polarisation, la pile n'est pas parfaitement utilisée. Elle a des pertes de performance et des dégradations irréversibles du cœur de la pile qui font chuter la durée de vie. La perte de la performance est principalement due à la résistance de contact dans la PAC et à la chute de l'alimentation gazeuse dans la pile [ZLS⁺06] [BSP⁺08] [ZL06] [KFT08].

Le transfert des électrons est influencé par les effets mécaniques aux interfaces. Les recherches pour améliorer la performance de la pile à combustible ont porté sur la préparation de la membrane, l'efficacité du catalyseur, le matériel de la BPP, etc.. Mais des études récentes montrent que des effets mécaniques jouent un rôle important sur la performance de la pile [NHM08] [MABHAJ07].

1.5.1 Force de serrage

Des études récentes ont constaté que presque 59% de la perte de puissance est dû à la résistance de contact entre la BPP et la GDL [RA09]. En effet, la résistance de contact dépend fortement d'un parfait état du contact entre les composants de la PAC. Pour cette raison, une étude de contact de la structure multi-contacts de la PAC paraît nécessaire.

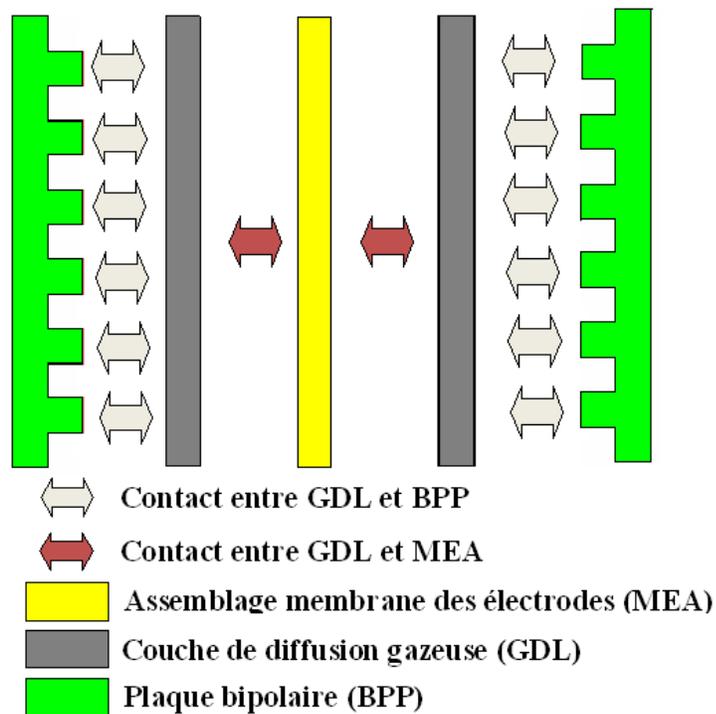


FIG. 1.16: Schéma d'une cellule unitaire représente des interfaces multi-contacts

Un paramètre principal qui influence l'état de contact est la force de serrage par boulons tirants. Cette force permet de maintenir les éléments de l'empilement en contact les uns avec les autres pendant l'assemblage. Une force élevée conduit à l'augmentation de la conductivité et de la densité de puissance de la PAC [CHWC07]. Lee *et al.* [LHVZM99] ont fait des expériences avec trois types de GDLs : TORAY, ELAT, une combinaison de TORAY et CARBEL, sous trois types de forces de serrage, 100, 125 and 150 in.lbf (1 in.lbf= 0.113 N.M). Avec ces trois forces de serrage, ils ont constaté que chaque GDL a sa propre force de serrage optimale pour acquérir une puissance maximale de la pile. Les résultats montrent que la performance de la pile est influencée par la force de serrage. Ge *et al.* [GHL06] ont trouvé qu'il existe une force de serrage optimale donnant la meilleure performance des piles possible : si la force de serrage est inférieure à la force optimale et qu'elle augmente, la performance augmente. Chang *et al.* [CHWC07] ont trouvé que l'influence de la force de serrage sur la performance des piles est principalement dû au changement de la résistance de l'interface entre GDL et BPP. Une force élevée peut diminuer la résistance de contact aux interfaces de la PAC. De plus, Wang *et al.* [WSZ08] ont étudié l'influence de la force de serrage uniforme sur la performance de la PAC. Dans son expérience, ils ont trouvé que la performance de la PAC avec une force répartie uniformément est meilleure qu'avec une force conventionnelle. Mishra *et al.* [MYP05] et Wang *et al.* [WST03] ont développé une relation entre la résistance de contact et la force de serrage, ils ont constaté une diminution de la résistance de contact lorsqu'on augmente la force de serrage.

Les modélisations théoriques étant complexes, des expériences ont permis de découvrir certains liens entre les efforts appliqués à la pile et l'efficacité de celle-ci. Cependant les expériences sont souvent coûteuses et n'offrent qu'un résultat global sur la pile, ne permettant pas d'identifier clairement les interactions des phénomènes mécaniques aux interfaces sur la performance de la PAC. Des modélisations numériques ont donc été abordées.

D'après les expériences de Mishra *et al.* [MYP04], Mishra *et al.* [MYP05] et Wang *et al.* [WST03], Zhou *et al.* [ZWM06] ont évalué la résistance de contact par rapport à l'aire de contact et à la pression de contact entre la BPP et la GDL par une équation semi-empirique. Dans leur modèle 2D, la méthode des éléments finis est utilisée afin d'étudier l'influence de différentes configurations de la BPP sur la résistance aux interfaces entre la GDL et la BPP. Zhang *et al.* [ZLS⁺06] ont étudié la résistance de contact par une expérience, ils ont obtenu une équation précise pour évaluer la résistance de contact. Ils ont ensuite développé un modèle numérique 3D afin d'étudier l'influence de différentes forces de serrages sur la résistance de contact aux interfaces. La simulation montre que la résistance de contact est liée à l'aire de contact par l'équation suivante :

$$R_{BPP/GDL} = \frac{A}{A_{contact}} + \frac{B}{C} \quad (1.14)$$

où, $R_{BPP/GDL}$ est la résistance de contact entre la BPP et la GDL, $A_{contact}$ est l'aire de contact, A , B sont les facteurs constants obtenus par l'expérience, et C est le chargement extérieur. L'équation de Zhang *et al.* [ZLS⁺06] montre que l'aire de contact est un paramètre important dans l'évaluation de la résistance de contact dans la PAC. Ainsi toute étude permettant de connaître précisément l'aire de contact permettra de bien évaluer la résistance de contact.

1.5.2 Porosité de la GDL

Dans la pile à combustible, la GDL en papier carbone est classiquement en tissu et mousse avec une porosité initiale élevée afin de faciliter l'alimentation du gaz pour la réaction électrochimique au sein de la PAC. La capacité des GDLs à transporter les gaz réactifs est mesurée par la perméabilité. Des études sur la perméabilité de la plaque GDL [Sch97] [IML04] [WBB⁺04] [KH98] [APT02] [UFS⁺96] [JSB⁺00] ont montré l'importance de son influence sur la performance de la PAC. Feser *et al.* [FPA06] et Gostick *et al.* [GFP⁺06] ont mesuré la perméabilité de la GDL comme une fonction de la compression et ont constaté qu'elle diminuait avec l'augmentation de la force de serrage. Un calcul général de la perméabilité des gaz est basé sur la loi de Darcy avec un faible nombre de Reynolds.

$$k = K \cdot v = \frac{q \cdot \delta}{A \cdot \Delta p} \quad (1.15)$$

où q est le flux de fuite gazeuse ; v est l'épaisseur de la couche ; A est l'aire de la couche ; Δp est la différence de pression ; δ est la vélocité gazeuse, K est la perméabilité gazeuse de la couche et k est la perméabilité gazeuse spécifique. Mais la loi de Darcy est une loi idéale, une relation entre la perméabilité et la propriétés des pores fut proposée par Kozeny et modifiée par Carman. L'équation résultante est connue sous le nom de Kozeny-Carman (KC), elle est une prédiction plus précise, fonction de la porosité et de la taille du filament des fibres. Depuis sa première apparition, cette équation a pris plusieurs formes, celle qui est couramment utilisée [FPA06] est :

$$k = C \frac{\varphi^3}{(1 - \varphi)^2} \quad (1.16)$$

où k est le coefficient de perméabilité ; C est un coefficient constant ; φ est la porosité. C'est l'une des relations très largement utilisée dans l'étude des milieux poreux. Mais pour atteindre une estimation précise, l'équation de KC demande une évaluation d'un facteur constant C , qui doit être mesuré de façon expérimental. Un modèle plus précis et robuste a été créé par Tomadakis *et al.* [TR05] dans une étude des milieux poreux, il offre une équation pour mesurer la perméabilité :

$$k = r^2 \frac{\varphi}{8 \ln^2 \varphi} \frac{(\varphi - \varepsilon_p)^{\alpha+2}}{(1 - \varepsilon_p)^\alpha [(\alpha + 1)\varphi - \varepsilon_p]^2} \quad (1.17)$$

où la perméabilité k est comme une fonction de la porosité φ , du diamètre du filament de la GDL r , de l'orientation du filament α et d'un coefficient constant ε_p . Dans les couches, des filaments sont positionnés aléatoirement (figure 1.17).

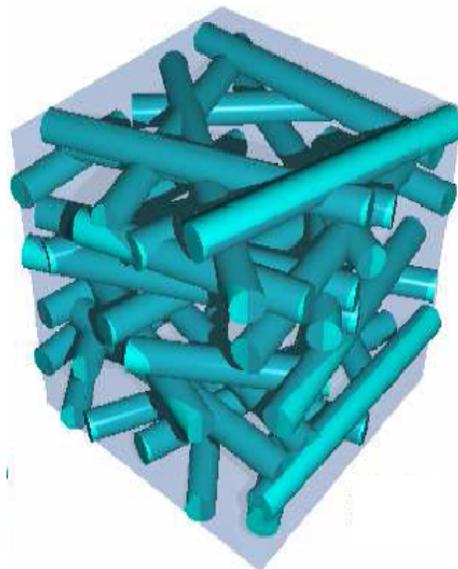


FIG. 1.17: Profile de la plaque de la GDL [TR05]

Le tableau 1.5 donne les paramètres concernant les filaments de la plaque GDL utilisés dans le modèle de Tomadakis.

TAB. 1.5: Paramètres du modèle de Tomadakis

r (μm)	ε_p	α
3.5	0.11	0.785

Selon l'équation 1.17, la proportion entre la perméabilité et la porosité de la plaque GDL peut être décrite par une courbe (figure 1.18). qui montre que la perméabilité de la plaque GDL augmente avec la porosité de la plaque.

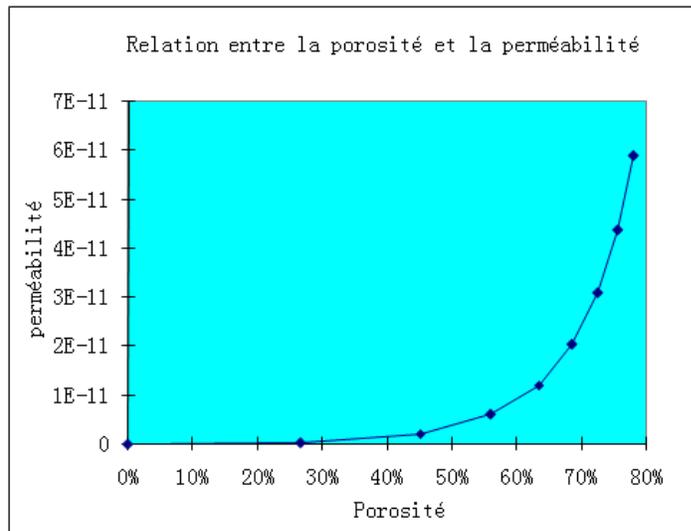


FIG. 1.18: Relation "perméabilité-porosité"

Actuellement, la plupart des études dans ce domaine fait l'hypothèse simplificatrice d'une porosité de la GDL constante. Cependant, ceci ne peut pas refléter l'importance de la porosité de la GDL sur la performance des piles. Tout changement de la morphologie de la GDL peut conduire à une influence importante sur les performances des piles à travers le changement de la porosité de la GDL.

La porosité est un facteur permettant d'évaluer l'espace au transport des fluides. C'est le pourcentage de l'espace poreux par unité de volume total. La porosité est définie comme :

$$\varphi = \frac{V_p}{V_t} \quad (1.18)$$

où V_p est le volume poreux et V_t est le volume total. Le volume solide comme le volume des fibres de la GDL est $V_s = V_t - V_p$. Si la plaque GDL est déformée sous une force extérieure, la porosité de la GDL φ après la déformation par rapport à la porosité initiale φ_0

devient :

$$\varphi = \frac{(V_{t_0} - \Delta V_t) - (V_{s_0} - \Delta V_s)}{V_{t_0} - \Delta V_t} \quad (1.19)$$

où V_{t_0} est la valeur initiale du volume total, ΔV_t est sa variation ; V_{s_0} est la valeur initiale du volume solide, ΔV_s est sa variation.

$$\varphi = \frac{\varphi_0 - \varepsilon_v + \Delta V_s/V_{t_0}}{1 - \varepsilon_v} = \frac{\varphi_0 - \varepsilon_v + \varepsilon_s}{1 - \varepsilon_v} \quad (1.20)$$

avec,

$$\varphi_0 = \frac{V_{t_0} - V_{s_0}}{V_{t_0}}, \varepsilon_v = \frac{\Delta V_t}{V_{t_0}} = \frac{\varepsilon_x + \varepsilon_y + \varepsilon_z}{V_{t_0}}, \varepsilon_s = \frac{\Delta V_s}{V_{t_0}} \quad (1.21)$$

Si le changement du volume solide des fibres peut être négligée, c'est-à-dire, $\Delta V_s = 0$, l'équation 1.21 devient :

$$\varphi = \frac{\varphi_0 - \varepsilon_v}{1 - \varepsilon_v} = 1 + \frac{\varphi_0 - 1}{1 - \varepsilon_v} \quad (1.22)$$

La porosité initiale φ_0 de la GDL, est déterminée par les caractéristiques du matériau.

L'équation 1.22 montre que la porosité de la GDL décroît lors de l'augmentation de la déformation de la GDL. Une déformation élevée de la GDL conduit à une baisse de la porosité et de la perméabilité de la GDL qui doit être étudiée.

Ainsi, la force de serrage influence non seulement la résistance de contact aux interfaces mais aussi la porosité de la GDL de deux façons contraires. Une force de serrage forte peut conduire à une diminution de la résistance de contact ce qui facilite le transfert des électrons produits, mais conduit à une baisse de la porosité de la GDL, ce qui réduit l'alimentation du gaz réactifs. Ainsi, l'aire de contact et la déformation de la GDL doivent être considérées ensemble. La configuration de dents de la BPP de la PAC est aussi un des paramètres importants influençant l'aspect mécanique aux interfaces, comme l'aire de contact et la déformation de la GDL.

Afin d'améliorer la durabilité de la PAC, il s'avère aussi nécessaire de renforcer la connaissance des effets mécaniques de la pile comme la contrainte, la déformation découlant pendant l'assemblage de la structure de la pile. Des effets mécaniques de la PAC ont été étudiés par Mehta *et al.* [MC03] qui ont considéré que la PAC était une structure dans laquelle des phénomènes multi-physiques étaient couplés. La possibilité de la fissure mécanique existe et a été considérée par Weber *et al.* [WN04]. Lee *et al.* [LHH05] ont étudié la distribution de la contrainte d'une seule cellule soumise à la force de serrage. La contrainte obtenue sur le MEA a été comparée avec des résultats expérimentaux. Kusoglu *et al.* [KKS⁺06][KKS⁺07] ont mis en évidence l'évolution de la contrainte du MEA sous différentes conditions de

l'humidité et la température. Borgrachev *et al.* [BGGM08] ont développé un modèle 2D symétrique avec une seule cellule. Les résultats montrent que la plasticité peut apparaître sur le MEA si la force de serrage est trop importante.

1.5.3 Optimisation des composants

Un grand nombre d'études portent sur l'optimisation de la conception des composants individuels comme la BPP, la MEA et la GDL de la PAC pour une meilleure performance.

La BPP est un composant essentiel de la PAC, car elle fournit l'alimentation du gaz et la collecte des électrons. Elle permet aussi la tenue mécanique des cellules de la pile. La configuration des dents et des canaux de la BPP est importante dans la performance de la PAC. À l'origine, la conception de la BPP avait des canaux droits parallèles comme cela a été présenté par Pellegrini *et al.* [PS80]. Cette conception avec canaux droits avait un certain nombre de désavantages, conduisant à l'accumulation d'eau et à la chute de pression insuffisante dans des canaux, résultant de la distribution de gaz réactifs pauvres. Pour y remédier, Watkins *et al.* [WDE91][WDE92] ont développé un canal continu, en serpentin. Ce canal a une meilleure gestion de l'eau grâce à l'amélioration de la chute de pression. Aussi cette distribution des canaux a permis une augmentation en puissance de la PAC de 50%. Cette disposition a aussi été modifiée pour inclure des circuits parallèles de refroidissement [FCP⁺96] et les circuits en serpentin segmenté permettant une meilleure distribution des gaz réactifs [CHW97]. Récemment, Shimpalee *et al.* ont établi un modèle fluide [SLVZNN01] afin d'étudier l'influence de différentes longueurs du canal et de différentes largeurs de canal/dent sur la performance de la PAC [SLVZ06] [SGVZ07]. Ils ont trouvé qu'un facteur de canal/dent optimal est plus sensible sur la performance de la PAC que la longueur de canal. La configuration de la BPP est importante dans la distribution de la pression aux interfaces. Un canal droit de la BPP peut conduire à une fissure aux interfaces [SLC⁺08].

La conception de la MEA se base sur les transferts de gaz et électrons et le transfert efficace de protons vers les réactions électrochimiques [LM04]. C'est difficile d'optimiser la MEA tout seule parce que les transferts dépendent aussi des effets mécaniques. Paganin *et al.* [PTG95] ont présenté une étude sur l'analyse de trois épaisseurs de la membrane Nafion. Les trois membranes analysées étaient Nafion 112, 115 et 117 avec des épaisseurs respectives de 50, 125 et 175 μm . Ils ont constaté que la plus mince membrane Nafion 112 fournit la meilleure performance de la PAC, offrant non seulement une plus faible résistance et mais aussi une augmentation de la densité de courant.

La GDL joue aussi un grand rôle dans la pile, puisqu'elle alimente la MEA en gaz réactifs par les canaux et qu'elle assure le transfert des électrons. La capacité de la GDL pour transporter efficacement des gaz est généralement quantifiée par la perméabilité. Bien qu'il existe un certain nombre d'études qui ont mesuré la perméabilité GDL par la simulation nu-

mérique, tel que Gostick *et al.* [GFP⁺06] et Feser *et al.* [FPA06], une simulation simple a été présentée pour observer la performance de la PAC en fonction de la perméabilité. Williams *et al.* [WBB⁺04] ont étudié certains effets de la variation de la perméabilité de la GDL et ont constaté une faible proportionnalité entre la perméabilité et la performance de la PAC. Cependant, ces études n'ont pas évoqué d'interactions entre des effets mécaniques et la perméabilité de la GDL.

En effets, la pile à combustible est une structure multi-contacts dans laquelle des phénomènes multi-physiques sont couplés. Des interactions de ces phénomènes influencent la performance de la PAC et sa durée de vie. Il est donc important d'étudier en détails les effets mécaniques pour mieux connaître les interactions au niveau de la pile.

1.6 Interactions des effets mécaniques aux interfaces d'une PAC

La pile à combustible de PEM doit être étudiée à partir des conditions opératoires et de la composition de la pile (forme des plaques bipolaires, des canaux, des dents et des épaisseur de membrane...). L'amélioration des performances des piles à combustibles doit passer par une meilleure compréhension des différentes interactions des composants mécaniques dans un empilement des piles.

La figure 1.19 représente un schéma d'une cellule unitaire qui permet de localiser les différentes interactions des effets mécaniques principaux au sein d'une pile à combustible. Ces effets mécaniques sont décrits en allant de l'extérieur vers l'intérieur : force de serrage par boulons tirants, contact sur les interfaces entre composants, déformation de GDL, endommagement mécanique de MEA et pression fluide intérieure des canaux de BPP.

1.6.1 Forces de serrage

Pour le fonctionnement normal de la pile à combustible, l'assemblage des composants empilés est réalisé en vissant l'empilement par des boulons tirants. Ces forces de serrage s'exercent en allant de deux extrémités d'un empilement vers l'intérieur de l'empilement de la PAC. Des composants de la PAC sont maintenus en contact aux interfaces traversées par le courant électrique. En même temps, ces forces de serrage compressent les joints d'étanchéité entre plaques bipolaires et évitent les fuites de gaz réactifs. Ainsi la force de serrage permet d'avoir :

- une étanchéité de la pile à combustible ;
- une tenue mécanique sur les composants de la PAC ;
- une production du contact aux interfaces de la PAC.

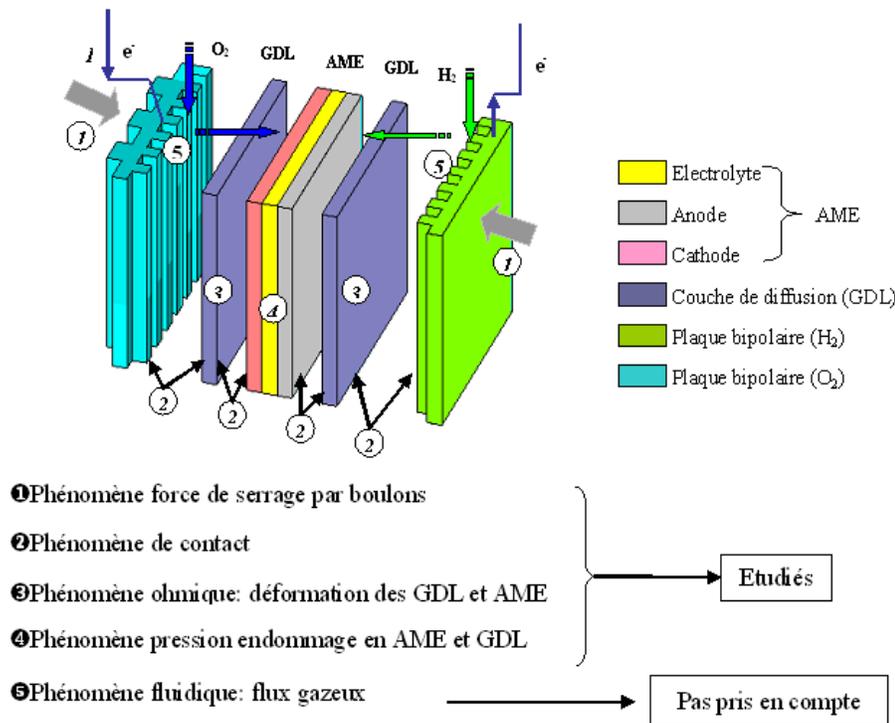


FIG. 1.19: Schéma des phénomènes mécaniques existants dans une pile de PEM

La force de serrage permet tout d'abord l'étanchéité des piles. Une parfaite étanchéité est une condition indispensable pour le fonctionnement normal de la pile. En effet, la perte des gaz peut réduire la puissance de la pile et la rencontre directe de l'oxygène et l'hydrogène conduit à une explosion dans la pile [AUW05][HSK07].

Sous l'action de la force de serrage par boulons tirants, les MEAs, GDLs et BPPs sont assemblés pour former une cellule. Les composants rentrent en contact aux interfaces. À l'interface BPP/GDL, ce sont plus exactement les dents de la BPP qui sont en contact avec la GDL. Dans notre étude, le contact aux interfaces est une condition essentielle pour garantir le transfert des électrons.

Au niveau des efforts, la cellule d'une pile est en équilibre, la force de contact sur les interfaces est égale à la précharge extérieure. Dans nos études, les matériaux sont élastiques, l'augmentation de la précharge extérieure peut conduire à l'augmentation de la force de contact et modifier l'état de contact sur les interfaces. Dans certains cas, la force de contact peut provoquer des fissures mécaniques sur les interfaces.

1.6.2 Déformation de la GDL

Les composants de la pile sont élastiques, l'augmentation de la force de serrage conduit à l'augmentation des déformations des composants. À contrainte équivalente, la GDL va se

déformer plus que la BPP et la MEA car son module de Young est petit [JL09]. La GDL est en papier carbone, avec une porosité élevée afin de faciliter le transfert des gaz. Pour une GDL de type de TGP-H120, la porosité initiale est de $\varphi_0 = 78\%$ [All09]. Pendant l'assemblage de la pile, la plaque GDL est déformée, ce qui peut nuire au passage des gaz réactifs et diminuer la performance de la PAC. Chang *et al.* [CHWC07] ont étudié qu'une force de serrage élevée peut abaisser l'épaisseur, la porosité et la perméabilité de la plaque GDL et bloquer le transfert des gaz et des électrons, diminuant ainsi la performance de la pile.

1.6.3 Contact

Le contact est un phénomène non linéaire, complexe et s'appliquant sur des zones pas toujours évidentes à déterminer, sa prise en compte entre composants de la PAC est importante afin d'étudier le comportement mécanique aux interfaces. Il est évident que les effets mécaniques sur les interfaces comme la force de contact joue un rôle fondamental dans le comportement de la structure.

La résistance de contact permet à un courant électrique de traverser deux composants dissociables. Une petite résistance peut favoriser le transfert des électrons au sein des piles. En effet, la résistance de contact dépend fortement d'un parfait état du contact entre les composants de la PAC. Une séparation de contact peut fortement diminuer la densité de puissance de la PAC. Il est donc très important d'étudier le contact au sein d'une pile afin de pouvoir diminuer la résistance de contact dans la PAC.

1.6.4 Endommagement mécanique

L'accroissement de la force de contact conduit à l'augmentation des contraintes mécaniques au sein de la pile. Une force de contact élevée conduit de façon certaine à l'augmentation des risques d'endommagement mécanique des composants. Les MEAs et GDLs sont des membranes très minces et fragiles, situées au cœur de la PAC, leur endommagement peut diminuer la vie des PACs. Ainsi l'endommagement comme la fracture et la fissure des MEAs ou GDLs doivent être considérées et évitées. Ainsi, les contraintes au sein de la MEA et de la GDL doivent être étudiées pour éviter tout endommagement mécanique.

Su *et al.* [SLC⁺08] ont constaté qu'une fissure était apparue sur GDL à cause d'une concentration de contraintes (Figure 1.20) aux coins des dents de la BPP. Stanic *et al.* [SH04] ont étudié l'endommagement mécanique d'un MEA et ont trouvé que l'endommagement est souvent dû au "Pinhole" (figure 1.21). Ceci apparaît comme une pointe où la contrainte est maximale.

Il paraît donc intéressant d'étudier et d'optimiser la distribution des contraintes dans les composants MEAs et GDLs en vue d'obtenir une performance maximale.

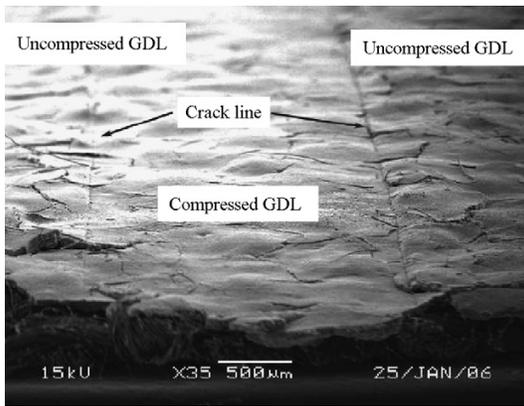
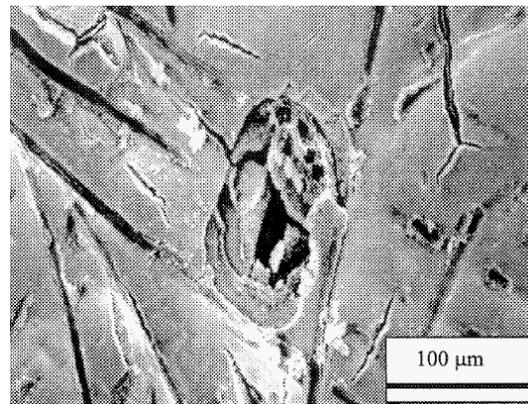
FIG. 1.20: Fissure sur GDL [SLC⁺08]

FIG. 1.21: 'Pinhole' sur MEA [SH04]

1.6.5 Pression fluidique

L'alimentation de gaz réactifs dans une pile se fait de la façon suivante : les gaz circulent dans les canaux, qui sont gravés sur les plaques bipolaires. La conception des canaux est particulièrement importante pour assurer une répartition homogène des gaz sur toute la surface des électrodes. Les gaz réactifs sont mis sous pression afin d'atteindre le cœur d'une cellule pour la réaction électrochimique. À cause de la mécanique des fluides, la pression partielle du gaz est généralement inférieure à la pression totale des gaz à cause de la perte des pressions. Dans ce travail, ces pressions mécaniques des fluides n'ont pas été pris en compte parce que les pressions totales et le gradient de pression sont supposées faibles par rapport aux charges mécaniques issues des boulons. Nous avons intentionnellement négligé les effets des fluides dans notre étude.

1.7 Conclusions

Au début de ce premier chapitre, nous avons présenté le problème énergétique dans le monde, l'énergie d'hydrogène est une énergie renouvelable pour le futur, la pile à combustible permet de transformer efficacement de l'énergie chimique en énergie électrique. De toute la famille des piles à combustibles, la pile à combustible avec la membrane échangeuse des protons (PEM) est la plus adaptée à une application dans le transport. Les effets mécaniques existants dans la pile à combustible influencent la performance de la PAC et sa durée de vie. Il est donc important d'étudier ces effets. La modélisation numérique est une approche efficace afin d'étudier les multi-contacts aux interfaces de la PAC.

Chapitre 2

Méthodes numériques et résolution du problème de contact

2.1 Introduction

Dans le cadre de cette thèse, la modélisation de la pile nécessite une phase de calcul des forces de contact dans le cas de contacts multiples et simultanés avec frottement. Dans ce chapitre, nous allons nous intéresser à la résolution du problème du contact. Pour cela, nous procéderons comme suit :

- dans la première partie, nous effectuerons un rappel de la méthode des éléments finis,
- dans deuxième partie, nous effectuerons un rappel des notions de cinématique du contact,
- dans la troisième partie, nous aborderons la mise en œuvre de la résolution numérique des méthodes les plus utilisées pour intégrer la résolution du contact avec la méthode des éléments finis.

2.2 Méthode des éléments finis (MEF)

Le problème de contact est non linéaire, à cause des zones de contact inconnues, et de la loi de frottement. Depuis longtemps, les chercheurs ont consacré des travaux aux problèmes de contact. Les notions du contact élastique ont été établies à la fin du 19^e siècle par Hertz et d'autres chercheurs. La théorie de Hertz est utilisée pour résoudre le problème de contact élastique, dans un cas géométrique simple. Le problème de contact est non linéaire de par la non connaissance des zones de contact mais aussi par les lois de frottement aux frontières en contact. De plus, l'évolution du contact dépend de l'histoire du changement. Il est donc impossible de résoudre les problèmes de configuration complexe par une solution analytique.

L'apparition de la méthode des éléments finis a permis de nouveaux développements et de nouvelles applications en mécanique du contact. Les études effectuées à partir d'élé-

ments finis offrent certaines voies de résolution des phénomènes mécaniques aux interfaces de contact.

La méthode des éléments finis s'applique pour l'analyse des déformations et des contraintes dans des structures mécaniques. Elle est aussi utilisée dans des problèmes de conduction thermique, d'écoulement de fluides et de flux gazeux ou magnétiques, etc.. Plus généralement, cette technique permet de résoudre des équations différentielles en temps et aux dérivées partielles en espace avec conditions aux limites [Nes04].

Pour une étude plus approfondie de la méthode des éléments finis, nous recommandons les cours de Garrigues [Gar99] et de Hunter [HP98] et les ouvrages de références de Zienkiewicz [ZWHT84], de Bathe [Bat82] et de Hughes [Hug87].

2.2.1 Principe

La méthode des éléments finis est un outil de discrétisation. Elle permet de diviser un milieu continu complexe (un objet) en un certain nombre fini d'éléments géométriques (un maillage) relativement simples appelés éléments finis, comme des tétraèdres ou des hexaèdres. Les champs physiques sont interpolés sur chaque élément en fonction de leur valeur en certains points nommés nœuds. Dans les cas les plus simples ces nœuds sont situés aux sommets de l'élément. A chaque élément est défini un système d'équations obtenu à partir d'une formulation intégrale variationnelle des équations. Puis un processus d'assemblage prenant en compte la connectivité entre tous les éléments mène à la construction d'un ensemble d'équations à résoudre. La résolution de ce système d'équations, en tenant compte des conditions imposées aux limites du système, permet d'obtenir une approximation continue des problèmes [CB97].

2.2.2 Maillage

Les éléments finis peuvent être de différentes formes : en dimension 2 les formes les plus couramment utilisées sont les triangles ou les quadrilatères. En dimension 3, ceux sont les tétraèdres ou les hexaèdres. Il est possible d'utiliser différents types d'éléments dans un même maillage mais cela complique significativement l'écriture du système. Dans la majorité des cas, un seul type d'éléments est utilisé pour un maillage donné, (figure 2.1).

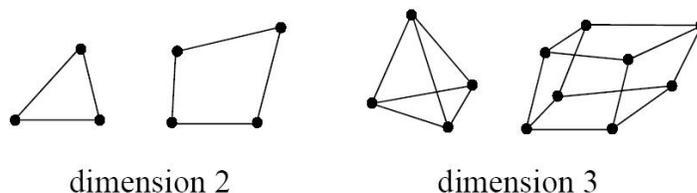


FIG. 2.1: Exemples d'éléments finis surfaciques et volumiques.

Plus le maillage est fin, plus le calcul est précis, mais coûteux. Un compromis s'impose donc entre la finesse de la discrétisation des objets et le coût du calcul. Nous pouvons aussi réaliser un maillage grossier dans certaines régions et plus fin dans d'autres, en fonction de l'importance des déformations et afin d'augmenter la précision là où le calcul s'en fait ressentir. Ainsi nous pouvons adapter la densité d'éléments selon les nécessités de la simulation.

Un avantage supplémentaire est apporté par cette représentation locale des propriétés mécaniques. Comme les paramètres mécaniques sont associés à chaque élément d'un maillage, il est possible de construire des modèles hétérogènes composés de différentes structures imbriquées et de propriétés mécaniques différentes.

À chaque élément fini est associé un certain nombre de nœuds. Les nœuds forment l'ensemble discret des points du système en lesquels les propriétés physiques sont calculées. L'ensemble des nœuds ne se limite pas forcément aux sommets des éléments finis. Il est possible de définir des nœuds additionnels, par exemple un quadrilatère à 8 nœuds ou un tétraèdre à 10 nœuds (figure 2.2) afin d'assurer une meilleure continuité à la frontière entre les sous domaines et d'approcher au mieux la solution cherchée.

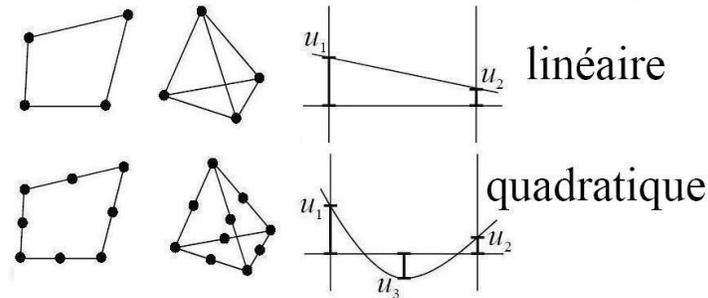


FIG. 2.2: Interpolation linéaire et quadratique

2.2.3 Fonctions d'interpolation

Le choix du nombre de nœuds de chaque élément est lié au choix d'un schéma d'interpolation. Le principe de la méthode des éléments finis étant d'interpoler les champs physiques en tout point du solide en fonction de leur valeur aux nœuds, diverses fonctions d'interpolation peuvent être choisies. La plus simple est une fonction d'interpolation linéaire. Dans ce cas les seuls nœuds utilisés sont les sommets des éléments finis. En choisissant une fonction d'interpolation quadratique, un nœud additionnel est nécessaire sur chacune des arêtes. Ce cas correspond au cas du quadrilatère à 8 nœuds ou au tétraèdre à 10 nœuds (figure 2.2). La précision du résultat est améliorée lorsqu'une fonction d'interpolation de degré plus élevé est utilisée. Il est possible d'augmenter librement le degré de la fonction d'interpolation mais en pratique des fonctions de degré supérieur à 3 sont rarement utilisées, étant donné la lourdeur des calculs que cela implique.

Il est aussi possible de construire un espace de fonctions d'interpolation directement sur chaque maille réelle, mais généralement, nous procédons en deux temps : nous construisons d'abord un espace de fonctions d'interpolation N_i sur une maille de référence standard topologiquement équivalente à la maille réelle, puis nous le transformons pour qu'il devienne un espace de fonctions d'interpolation sur les mailles réelles. $J(3 \times 3)$ est la matrice jacobienne qui correspond à cette transformation. Ce procédé a l'avantage de faire gagner du temps de calcul (figure 2.3).

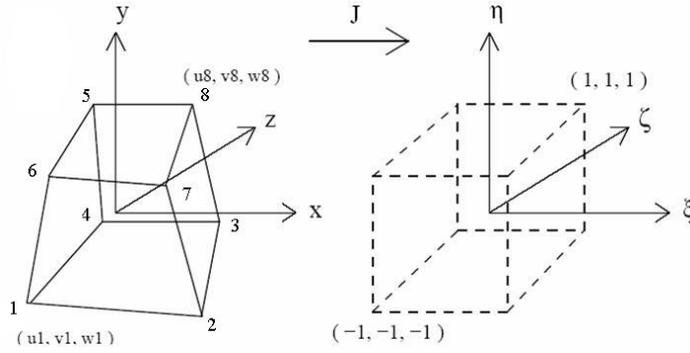


FIG. 2.3: La transformation iso-paramétrique d'un élément cubique.

La formule suivante représente un exemple de fonctions d'interpolations utilisées dans le cas d'un élément cubique de 8 sommets défini dans un espace local (ξ, η, ζ) :

$$\left\{ \begin{array}{l} N_1 = \frac{1}{8} (1 - \xi)(1 - \eta)(1 - \zeta) \\ N_2 = \frac{1}{8} (1 + \xi)(1 - \eta)(1 - \zeta) \\ N_3 = \frac{1}{8} (1 + \xi)(1 + \eta)(1 - \zeta) \\ N_4 = \frac{1}{8} (1 - \xi)(1 + \eta)(1 - \zeta) \\ N_5 = \frac{1}{8} (1 - \xi)(1 - \eta)(1 + \zeta) \\ N_6 = \frac{1}{8} (1 + \xi)(1 - \eta)(1 + \zeta) \\ N_7 = \frac{1}{8} (1 + \xi)(1 + \eta)(1 + \zeta) \\ N_8 = \frac{1}{8} (1 - \xi)(1 + \eta)(1 + \zeta) \end{array} \right.$$

Pour un élément fini e composé de s nœuds, on en déduit la relation :

$$\mathbf{u} = \mathbf{N}_e \mathbf{u}^{(e)} \quad (2.1)$$

$$\text{avec : } \mathbf{N}_e = \left[\begin{array}{ccc|ccc|c|ccc} N_1 & 0 & 0 & N_2 & 0 & 0 & \dots & N_s & 0 & 0 \\ 0 & N_1 & 0 & 0 & N_2 & 0 & \dots & 0 & N_s & 0 \\ 0 & 0 & N_1 & 0 & 0 & N_2 & \dots & 0 & 0 & N_s \end{array} \right]$$

$$\mathbf{u}^{(e)} = \left\{ \mathbf{u}_1^{(e)} \quad \mathbf{u}_2^{(e)} \quad \dots \quad \mathbf{u}_s^{(e)} \right\}^T, \quad \mathbf{u}_i^{(e)} = \{u_i \quad v_i \quad w_i\}^T$$

$\mathbf{u}_i^{(e)}$ représente le vecteur déplacement du nœud i appartenant à l'élément e , de même on peut lui associer son vecteur position $\mathbf{x}_i^{(e)} = \{x_i, y_i, z_i\}^T$.

2.2.4 Assemblage

Dans un maillage d'éléments finis, un nœud donné appartient en général à plusieurs éléments et la déformation de chacun d'entre eux induit une force en ce nœud. Le calcul des forces se fait ainsi élément par élément avec des systèmes locaux. Les sommets communs sont des nœuds de connexion qui permettent l'assemblage de tous les systèmes locaux en un grand système global contenant les équations de tous les nœuds. Cela nécessite une renumérotation des nœuds à travers une table de connectivité. Pour l'ensemble des n nœuds qui discrétisent l'objet déformable S , on définit le vecteur de position global $\mathbf{X} = \{x_1, x_2, x_3, \dots, x_n\}^T$ et le vecteur de déplacement globale $\mathbf{U} = [u_1, u_2, u_3, \dots, u_n]^T$. Le processus d'assemblage est relativement coûteux numériquement. Dans ce qui suit nous aborderons uniquement la formulation de modèles physiques simples qui peuvent être résolus de manière rapide par la méthode des éléments finis.

2.2.4.1 Élasticité linéaire

Un matériau élastique se déforme sous l'action de certaines forces et regagne son état de repos, en passant par le même chemin, une fois que ces forces disparaissent. Il restitue ainsi toute l'énergie qu'il avait absorbée. L'élasticité est de plus linéaire lorsqu'il y a proportionnalité entre déformations et efforts imposés. Ce cas particulier n'est constaté qu'en petites déformations (voir figure 2.4). En général, on considère qu'un matériau élastique n'est plus linéaire lorsque les déplacements élastiques dépassent 10% de la taille de l'objet considéré. Au delà, il faut utiliser la théorie de la MMC (Mécanique des Milieux Continus) en grandes déformations [PDA01]. Pour plus de détails sur les concepts abordés dans ce paragraphe, nous conseillons les ouvrages de François *et al.* [FPZ90], de Fung [Fun65] et de Spencer [Spe84]; de Ciarlet [Cia88], [Cia90], [Cia97], de Oden [Ode67] et de Ogden [Ogd84].

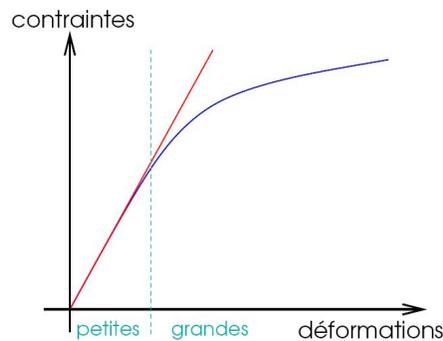


FIG. 2.4: Approximation linéaire d'une loi de comportement

Nous allons aborder dans la suite quelques éléments de la théorie de la MMC en élasticité linéaire. Les petites déformations peuvent être écrites d'une manière condensée comme :

$$\varepsilon = \begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} \\ \varepsilon_{yy} \\ \varepsilon_{zz} \\ 2\varepsilon_{xy} \\ 2\varepsilon_{xz} \\ 2\varepsilon_{yz} \end{pmatrix} \quad \text{avec} \quad \begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} = \frac{\partial u}{\partial x} \quad , \quad \varepsilon_{xy} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \\ \varepsilon_{yy} = \frac{\partial v}{\partial y} \quad , \quad \varepsilon_{xz} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) \\ \varepsilon_{zz} = \frac{\partial w}{\partial z} \quad , \quad \varepsilon_{yz} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right) \end{pmatrix}$$

On définit ainsi un opérateur de dérivation \mathbf{S} entre les petites déformations ε et les déplacements $\mathbf{u} = \{u, v, w\}^T$ tel que :

$$\varepsilon = \mathbf{S}\mathbf{u} \tag{2.2}$$

$$\text{avec } \mathbf{S} = \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\partial}{\partial y} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\partial}{\partial z} \\ \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial x} & 0 \\ \frac{\partial}{\partial z} & 0 & \frac{\partial}{\partial x} \\ 0 & \frac{\partial}{\partial z} & \frac{\partial}{\partial y} \end{bmatrix}$$

Loi de Hooke : La loi de Hooke est une loi de comportement du matériau qui lie les petites déformations ε aux contraintes σ et qui s'applique aux matériaux isotropes (propriétés du matériau identiques dans toutes les directions), homogènes. Cette loi est linéaire et peut se mettre sous la forme suivante :

$$\sigma = \mathbf{D}\varepsilon \tag{2.3}$$

avec

$$\mathbf{D} = \begin{bmatrix} \lambda + 2\mu & \lambda & \lambda & 0 & 0 & 0 \\ \lambda & \lambda + 2\mu & \lambda & 0 & 0 & 0 \\ \lambda & \lambda & \lambda + 2\mu & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \mu & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \mu & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \mu \end{bmatrix}$$

\mathbf{D} est le tenseur d'élasticité avec μ le coefficient de résistance au cisaillement et λ le coefficient de compression, appelés également coefficients de Lamé et qui sont définis par :

$$\mu = \frac{E}{2(1 + \nu)} \quad \lambda = \frac{\nu E}{(1 - 2\nu)(1 + \nu)}$$

où E et ν sont deux paramètres caractéristiques du matériau appelés respectivement module de Young (exprimé en MPa) et coefficient de Poisson (sans unité). E caractérise la raideur du matériau, il peut varier de 0.02 Mpa pour des tissus mous à plus de 200 000 Mpa pour des aciers. ν caractérise la compressibilité du matériau, sa valeur est comprise entre -1.0 et 0.5. $\nu=0.5$ pour un matériau dit «incompressible».

Dans le cas d'un modèle statique ou quasi-statique, on ne prend pas en compte les forces inertielles liées aux accélérations. La méthode des éléments finis basée sur la théorie de la MMC en élasticité linéaire permet de construire une matrice de rigidité constante.

Les équations du modèle statique sont obtenues par application du principe des travaux virtuels appliqué à chaque élément :

$$\delta W_{int}^{(e)} + \delta W_{ext}^{(e)} = 0 \quad (2.4)$$

avec

$$\delta W_{int}^{(e)} = - \int_{\Omega^e} \delta \boldsymbol{\varepsilon}^T \boldsymbol{\sigma} \, dv$$

$$\delta W_{ext}^{(e)} = \delta \mathbf{u}^{(e)T} \mathbf{f}_{ext}^{(e)}$$

En utilisant les relations 2.1, 2.2, 2.3, on obtient :

$$\delta W_{int}^{(e)} = -\delta \mathbf{u}^{(e)T} \mathbf{K}^{(e)} \mathbf{u}^{(e)} = \delta \mathbf{u}^{(e)T} \mathbf{f}_{int}^{(e)} \quad (2.5)$$

avec

$$\mathbf{K}^{(e)} = \int_{\Omega^e} \mathbf{B}^T \mathbf{D} \mathbf{B} \, dv, \quad \mathbf{B} = \mathbf{S} \mathbf{N}_{(e)}$$

En utilisant l'équation 2.4, la relation 2.5 et par application du principe des travaux virtuels, on obtient les équations d'équilibre :

$$\mathbf{K}^{(e)} \mathbf{u}^{(e)} = \mathbf{f}_{ext}^{(e)} \quad (2.6)$$

Le calcul de la matrice de raideur $\mathbf{K}^{(e)}$ est élémentaire lorsque les fonctions de forme sont linéaires car la matrice \mathbf{B} est constante et indépendante des variables d'intégration. Dans le cas contraire, le calcul de $\mathbf{K}^{(e)}$ est discrétisé en des points particuliers appelés «points de Gauss» [Zie77]. Les matrice $\mathbf{K}^{(e)}$ sont indépendantes de $\mathbf{u}^{(e)}$ et donc des déformations.

La table de connectivité associée au maillage, nous permet de construire une matrice de raideur globale $K(3n \times 3n)$ où n représente le nombre de nœud du maillage. Le système linéaire global s'écrit alors sous la forme matricielle :

$$\mathbf{K} \mathbf{U} = \mathbf{F}_{ext} \quad (2.7)$$

Cette matrice \mathbf{K} née du regroupement des $\mathbf{K}^{(e)}$ est creuse puisque un nœud ne peut appartenir qu'à un nombre très limité d'éléments. Elle est par contre symétrique, définie positive et il est possible de la mettre sous la forme d'une matrice bande afin d'appliquer des méthodes optimisées de résolution du système d'équations 2.7.

2.2.4.2 Élasticité non linéaire

Lorsque les déplacements élastiques dépassent 10% de la taille de l'objet considéré, on est en élasticité non linéaire. Dans ce cas les déformations ne peuvent plus être représentées par le tenseur de Cauchy ε . Il faut alors considérer le tenseur de Green-Lagrange \mathbf{E} :

$$\mathbf{E} = \varepsilon + \frac{1}{2} (\nabla \mathbf{u}^T \nabla \mathbf{u}) \quad (2.8)$$

∇ représente l'opérateur gradient.

Le tenseur de Green-Lagrange est invariant en rotation, il permet donc de prendre en compte les grandes rotations sans qu'il soit nécessaire de faire appel à des approches corotationnelles. Dans le cadre de la méthode des éléments finis, le tenseur de Green-Lagrange inclut formellement les termes linéaires ($\mathbf{B}_L \mathbf{u}$) et non linéaires par rapport aux déplacements

nodaux ($\mathbf{B}_{NL} \mathbf{u}$).

$$\mathbf{E} = \left(\mathbf{B}_L + \frac{1}{2} \mathbf{B}_{NL}(\mathbf{u}) \right) \mathbf{u} \quad (2.9)$$

Dans le cas des lois élastiques ou hyper-élastiques, il existe un potentiel élastique W (ou densité d'énergie) qui est une fonction scalaire du tenseur des déformations. Les contraintes représentent la dérivée par rapport aux déformations de cette fonction scalaire. Dans le cas particulier des modèles isotropes de Saint-Venant-Kirchhoff, on obtient une relation entre contraintes et déformations similaire à la loi de Hooke :

$$\mathbf{S} = \mathbf{D}\mathbf{E} \quad (2.10)$$

\mathbf{D} est le tenseur d'élasticité et \mathbf{S} le second tenseur des contraintes de Piola-Kirchhoff. Comme dans le cas linéaire, par application du principe des travaux virtuels, on obtient le vecteur des forces internes :

$$\mathbf{f}_{int}^{(e)} = - \int_{\Omega^e} (\mathbf{B}_L + \mathbf{B}_{NL}(\mathbf{u}))^T \mathbf{S} dV \quad (2.11)$$

On peut montrer qu'après calculs de dérivation [FPH06, FVFP06], on obtient :

$$\mathbf{K}^{(e)} = \frac{\partial \mathbf{f}_{int}^{(e)}}{\partial \mathbf{u}} = \mathbf{K}_e^{(e)} + \mathbf{K}_\sigma^{(e)} + \mathbf{K}_u^{(e)} \quad (2.12)$$

avec

$$\mathbf{K}_e^{(e)} = \int_{V_0} \mathbf{B}_L^T \mathbf{D} \mathbf{B}_L dV \quad (2.13)$$

$$\mathbf{K}_\sigma^{(e)} = \int_{V_0} \mathbf{S} \frac{\partial \mathbf{B}_{NL}}{\partial \mathbf{u}} dV \quad (2.14)$$

$$\mathbf{K}_u^{(e)} = \int_{V_0} (\mathbf{B}_L^T \mathbf{D} \mathbf{B}_{NL} + \mathbf{B}_{NL}^T \mathbf{D} \mathbf{B}_L + \mathbf{B}_{NL}^T \mathbf{D} \mathbf{B}_{NL}) dV \quad (2.15)$$

On remarque que la matrice de raideur tangente $\mathbf{K}^{(e)}$ associée à un élément e se décompose en trois matrices, la matrice de rigidité élastique $\mathbf{K}_e^{(e)}$ qui est constante et identique au cas linéaire, la matrice de rigidité $\mathbf{K}_\sigma^{(e)}$ des contraintes initiales et la matrice de rigidité $\mathbf{K}_u^{(e)}$ des déplacements initiaux.

2.3 Cinématique du contact

Dans ce paragraphe, nous introduisons les notions nécessaires pour prendre en compte le contact dans la formulation d'un problème de mécanique. Pour une question de simplicité et de clarté, nous considérons uniquement deux corps déformables en contact. La formulation de problèmes mettant en jeu un plus grand nombre de solides se fait par simple extension de la démarche présentée dans la suite.

2.3.1 Notion du problème de contact

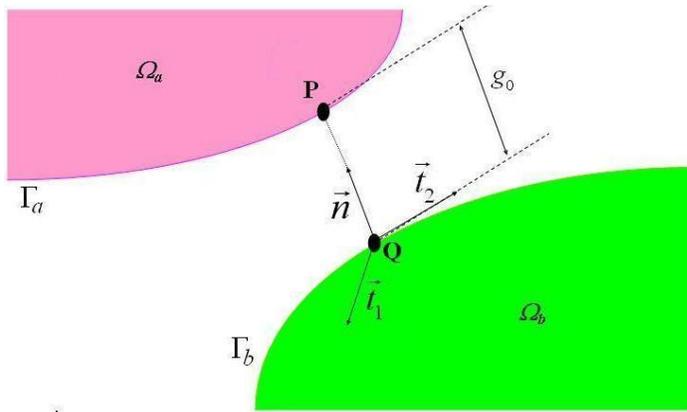


FIG. 2.5: Repère local de contact

Deux corps déformables \mathcal{B}^α (figure 2.5), $\alpha = 1, 2$ sont considérées. Chacun des deux occupe, à l'instant initial, les ensembles fermés $\Omega^\alpha \subset \mathbb{R}^3$, constitués de points \mathcal{X}^α . Les deux corps sont élastiques et peuvent subir de grandes déformations. La frontière Γ^α de chaque corps est supposée suffisamment régulière pour qu'un vecteur normal unitaire vers l'extérieur, noté par n^α , puisse être défini à tout point P sur Γ^α . À chaque fois $t \in I$, où $I = [0, T]$ donne l'intervalle de temps correspondant à la procédure de chargement, la frontière Γ^α du corps \mathcal{B}^α peut, en fait, être partitionnée en trois. Γ_u^α où le déplacement \bar{u}^α est donné, Γ_σ^α où la charge sur la frontière $\bar{\sigma}^\alpha$ est donnée, et Γ_c^α est défini comme la zone potentielle de contact sur laquelle \mathcal{B}^1 et \mathcal{B}^2 peuvent éventuellement venir en contact à un instant t_c . Cette nouvelle décomposition de la frontière de chacun des deux solides doit vérifier :

$$\begin{aligned} \Gamma^\alpha &= \Gamma_u^\alpha \cup \Gamma_\sigma^\alpha \cup \Gamma_c^\alpha, \\ \emptyset &= \Gamma_u^\alpha \cap \Gamma_\sigma^\alpha = \Gamma_\sigma^\alpha \cap \Gamma_c^\alpha = \Gamma_u^\alpha \cap \Gamma_c^\alpha. \end{aligned} \quad (2.16)$$

Dans la suite, les deux corps \mathcal{B}^α , $\alpha = 1, 2$ (l'un étant l'impacteur et l'autre étant l'obs-

tacle) doivent subir une condition de non pénétration que l'on peut traduire par :

$$\mathcal{B}^1 \cap \mathcal{B}^2 = \emptyset \quad (2.17)$$

Pour la partie sur la frontière, on peut écrire :

$$\Gamma_c^1 \cap \Gamma_c^2 = \begin{cases} \emptyset & \text{si non contact} \\ \Gamma_c^1 = \Gamma_c^2 & \text{si contact} \end{cases}$$

Les deux corps sont en contact à l'instant t_c si les éléments de frontières ont une partie commune, sinon, aucun contact n'existe entre les deux corps.

En cette partie commune aux deux frontières, nous pouvons décrire à chaque instant t les domaines de déplacement u^α défini sur la $\bar{\Omega}^\alpha$. Sur la surface de contact, une normale unique n orientée vers \mathcal{B}^1 ($n \equiv n^2$) est définie, et le plan tangent, orthogonal à n dans le \mathbb{R}^3 , est donné par \mathbb{T} . Afin de construire une base locale orthogonale, deux vecteurs unitaires t_x et t_y sont définis dans le plan \mathbb{T} . Pour décrire l'interaction du contact frottant qui peut se produire sur Γ_c , nous introduisons la vitesse relative en ce qui concerne \mathcal{B}^2 .

$$\dot{u} = \dot{u}^1 - \dot{u}^2 \quad (2.18)$$

où \dot{u}^1 et \dot{u}^2 sont les vitesses des déplacements respectivement de \mathcal{B}^1 et \mathcal{B}^2 . Soit r la force de contact exercée par \mathcal{B}^1 sur \mathcal{B}^2 en P . Le principe d'action-réaction nous permet d'écrire que le solide \mathcal{B}^1 subit la réaction de contact $-r$. Dans le repère local du contact, \dot{u} et r peut être décomposés de manière unique sous la forme :

$$\dot{\mathbf{u}} = \dot{\mathbf{u}}_t + \dot{u}_n \mathbf{n}, \quad \dot{\mathbf{u}}_t \in \mathbb{T}, \quad \dot{u}_n \in \mathbb{R} \quad (2.19)$$

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_t + r_n \mathbf{n}, \quad \mathbf{r}_t \in \mathbb{T}, \quad r_n \in \mathbb{R} \quad (2.20)$$

- \mathbf{u} est le vecteur déplacement.
- \mathbf{r} est le vecteur force de contact qu'exerce le corps \mathcal{B}^2 au point P .

2.3.2 Conditions de contact de Signorini

Dans le repère local de contact, le loi de contact se présente sous la forme de trois relations : une condition géométrique de la non-pénétration, une condition de non-adhérence en statique et une condition complémentaire mécanique. Ces trois conditions sont appelées conditions de Signorini.

1. **condition de non-pénétration** : elle permet de s'assurer qu'aucune particule de \mathcal{B}^1 ne pénètre dans le solide \mathcal{B}^2 . Cette condition est définie dans la configuration d'équilibre

c'est à dire à l'instant $(t + \Delta t)$. On peut en déduire :

$$g(\mathbf{X}) = \min[(\mathbf{X}^1 - \mathbf{X}^2) \cdot \mathbf{n}] \geq 0 \quad (2.21)$$

Où g représente le «gap» défini à l'instant t et \mathbf{n} la normale à l'instant $(t + \Delta t)$, et

$$\mathbf{X}^\alpha(t) = \mathbf{X}^\alpha(t = 0) + \mathbf{u}^\alpha \quad (2.22)$$

La position du vecteur \mathbf{X}^2 est trouvé comme la projection la plus proche du point $\mathbf{X}^1 \in \Gamma_c^1$ sur la surface Γ_c^2 . Considérant h comme l'intervalle initial obtenu au début de chaque pas de temps, on a :

$$h = (\mathbf{X}^1 - \mathbf{X}^2) \cdot \mathbf{n} \geq 0 \quad (2.23)$$

2. **condition de non-adhésion** : cette seconde condition traduit le fait que la réaction de contact exercée par \mathcal{B}^2 sur \mathcal{B}^1 est dirigée vers l'extérieur de \mathcal{B}^2 et à donc pour effet de repousser \mathcal{B}^1 . Avec la convention d'orientation adoptée pour \mathbf{n} , la non-adhérence s'écrit :

$$r_n(x_{t+\Delta t}^1) \geq 0, \quad (2.24)$$

3. **condition complémentaire** : cette dernière condition assure qu'il ne peut y avoir une force de réaction entre \mathcal{B}^1 et \mathcal{B}^2 que s'il y a contact :

$$g(\mathbf{x}_{t+\Delta t}^1) \cdot r_n(\mathbf{x}_{t+\Delta t}^1) = 0. \quad (2.25)$$

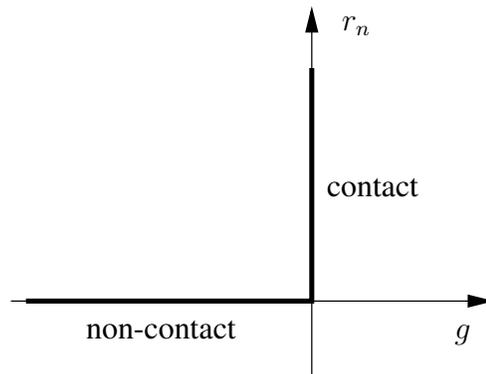


FIG. 2.6: Graphe des conditions de Signorini.

Notons g_0 la distance initiale entre \mathbf{X}_0^1 et \mathbf{X}_0^2 :

$$g_0 = (\mathbf{X}_0^1 - \mathbf{X}_0^2) \cdot \mathbf{n} \geq 0. \quad (2.26)$$

Les conditions de Signorini peuvent alors être réécrites sous la forme :

$$g_0 + u_n \geq 0 \quad , \quad r_n \geq 0 \quad , \quad (g_0 + u_n) \cdot r_n = 0. \quad (2.27)$$

Considérons maintenant le cas de deux solides initialement en contact sur une partie de Γ_c . Sur cette partie de Γ_c , les conditions de Signorini se réduisent à :

$$u_n \geq 0 \quad , \quad r_n \geq 0 \quad , \quad u_n \cdot r_n = 0. \quad (2.28)$$

Ainsi, pour tout $t \in \mathbf{I}$, les surfaces potentielles de contact $\Gamma_c^\alpha (\alpha = 1, 2)$ peuvent être découpées en deux parties distinctes : ${}^+\Gamma_c^\alpha$ sur laquelle les deux corps sont effectivement en contact et ${}^-\Gamma_c^\alpha$ pour laquelle il n'y a pas, à ce moment précis, de contact. Nous avons donc :

$$\Gamma_c^\alpha = {}^+\Gamma_c^\alpha \cup {}^-\Gamma_c^\alpha \quad \text{et} \quad {}^+\Gamma_c^\alpha \cap {}^-\Gamma_c^\alpha = \emptyset. \quad (2.29)$$

En revanche Γ_c^α , ${}^+\Gamma_c^\alpha$ et ${}^-\Gamma_c^\alpha$ changent avec le temps t et peuvent être vides pour certains $t \in \mathbf{I}$. Nous devons souligner que avec l'équation (2.28) traduit le fait que lorsque les deux solides sont en contact, seule une séparation est autorisée. Elle ne permet pas d'exprimer la mise en contact de nouvelles zones.

Dans le contexte de la dynamique, il est possible d'exprimer les conditions de Signorini en ${}^+\Gamma_c^\alpha$ en terme de vitesse :

$$\dot{u}_n \geq 0 \quad , \quad r_n \geq 0 \quad , \quad \dot{u}_n r_n = 0 \quad \text{sur} \quad {}^+\Gamma_c^\alpha. \quad (2.30)$$

Il est important de noter que cette dernière formulation (équation 2.30) n'est valable que si les deux solides sont initialement en contact.

2.3.3 Loi de frottement - modèle de Coulomb

Il est maintenant nécessaire de définir la loi qui permettra, lors des calculs, de déterminer la partie tangentielle des réactions de contact. Dans ce travail, nous ne considérons que les cas de frottement sec. En effet, le problème de frottement lubrifié fait intervenir un troisième corps, en l'occurrence un liquide, entre les deux solides et sort de notre domaine d'étude.

Dans cette loi de frottement, la force tangentielle appliquée au solide en contact doit dépasser un certain seuil pour qu'un glissement se produise. Le seuil à dépasser pour obtenir un glissement relatif entre les deux solides en contact est une constante, fixée a priori et qui

dépend des matériaux. Afin de refléter ce qu'il a observé par expérimentation, Coulomb a imposé une dépendance du seuil de glissement vis à vis de la réaction normale. Ainsi, la loi de frottement de Coulomb s'écrit :

$$\begin{cases} \text{Si } \|r_t\| < \mu r_n & \text{alors } \dot{u}_t = 0 \quad (\text{adhérence}) \\ \text{Si } \|r_t\| = \mu r_n & \text{alors } \exists \lambda > 0 \quad \text{tel que } \dot{u}_t = -\lambda \frac{\mathbf{r}_t}{\|\mathbf{r}_t\|}. \quad (\text{glissement}) \end{cases} \quad (2.31)$$

où μ est le coefficient de frottement. La forme incrémentale est :

$$\text{Coulomb}(\Delta \mathbf{x}_t, \mathbf{r}_t) \Leftrightarrow \begin{cases} \|r_t\| < \mu r_n & \text{si } \|\Delta \mathbf{x}_t\| = 0 \\ r_t = -\mu r_n \frac{\Delta \mathbf{x}_t}{\|\Delta \mathbf{x}_t\|} & \text{si } \|\Delta \mathbf{x}_t\| \neq 0 \end{cases} \quad (2.32)$$

$\Delta \mathbf{x}_t = \mathbf{x}_t(t + \Delta t) - \mathbf{x}_t(t)$ mais du fait que le point Q soit le point projeté orthogonalement de P, on a $\mathbf{x}_t(t) = \mathbf{0}$ ce qui implique que $\Delta \mathbf{x}_t = \mathbf{x}_t(t + \Delta t) = \mathbf{x}_t$. On a donc :

$$\text{Coulomb}(\mathbf{x}_t, \mathbf{r}_t) \Leftrightarrow \begin{cases} \|r_t\| < \mu r_n & \text{si } \|\mathbf{x}_t\| = 0 \\ r_t = -\mu r_n \frac{\mathbf{x}_t}{\|\mathbf{x}_t\|} & \text{si } \|\mathbf{x}_t\| \neq 0 \end{cases} \quad (2.33)$$

Comme les conditions de Signorini pour le problème de contact, le modèle de Coulomb définissant le frottement constitue une difficulté majeure pour la résolution. Là aussi, la relation entre la force tangentielle et le glissement relatif n'est pas définie par une fonction régulière comme le montre la figure 2.7.

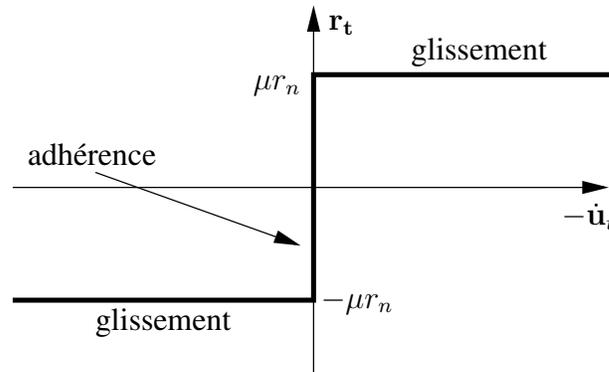


FIG. 2.7: Loi de frottement de Coulomb

En couplant cette loi avec les conditions de Signorini, nous pouvons définir l'ensemble fermé et convexe \bar{K}_μ des forces de réactions admissibles par :

$$\bar{K}_\mu = \{ \mathbf{r} \in \mathbb{R}^3 \quad \text{tel que } \|\mathbf{r}_t\| - \mu r_n \leq 0 \}. \quad (2.34)$$

La représentation graphique de l'ensemble \bar{K}_μ (appelé cône de Coulomb) est proposée sur

la figure 2.8. Nous y retrouvons les trois statuts de contact possibles : non-contact, contact adhérent et contact avec glissement.

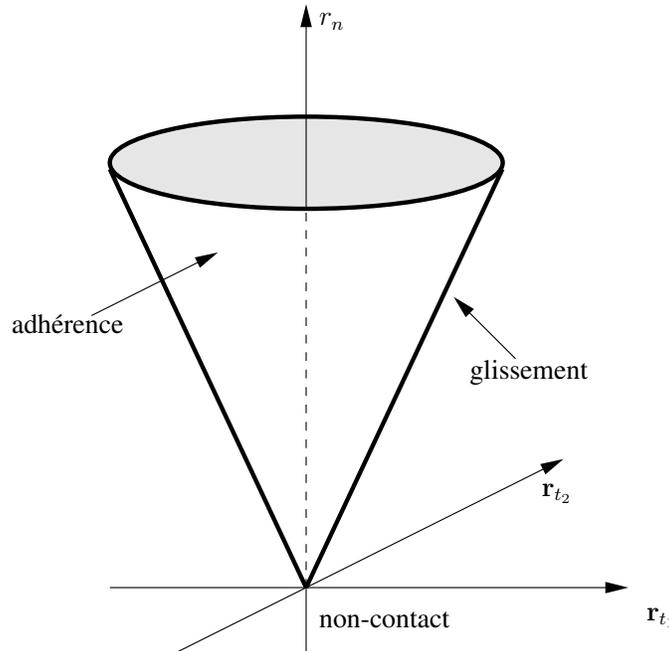


FIG. 2.8: Cône de Coulomb

Il est possible de différencier le coefficient de frottement qui s'applique lors de la phase de glissement de celui qui sert de seuil lors de la phase d'adhérence. On parle alors de coefficient d'adhérence et de coefficient de frottement. En effet, les expérimentations montrent que la force nécessaire pour maintenir un glissement relatif entre deux solides est généralement plus faible que la « force seuil » qui a été nécessaire pour le provoquer.

Par ailleurs, la loi de Coulomb ne constitue pas la seule alternative pour introduire le phénomène du frottement. La tribologie est la science qui vise à étudier ce phénomène mécanique et de nombreux modèles peuvent être adaptés selon le cas étudié. Dans certains travaux s'inspirant du domaine de l'élastoplasticité, nous trouvons de nouveaux modèles de frottement qui permettent un mouvement relatif réversible des surfaces de contact. Ce type de loi prend en compte les déformations élastiques, au niveau microscopique, des aspérités de chacune des surfaces de contact et des frottements anisotropes [Cur84, HC93, Wri02, HFdM04].

2.3.4 Loi de contact avec frottement

Nous considérons à présent la loi de frottement de Coulomb présentée précédemment que nous allons coupler avec les conditions de Signorini afin d'obtenir une loi de contact avec frottement complète. Cette loi fera intervenir les trois statuts de contact possibles : l'absence de contact, l'adhérence et le glissement.

Une manière élégante de mettre en avant les différents statuts de contact consiste à écrire la loi complète de contact avec frottement sous la forme d'une double boucle de type « *Si ... alors ... sinon* ».

$$\begin{array}{ll}
 \text{si} & r_n = 0 \quad \text{alors} \quad \dot{u}_n \geq 0 & \text{!non-contact} \\
 \text{sinon} & \mathbf{r} \in \overline{K}_\mu \quad \text{alors} \quad \dot{u}_n = 0 \text{ et } \dot{\mathbf{u}}_t = \mathbf{0} & \text{! adhérence} \\
 \text{sinon} & (\mathbf{r} \in \partial \overline{K}_\mu \quad \text{et} \quad r_n > 0) & \\
 & \left\{ \dot{u}_n = 0 \quad \text{et} \quad \exists \lambda > 0 \text{ tel que } -\dot{\mathbf{u}}_t = \lambda \frac{\mathbf{r}_t}{\|\mathbf{r}_t\|} \right\} & \text{! glissement} \\
 \text{fin} & &
 \end{array} \tag{2.35}$$

où \overline{K}_μ et $\partial \overline{K}_\mu$ sont respectivement l'intérieur et le bord du cône de Coulomb.

La loi que nous venons de présenter permet de déterminer la vitesse relative $\dot{\mathbf{u}}$ lorsque l'on connaît la force de réaction \mathbf{r} . La loi de contact inverse, *i.e.* la relation $\mathbf{r}(-\dot{\mathbf{u}})$ peut également être mise sous la forme d'une double boucle.

$$\begin{array}{ll}
 \text{si} & \dot{u}_n > 0 \quad \text{alors} \quad \mathbf{r} = \mathbf{0} & \text{!non-contact} \\
 \text{sinon} & \dot{\mathbf{u}} = \mathbf{0} \quad \text{alors} \quad \mathbf{r} \in \overline{K}_\mu & \text{! adhérence} \\
 \text{sinon} & (\dot{\mathbf{u}} \in \mathbf{T} - \mathbf{0} \quad \text{alors} & \\
 & \left\{ \dot{u}_n = 0 \quad \text{et} \quad \mathbf{r}_t = \mu r_n \frac{-\dot{\mathbf{u}}_t}{\|-\dot{\mathbf{u}}_t\|} \right\} & \text{! glissement} \\
 \text{fin} & &
 \end{array} \tag{2.36}$$

2.4 Méthodes de résolution des problèmes de contact

L'analyse des problèmes de contact avec frottement est d'une grande importance dans de multiples domaines d'ingénierie. Dans la littérature, de nombreuses méthodes ont été développées pour traiter ce genre de problèmes :

- la méthode des multiplicateurs de Lagrange : dans cette méthode, les contraintes liées au contact et au frottement sont introduites dans la formulation par le biais d'inconnues supplémentaires (les multiplicateurs de Lagrange). Cette méthode permet de vérifier exactement les conditions de contact mais elle a le désavantage d'augmenter la taille du système à résoudre. Nous trouvons quelques exemples d'utilisation de cette méthode dans [HTS⁺76, BN91, CTK91, PS98, SP98],
- la méthode de pénalisation : dans cette autre méthode, la loi de contact ainsi que la loi de frottement sont régularisées par l'intermédiaire de deux coefficients de pénalité [CT71, TY73, KS81, CB86, Par89]. Cette méthode a pour principal avantage sa simplicité d'implantation. Cependant, il faut souligner que cette méthode ne permet pas de vérifier avec exactitude les conditions de contact. L'importance de la pénétration autorisée dépend du choix (difficile) des coefficients de pénalité [Hun92] qui n'ont pas de

- signification physique et qui doivent être déterminés pour chaque cas étudié,
- la méthode du Lagrangien augmenté : dans cette dernière méthode, les déplacements et les réactions de contact sont déterminés simultanément [AC91, SL92, dSF91, Kl92, dSF98, CKPS98]. Cette méthode présente l'avantage de fournir un résultat qui vérifie exactement les conditions de contact. De plus, le paramètre utilisé dans la méthode n'influe pas sur la précision du résultat mais seulement sur la vitesse de convergence de l'algorithme.

La formulation du problème de contact avec la méthode de fonction de pénalisation conduit à une seule résolution globale en déplacements car les forces de contact sont explicitement définies en fonction des déplacements. Par contre, dans les deux autres méthodes, les forces de contact sont définies d'une manière implicite et constituent des inconnues supplémentaires qui s'ajoutent aux inconnus en déplacement dans le système d'équations d'équilibre global des corps en contact. Deux approches sont alors possibles pour déterminer ces deux inconnus. La première consiste à les résoudre simultanément d'une manière globale. La deuxième approche dite «mixte» consiste à les résoudre séparément de manière successive. Les forces de contact sont tout d'abord déterminées d'une manière locale par réduction des équations d'équilibre aux points de contact. Les déplacements sont alors obtenus par une résolution globale du système d'équations d'équilibre en considérant les forces de contact comme des forces externes [Fen95]. La méthode du Lagrangien augmenté permet de séparer la non linéarité du comportement mécanique due aux grands déplacements, de la non linéarité due aux lois de contact frottant. Elle permet aussi de créer une approche modulaire en introduisant dans le processus de simulation un solveur des forces de contact indépendant du solveur global des déplacements.

2.4.1 Formulation par des fonctions de pénalité

Le principe de la méthode consiste à régulariser les fonctions associées aux lois de contact de manière à obtenir des graphes d'application.

2.4.1.1 Formulation implicite

Les conditions de Signorini et les conditions de la loi de Coulomb peuvent ainsi être reformulées par [RF03] :

$$\text{Signorini}(u_n, r_n) \Rightarrow r_n = \text{Proj}_{\mathbb{R}^+}(-\rho_n u_n) \text{ avec } \rho_n > 0 \quad (2.37)$$

$$\text{Coulomb}(\mathbf{u}_t, \mathbf{r}_t) \Rightarrow \mathbf{r}_t = \text{Proj}_{D_\mu}(-\rho_t \mathbf{u}_t) \text{ avec } \rho_t > 0 \quad (2.38)$$

Avec $\text{Proj}_{\mathbb{R}^+}$ et Proj_{D_μ} des opérateurs de projection définis par :

$$\text{Proj}_{\mathbb{R}^+}(z \in \mathbb{R}) = \begin{cases} 0 & \text{si } z < 0 \\ z & \text{si } z \geq 0 \end{cases}, \text{Proj}_{D_\mu}(\mathbf{z} \in \mathbb{R}^2) = \begin{cases} h \frac{\mathbf{z}}{\|\mathbf{z}\|} & \text{si } \mathbf{z} \notin D_\mu \\ \mathbf{z} & \text{si } \mathbf{z} \in \text{int}(D_\mu) \end{cases}$$

D_μ représente le disque de Coulomb défini dans \mathbb{R}^2 et de rayon h ($h = \mu r_n$).

Cette formulation constitue une approximation des lois de contact dans laquelle les paramètres ρ_n, ρ_t représentent des raideurs ajoutées respectivement suivant la direction normale et tangentielle au point de contact considéré. En effet, pour avoir une force de contact, il faut nécessairement que $u_n < 0$ c'est-à-dire qu'il y ait interpénétration. Dans cette approche les forces de contact agissent comme des forces de rappel pour compenser l'interpénétration et le glissement. En augmentant la valeur de ces raideurs, on augmente la pente des courbes représentées sur les graphes de 2.9 et on se rapproche ainsi des lois de contact. Cependant, on ne peut pas excéder une certaine limite qui entraînerait un mauvais conditionnement numérique de la matrice tangente. En effet dans cette formulation les forces de contact sont fonctions des déplacements contraints et contribuent au calcul des forces internes modifiant ainsi le calcul de la matrice tangente K_T du système.

Cette formulation se prête bien à la programmation mais elle nécessite la modification de la matrice tangente qui change de forme suivant le statut de chaque point de contact (Non contact, adhérence ou glissement) ce qui dans une résolution numérique itérative est très coûteux.

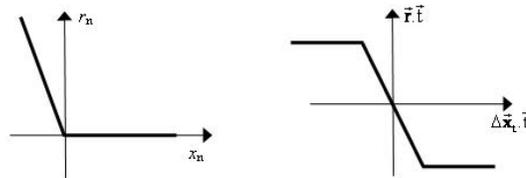


FIG. 2.9: Régularisation des lois de contact

2.4.1.2 Formulation explicite

Les conditions de Signorini et la loi de Coulomb peuvent être aussi reformulées par :

$$\text{Signorini}(\tilde{u}_n, r_n) \Rightarrow r_n = \text{Proj}_{\mathbb{R}^+}(-\rho_n \tilde{u}_n) \text{ avec } \rho_n > 0 \quad (2.39)$$

$$\text{Coulomb}(\tilde{\mathbf{u}}_t, \mathbf{r}_t) \Rightarrow \mathbf{r}_t = \text{Proj}_{D_\mu}(-\rho_t \tilde{\mathbf{u}}_t) \text{ avec } \rho_t > 0 \quad (2.40)$$

Cette formulation diffère de la précédente car elle ne prend pas en compte les déplacements contraints mais les déplacements libres uniquement. Dans cette formulation les forces de contact s'ajoutent aux calculs des forces externes, la matrice tangente reste inchangée. Pour calculer les déplacements libres, on peut procéder de manière locale par projection des équations d'équilibre au point de contact sans qu'il soit nécessaire de résoudre globalement le système. Les paramètres ρ_n, ρ_t doivent être choisis avec précaution en relation avec les raideurs des deux solides au point de contact. Des valeurs trop élevées entraînent une réactivité trop forte du point de contact et une instabilité numérique. Des valeurs trop faibles entraînent des violations de contraintes (interpénétration, adhérence) trop importantes.

2.4.2 Formulations par des multiplicateurs de Lagrange

2.4.2.1 Formulation par adhérence

On bloque le point de contact dans les 3 directions normales et tangentielles ($u_n = 0, \mathbf{u}_t = 0$), on en déduit une force de blocage $\vec{\lambda} = \lambda_n \vec{\mathbf{n}} + \vec{\lambda}_t$ dans le repère local (calculée en prenant en compte les équations d'équilibre). On projette ensuite cette force de manière à satisfaire les conditions de contact. Les conditions de Signorini et la loi de Coulomb peuvent ainsi être reformulées par :

$$\text{Signorini}(u_n, r_n) \Rightarrow r_n = \text{Proj}_{\mathbb{R}^+}(\lambda_n) \quad (2.41)$$

$$\text{Coulomb}(\mathbf{u}_t, \mathbf{r}_t) \Rightarrow \mathbf{r}_t = \text{Proj}_{D_\mu}(\lambda_t) \quad (2.42)$$

2.4.2.2 Formulation par glissement sans frottement

On bloque le point de contact uniquement dans la direction normale ($u_n = 0$), on en déduit une force de blocage $\vec{\lambda} = \lambda_n \vec{\mathbf{n}}$ dans la direction normale (calculée en prenant en compte les équations d'équilibre) et $\tilde{\mathbf{u}}_t$ le déplacement libre suivant les directions tangentes.

Les conditions de Signorini et la loi de Coulomb peuvent ainsi être reformulées par :

$$\text{Signorini}(u_n, r_n) \Rightarrow r_n = \text{Proj}_{\mathbb{R}^+}(\lambda_n) \quad (2.43)$$

$$\text{Coulomb}(\Delta \mathbf{u}_t, \mathbf{r}_t) \Rightarrow \mathbf{r}_t = -\mu r_n \frac{\tilde{\mathbf{u}}_t}{\|\tilde{\mathbf{u}}_t\|} \quad (2.44)$$

Le choix de l'une ou l'autre formulation dépend du problème considéré. Si c'est un pro-

blème dans lequel il y a plus d'adhérence que de glissement alors c'est la première méthode qui est préférable sinon c'est la seconde. D'une manière générale la seconde méthode est plus stable que la première. En effet dans la seconde méthode, l'effet dissipatif lié aux frottements est garanti car la force tangentielle s'oppose aux mouvements tangentiels relatifs, tandis que la première méthode relâxe la force tangentielle au risque de libérer de l'énergie de déformation de manière trop brutale et d'entraîner des problèmes de stabilité numérique. Ces deux méthodes ne simulent pas correctement les changements de statuts (glissement, adhérence).

2.4.3 Formulations lagrangiennes augmentées

Nous allons voir maintenant deux méthodes qui considèrent la force de contact et les déplacements contraints comme étant deux extrêmes de potentiels convexes non différentiables. La première méthode introduite par Moreau [Mor88, Mor94], définit deux potentiels non différentiables appelés «pseudo-potentiels». Le premier est associé aux conditions de Signorini et le deuxième aux conditions de la loi de Coulomb. La deuxième méthode introduite par De Saxcé et Feng [dSF91], [dSF98], définit un unique potentiel non différentiable appelé «bi-potential» associé à la fois aux conditions de Signorini et à la loi de Coulomb. L'avantage de cette dernière méthode permet de mieux prendre en compte le couplage entre la force normale et la force tangentielle au niveau des lois du contact lors de la résolution numérique.

Ces deux méthodes conduisent à l'élaboration d'opérateurs de projection à partir de considérations issues de l'analyse convexe et de la technique du lagrangien augmenté.

2.4.3.1 Pseudo-potentiels

Conditions de Signorini

$$\text{Signorini}(x_n, r_n) \Leftrightarrow r_n \geq 0 \text{ et } \forall r_n' \geq 0 \quad (r_n' - r_n) x_n \geq 0 \quad (2.45)$$

Montrons qu'il y a bien équivalence :

Si $r_n > 0$ alors il existe au moins un $r_n' > 0$ tel que $r_n' < r_n$ ce qui implique $x_n = 0$ et on vérifie donc bien Signorini.

Si $r_n = 0$ alors $r_n' \cdot x_n \geq 0$ ce qui implique $x_n \geq 0$ et on vérifie donc bien de nouveau Signorini.

On peut montrer que l'équation 2.45 définit $-x_n$ comme un sous gradient d'une fonction potentielle non différentiable construite à partir d'une fonction indicatrice.

On peut remplacer l'inégalité dans 2.45 par :

$$\begin{aligned}
(r_n' - r_n) x_n \geq 0 &\Leftrightarrow (r_n' - r_n) \rho x_n \geq 0 \text{ avec } \rho > 0 \\
&\Leftrightarrow (r_n' - r_n) (r_n - r_n + \rho x_n) \geq 0 \text{ avec } \rho > 0 \\
&\Leftrightarrow (r_n' - r_n) (r_n - r_n^*) \geq 0 \text{ avec } r_n^* = r_n - \rho x_n
\end{aligned} \tag{2.46}$$

r_n^* constitue la force de contact normale augmentée.

$$r_n \geq 0 \text{ et } \forall r_n' \geq 0 \quad (r_n' - r_n) (r_n - r_n^*) \geq 0 \Leftrightarrow r_n = \text{Proj}_{\mathbb{R}^+}(r_n^*) \tag{2.47}$$

En effet $r_n > 0$ alors $(r_n' - r_n)$ peut être de signe quelconque ce qui implique $r_n = r_n^*$ par contre si $r_n = 0$ alors $-r_n^* r_n' \geq 0$ ce qui implique $0 \geq r_n^*$.

Loi de Coulomb

$$\text{Coulomb}(\mathbf{x}_t, \mathbf{r}_t) \Leftrightarrow \mathbf{r}_t \in D_\mu, \forall \mathbf{r}_t' \in D_\mu, (\mathbf{r}_t' - \mathbf{r}_t) \mathbf{x}_t \geq 0 \tag{2.48}$$

Montrons qu'il y a bien équivalence :

Si \mathbf{r}_t est à l'intérieur du cône de Coulomb alors il existe un disque centré sur \mathbf{r}_t inclus dans ce cône et on peut avoir toutes les directions $(\mathbf{r}_t' - \mathbf{r}_t)$ possibles ce qui implique que $\mathbf{x}_t = \mathbf{0}$, ce qui définit bien l'adhérence. Si \mathbf{r}_t est au bord du disque de Coulomb (de rayon non nul) alors l'inégalité traduit que $-\mathbf{x}_t$ est dirigé suivant la normale extérieure impliquant $\exists \lambda > 0, \mathbf{x}_t = -\lambda \frac{\mathbf{r}_t}{\|\mathbf{r}_t\|}$, ce qui définit bien le glissement. On peut montrer que 2.48 définit $-\mathbf{x}_t$ comme un sous gradient d'une fonction potentielle non différentiable construite à partir d'une fonction indicatrice.

On modifie l'inégalité dans 2.48 par :

$$\begin{aligned}
(\mathbf{r}_t' - \mathbf{r}_t) \mathbf{x}_t \geq 0 &\Leftrightarrow -(\mathbf{r}_t' - \mathbf{r}_t) \rho \mathbf{x}_t \leq 0 \\
&\Leftrightarrow (\mathbf{r}_t' - \mathbf{r}_t) (\mathbf{r}_t^* - \mathbf{r}_t) \leq 0 \text{ avec } \mathbf{r}_t^* = \mathbf{r}_t - \rho \mathbf{x}_t
\end{aligned} \tag{2.49}$$

En raisonnant de la même manière que précédemment, il est évident que lorsque \mathbf{r}_t est à l'intérieur du disque de Coulomb alors nécessairement on a $\mathbf{r}_t^* = \mathbf{r}_t$. Lorsque \mathbf{r}_t est sur le bord du disque cela veut dire que $(\mathbf{r}_t' - \mathbf{r}_t)$ est orienté suivant la normale extérieure du disque. \mathbf{r}_t est donc le projeté de \mathbf{r}_t^* sur le bord du disque lorsque \mathbf{r}_t^* est à l'extérieur (voir figure 2.10).

2.4.3.2 Bi-potentiel

Nous avons vu dans les paragraphes précédents que pour chaque nœud de contact, la détermination des réactions de contact consiste en la recherche d'un couple $(\hat{\mathbf{u}}; \mathbf{r})$ qui, d'une part, est solution de l'équation du mouvement et qui, d'autre part, vérifie l'équation de contact avec frottement.

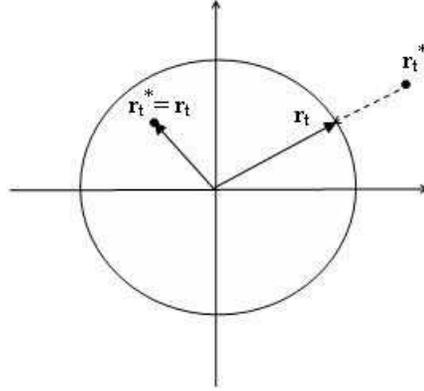


FIG. 2.10: Projection sur le disque de Coulomb

$$\left. \begin{array}{l} \text{Signorini}(x_n, r_n) \\ + \\ \text{Coulomb}(\mathbf{x}_t, \mathbf{r}_t) \end{array} \right\} \Leftrightarrow \begin{array}{l} \mathbf{r} \in \overline{K}_\mu, \forall \mathbf{r}'_t \in \overline{K}_\mu, (\mathbf{r}'_t - \mathbf{r}) \mathbf{v} \geq 0 \\ \text{avec } \mathbf{v} = (\mu \|\mathbf{x}_t\| + x_n) \mathbf{n} + \mathbf{x}_t \end{array} \quad (2.50)$$

Montrons qu'il y a bien équivalence :

Si $\mathbf{r} \in (\overline{K}_\mu)$ alors $(\mathbf{r}' - \mathbf{r})$ peut prendre n'importe quelle direction ce qui implique que :

$$\mathbf{v} = \mathbf{0} \Leftrightarrow \begin{cases} \mu \|\mathbf{x}_t\| + x_n = 0 \\ \mathbf{x}_t = \mathbf{0} \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} x_n = 0 \\ \mathbf{x}_t = \mathbf{0} \end{cases} \quad (2.51)$$

Cela définit bien les conditions d'adhérence. Si $\mathbf{r} \in \text{Bd}(\overline{K}_\mu) - \{\mathbf{0}\}$ alors $-\mathbf{x}_t$ est orthogonal au cône de Coulomb impliquant :

$$\begin{cases} \mu \|\mathbf{x}_t\| + x_n = \lambda \mu \\ -\mathbf{x}_t = \lambda \frac{\mathbf{r}_t}{\|\mathbf{r}_t\|} \end{cases} \text{ avec } \lambda > 0 \quad (2.52)$$

λ représente la norme de \mathbf{x}_t ce qui entraîne $x_n=0$. On retrouve les conditions de contact avec glissement. Si $\mathbf{r} = \{\mathbf{0}\}$ alors on a $\forall \mathbf{r}'_t \in \overline{K}_\mu, \mathbf{r}'_t(-\mathbf{v}) \leq 0$ ce qui entraîne $-\mathbf{v} \in K_\mu^*$ où K_μ^* représente le cône polaire (ou cône dual) dont les bords sont orthogonaux aux bords du cône de Coulomb (voir Figure 2.11) et qui est défini par $K_\mu^* = \{\mathbf{z} \in \mathbf{R}^3, \mu \|\mathbf{z}_t\| + z_n \leq 0\}$.

$$\begin{aligned} -\mathbf{v} \in K_\mu^* &\Leftrightarrow \mu \|\mathbf{x}_t\| - x_n - \mu \|\mathbf{x}_t\| \leq 0 \\ &\Leftrightarrow 0 \leq x_n \end{aligned} \quad (2.53)$$

Ceci est conforme avec la perte de contact. On modifie l'inégalité dans 2.50 par la même

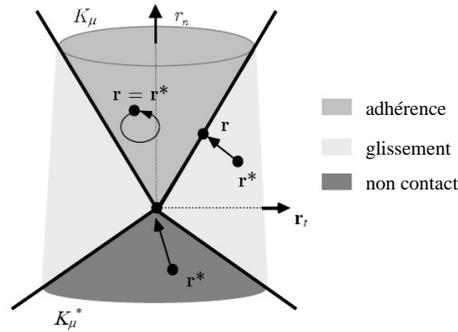


FIG. 2.11: Projection sur le cône de Coulomb

technique du lagrangien augmenté :

$$\begin{aligned} (\mathbf{r}' - \mathbf{r}) \cdot \mathbf{v} \geq 0 &\Leftrightarrow -(\mathbf{r}' - \mathbf{r}_t) \rho \mathbf{v} \leq 0 \text{ avec } \rho > 0 \\ &\Leftrightarrow (\mathbf{r}' - \mathbf{r}) \cdot (\mathbf{r}^* - \mathbf{r}) \leq 0 \text{ avec } \mathbf{r}^* = \mathbf{r} - \rho \mathbf{v} \end{aligned} \quad (2.54)$$

Si $\mathbf{r} \in \text{Bd}(\overline{K}_\mu)$ alors $\mathbf{r} = \mathbf{r}^*$, si $\mathbf{r} \in \text{Bd}(\overline{K}_\mu) - \{\mathbf{0}\}$ alors $(\mathbf{r}^* - \mathbf{r})$ est orienté suivant la normale extérieure du cône de Coulomb. \mathbf{r}_t est donc le projeté orthogonal de \mathbf{r}_t^* sur le bord du cône de Coulomb lorsque celui-ci est à l'extérieur de \overline{K}_μ et de K_μ^* (voir Figure 2.11). On a donc :

$$\left. \begin{array}{l} \text{Signorini}(x_n, r_n) \\ + \\ \text{Coulomb}(\mathbf{x}_t, \mathbf{r}_t) \end{array} \right\} \Leftrightarrow \mathbf{r} = \text{Proj}_{K_\mu}(\mathbf{r}^*) \text{ avec } \mathbf{r}^* = \mathbf{r} - \rho \mathbf{v} \quad (2.55)$$

2.5 Application numérique

Cette partie est consacré à la présentation d'une application numérique permettant de mettre en évidence la robustesse et la précision du code de calcul FER (basé sur la méthode du bi-potential) en comparaison avec ANSYS. Pour cela, nous proposons un problème 2D connu de contact avec frottement.

Cet exemple est souvent étudié pour la validation de codes de calcul. Il s'agit d'un barreau élastique de section rectangulaire comprimé sous l'action de forces verticales et latérales contre un plan rigide (figure 2.12).

Cet exemple est intéressant car nous avons trois zones de contact différents dans un même temps : la zone de non-contact (AB), la zone de glissement (BC) et la zone d'adhérence (CD). En raison de la symétrie de la structure, seule la moitié du barreau est modélisée. Les caractéristiques de cet exemple sont les suivants :

1. module de YOUNG $E = 130000$ Mpa ; coefficient de Poisson $\nu = 0.2$; coefficient de frottement $\mu=1$

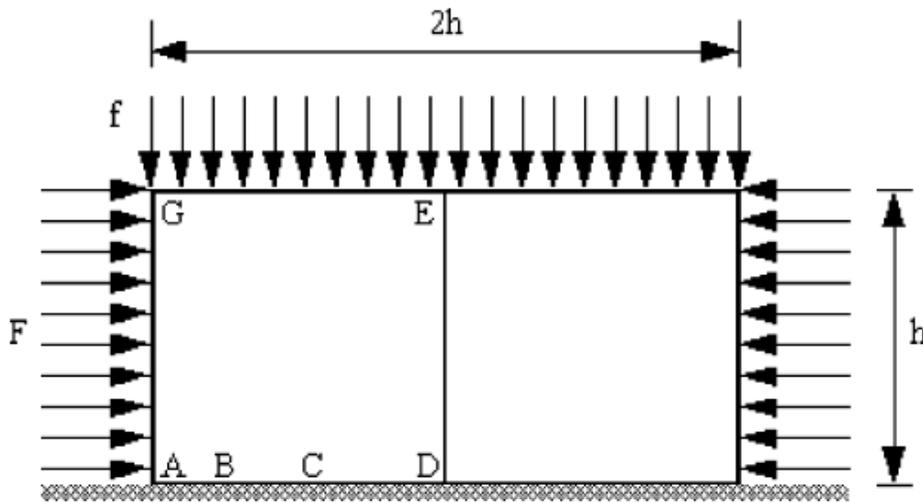


FIG. 2.12: Un barreau avec des conditions aux limites

2. conditions aux limites : $u_x = 0$ sur ED (condition symétrique)
3. Charge : $f=50$ Mpa sur GE, $F= 100$ Mpa sur GA.

La moitié de la barre est modélisée avec 561 nœuds et 512 éléments quadrilatéraux linéaires. La figure 2.13 montre le maillage initial et déformé (avec un facteur d'amplification de 500).

La figure 2.14 montre la distribution de la contrainte de cisaillement sur laquelle une concentration est observée à la frontière de la zone de glissement (BC) et de la zone d'adhérence (CD).

La pression normale et la pression tangentielle sur la zone AD sont données par ANSYS et le code FER dans la figure 2.15, les résultats numériques correspondent bien.

La pression normale calculée par les deux codes est aussi donnée dans la figure 2.16. Nous pouvons voir que les résultats de ANSYS dépendent du coefficient de pénalité K_n (inconnues a priori). Les résultats sont meilleurs avec un coefficient de $K_n = 10^6$ comparé avec $K_n = 10^5$ pour ANSYS.

Les figures 2.17 et 2.18 montrent le déplacement tangentiel et le déplacement normal (pénétration) sur la zone AD entre ANSYS et le code FER. La remarque concernant l'influence du coefficient " K_n " est toujours valable. Il faut noter que la pénétration est inévitable dans ANSYS. Tous ces résultats illustrent que la stabilité numérique et la précision du code FER sont meilleures qu'ANSYS. Un autre avantage est qu'il n'y a pas de paramètres numériques à choisir (tels que les facteurs de pénalité).

Afin d'étudier l'influence du frottement sur le comportement de contact, des coefficients différents ont été considérés : $\mu = 0, 0.4, 0.8$ et 1.3 . Le tableau 2.1 montre des résultats obtenus par les deux codes : FER et ANSYS. U_A et V_A sont respectivement le déplacement horizontal et le déplacement vertical du point A. Le temps de CPU augmente avec le coeffi-

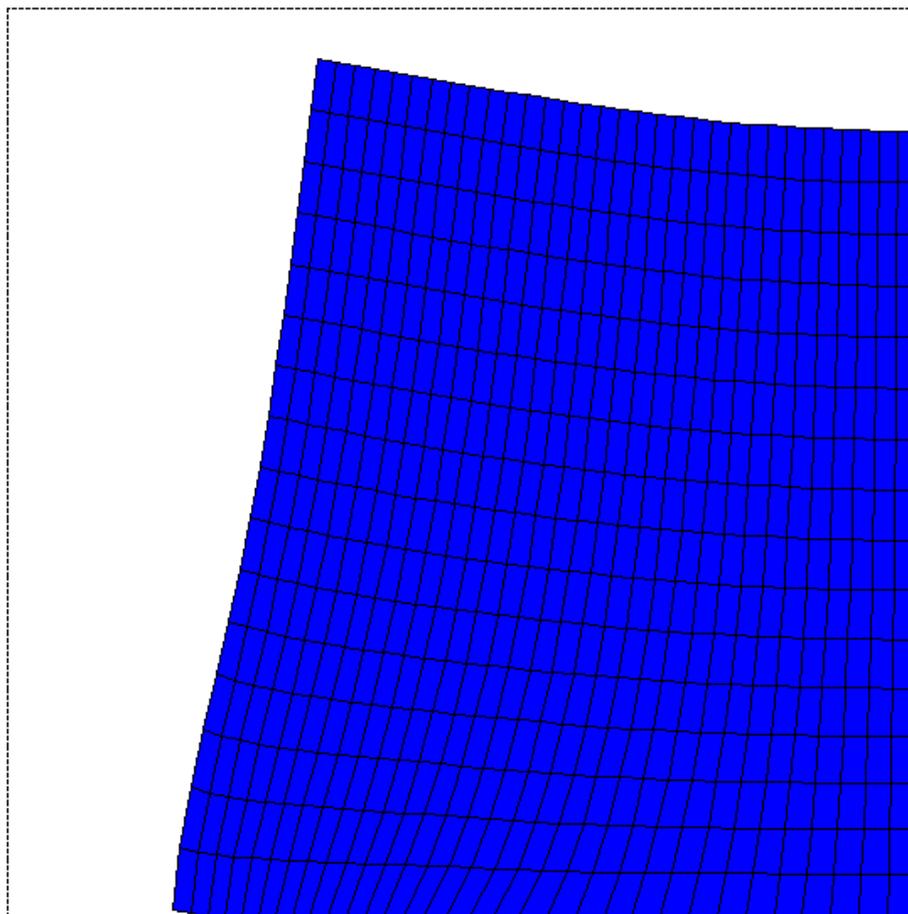


FIG. 2.13: Maillage initial et déformé

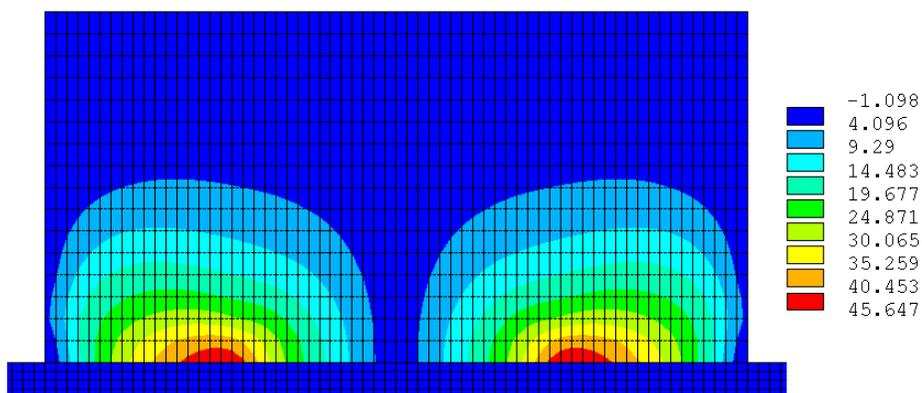


FIG. 2.14: Distribution de la contrainte de cisaillement

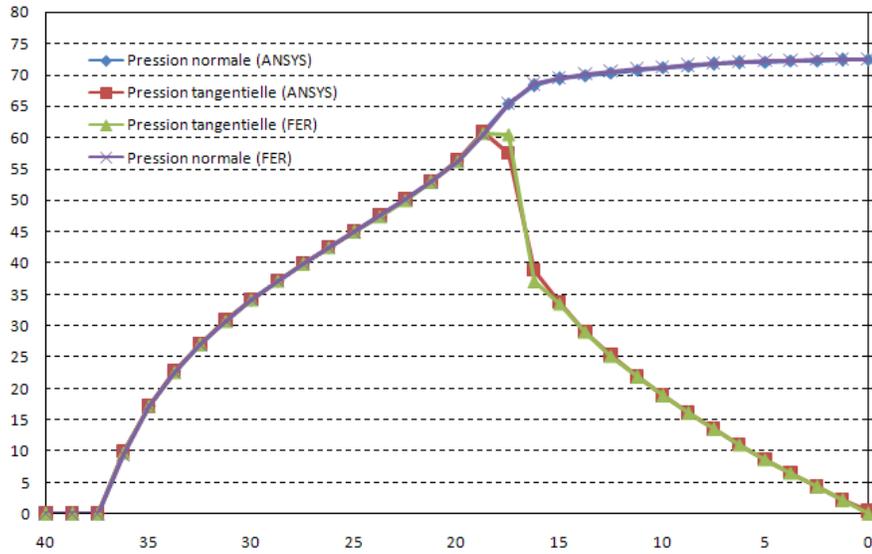


FIG. 2.15: Pression normale et pression tangentielle par ANSYS et FER

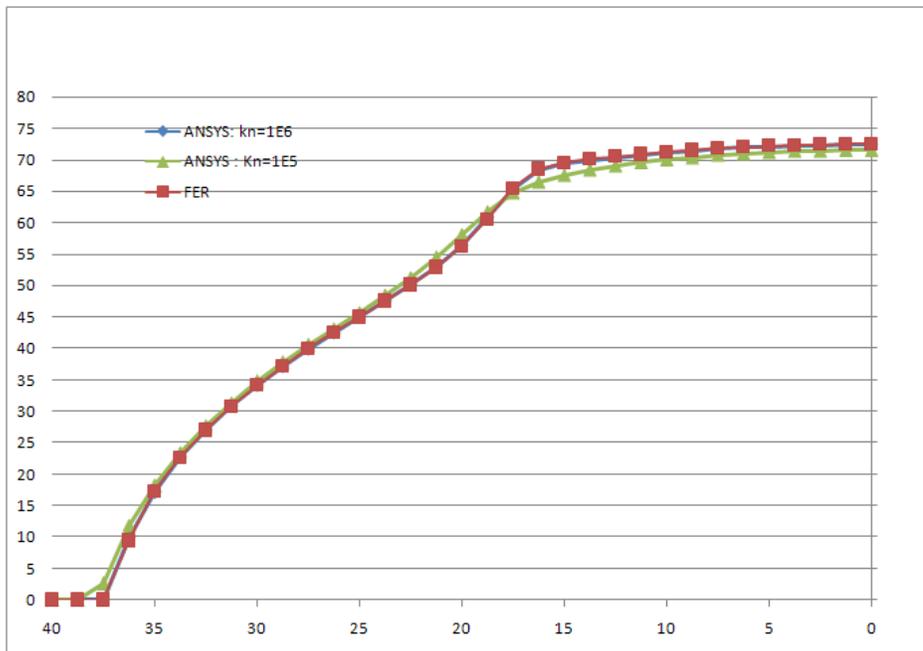


FIG. 2.16: Pression normale par ANSYS et FER

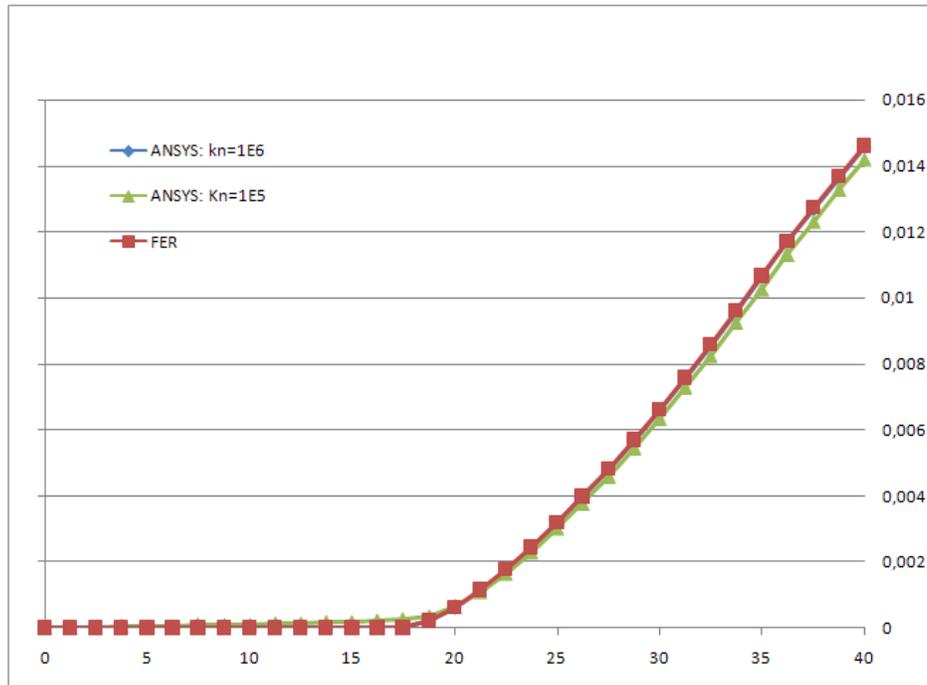


FIG. 2.17: Déplacement tangentiel sur la zone AD

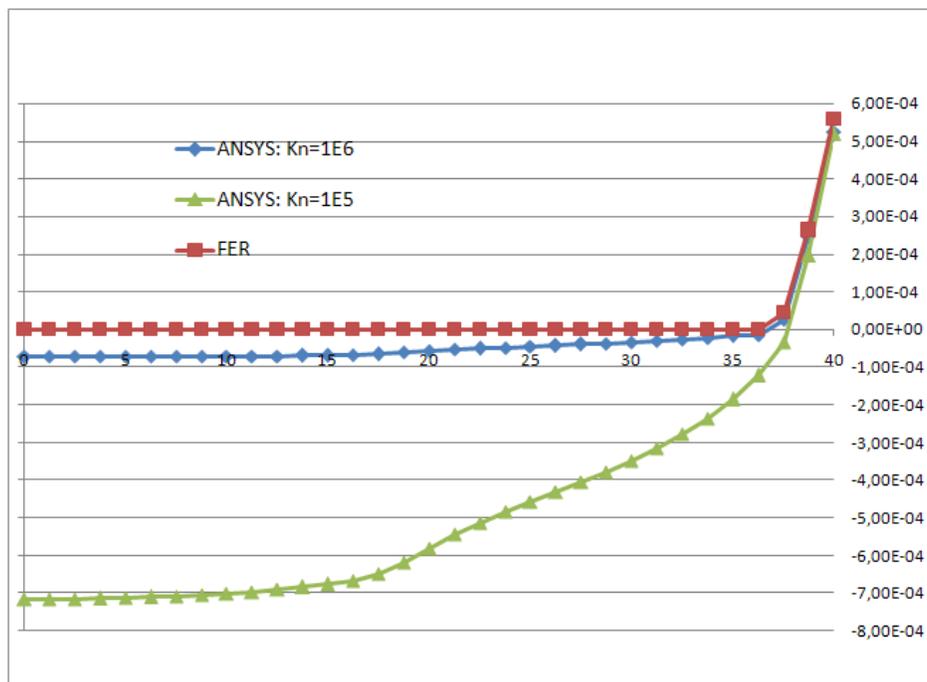


FIG. 2.18: Déplacement normal sur la zone AD

cient de frottement, le code de FER est supérieur à ANSYS par rapport au temps de calcul (tableau 2.1).

TAB. 2.1: Temps de CPU

μ	Code	AB	BC	CD	U_A (mm)	V_A (mm)	CPU (s)
0.0	FER	0	40	0	0.025846	0	4
	<i>ANSYS</i> ¹	0	40	0	0.025838	-0.5E-04	16
	<i>ANSYS</i> ²	0	40	0	0.019072	-0.38823E-05	19
0.4	FER	1.25	35	3.75	0.019122	0.0000178	4
	<i>ANSYS</i> ¹	0	34.9816	4.99963	0.018760	-0.000032	17
	<i>ANSYS</i> ²	0	36.231	3.74995	0.019072	0.0000039	20
0.8	FER	2.5	22.5	15	0.015574	0.0003721	5
	<i>ANSYS</i> ¹	2.498	22.487	14.9996	0.01521	0.0003039	19
	<i>ANSYS</i> ²	2.498	23.7364	13.75	0.015548	0.0003389	22
1	FER	3.75	17.5	18.75	0.014597	0.0005576	6
	<i>ANSYS</i> ¹	2.498	18.7381	18.7496	0.014197	0.0005188	20
	<i>ANSYS</i> ²	3.747	18.7384	17.5	0.014571	0.000524	24
1.3	FER	3.75	15	21.25	0.013642	0.0008009	10
	<i>ANSYS</i> ¹	3.747	14.99	21.2497	0.013193	0.0007985	22
	<i>ANSYS</i> ²	3.747	16.2393	20	0.013598	0.0007858	26

*ANSYS*¹ : facteur de pénalité $K_n = 10^5$; *ANSYS*² : facteur de pénalité $K_n = 10^6$

2.6 Conclusions

Au cours de ce deuxième chapitre, nous avons abordé la résolution des problèmes de contact avec frottement. Dans un premier temps, nous avons rappelé le principe de la méthode des éléments finis. Puis nous avons présenté la cinématique du contact, la loi de contact unilatéral et la loi de frottement. Ensuite nous avons effectué une brève revue des méthodes fréquemment utilisées pour traiter le contact dans la résolution. Enfin, nous avons présenté les résultats numériques donnés par deux algorithmes différents (méthode de pénalité et méthode du bi-potentiel) sur un cas simple de contact avec frottement.

Chapitre 3

Étude des effets mécaniques dans une cellule de la pile

3.1 Introduction

La force de serrage joue un rôle important sur les effets mécaniques au sein de l'assemblage de la PAC, en particulier la force de contact, l'état de contact et la déformation de la GDL qui influent sur la performance de la PAC et sur sa durée de vie. La force de serrage peut être considérée comme un chargement statique par rapport au chargement dynamique en situation de transport. La modélisation numérique de la précompression peut identifier la distribution de la force de contact, la zone de contact et la déformation aux interfaces de la PAC. Le maillage, les conditions aux limites et la précompression représentent le cas réel.

3.2 Simplification et propriétés du modèle numérique

3.2.1 Description et simplification du modèle

Pendant l'assemblage d'un empilement de la pile de PEM, des composants de la structure sont mis en contact. La force de serrage par boulons tirants se transmet au sein de la pile par des points de contact aux interfaces. Le contact dans la structure multi-contact de la PAC existe principalement aux interfaces entre la plaque GDL et la plaque BPP et entre la plaque GDL et la plaque MEA. La distribution de la pression de contact n'est pas uniforme aux interfaces à cause de petits dents présentes sur les BPPs. La force appliquée extérieure et la configuration des plaques aux contacts sont importantes pour la zone de contact. Le problème de contact dans la PAC est impossible à résoudre de manière analytique mais il est réalisable avec la méthode des éléments finis. Dans nos études, les matériaux des composants des piles sont linéaires et élastiques, le modèle de la PAC a été développé en utilisant des hypothèses

suivantes :

1. Toutes les propriétés des matériaux sont isotropes,
2. La force de précompression appliquée est imposée par un déplacement en réalisant la parfaite condition d'étanchéité des joints d'étanchéité dans la PAC,
3. Considérant la symétrie de la structure et des conditions aux limites, la modélisation de la structure peut être simplifiée (figure 3.1),
4. La contrainte dans le modèle n'atteint pas la limite d'élasticité, c'est donc une étude purement élastique,
5. L'étude se limite aux comportements mécaniques des éléments solides constituant la pile. On ne considère jamais la réaction chimique ni les phénomènes fluidiques.

3.2.2 Propriétés mécaniques du modèle

Divers types des piles à combustible existent dans différents domaines : stationnaire, mobile, véhiculaire, aéronautique, etc. Les propriétés des piles dépendent du domaine d'utilisation. Dans nos études, le type des piles de PEM est constitué par la BPP de SGL [All09], la GDL de TGP-H-120 [Jap08] et la MEA de Nafion 117 de Dupont [DuP06] intervenant dans la domaine du transport.

TAB. 3.1: Propriétés mécaniques de la plaque BPP, la plaque GDL et la plaque MEA

Propriétés	Unités	BPP	GDL	MEA
Densité	Kg/m^3	1980	450	1980
Module de Young	Mpa	13000	6.13	64
Coefficient de Poisson		0.21	0.09	0.09
Porosité initiale			78%	
Surface	mm^2	140×140	100×100	100×100

La plaque BPP en graphite vient de la plaque bipolaire de SGL Inc, qui est un matériaux spécialement développé pour la PAC avec super-conducteur du courant électrique. Elle est rigide par rapport à la plaque GDL et à la plaque MEA.

La plaque GDL du type TGP-H-120 vient de TORAY Inc. Elle est en papier carbone avec une porosité initiale élevée, un bon passage gazeux et une résistance électrique basse. De plus, elle est anti-corrosive et son coût est économique.

La plaque MEA est une membrane des électrodes comme la Nafion 117 de Dupont Inc, qui est une membrane commerciale utilisée dans les PACs. La membrane est mince et très conductrice afin de réduire la résistance ionique.

3.3 Modèle des éléments finis de la PAC

Le modèle de la PAC a été réalisé par la méthode des éléments finis, en particulier la création du modèle géométrique, la définition des paramètres, le maillage, la précompression et les conditions aux limites.

3.3.1 Description du modèle

La structure lamellaire d'un empilement des piles est constitué par plusieurs cellules unitaires pour offrir une puissance suffisante. Chaque cellule est une structure symétrique (fig 3.1). De plus, la structure de la demi-cellule est aussi symétrique verticalement (figure 3.1). Parce que la symétrie de la condition aux limites et en particulier le déplacement appliqué sur la plaque BPP est aussi symétrique, un modèle symétrique a donc été pris en compte. Enfin, un modèle 2D est utilisé par rapport au modèle 3D car avec la symétrie de la structure et la symétrie de la charge, aucune différence se trouve dans le profondeur de la structure de la PAC.

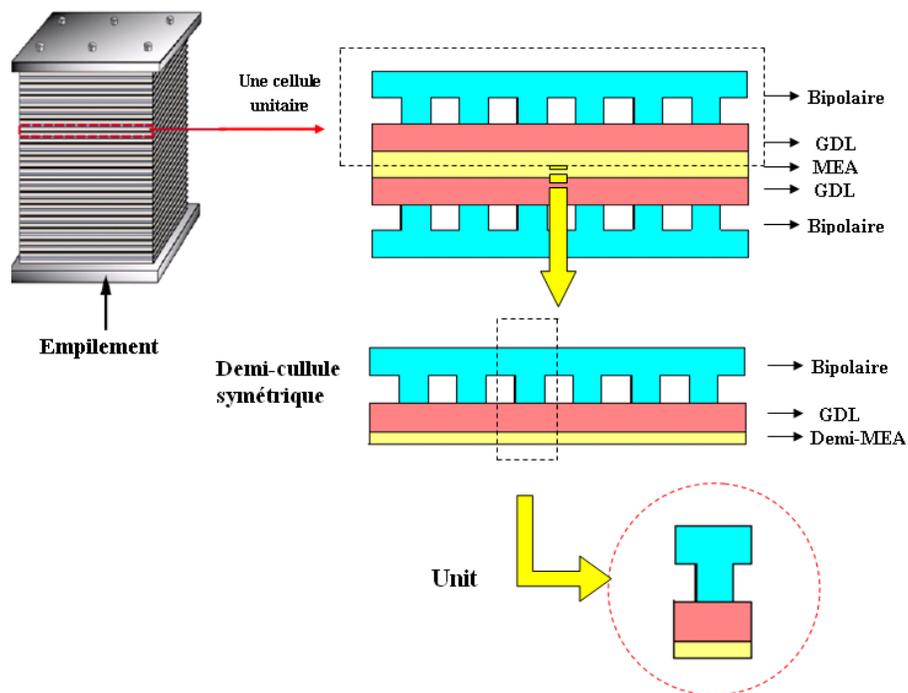


FIG. 3.1: Modèle symétrique 2D de la PAC

Un modèle paramétrique est considéré afin d'éviter des travaux répétitifs de la modélisation, de facilement modifier des paramètres dans le but d'étudier l'influence des paramètres mécaniques sur la performance de la pile. De plus le modèle paramétrique peut servir de base pour de futures études.

La figure 3.2 montre les paramètres définis dans le modèle de contact de la PAC. Des paramètres sont définis comme l'épaisseur de la plaque BPP (T_{BPP}), la largeur de la plaque BPP (W_{BPP}), la largeur des canaux de la plaque BPP (W_{CN}), le profondeur des canaux (T_{CN}), la largeur des dents (W_{RIB}), le rayon du congé des dents (R_{RIB}) de la plaque BPP, l'épaisseur de la plaque GDL (T_{GDL}), la largeur de la plaque GDL (W_{GDL}), l'épaisseur de la plaque MEA (T_{MEA}) et la largeur de la plaque MEA (W_{MEA}). La largeur de la plaque BPP (W_{BPP}) est donc égale à la largeur de la plaque GDL (W_{GDL}) et à la largeur de la plaque MEA (W_{MEA}). La largeur de la plaque BPP (W_{BPP}) est le somme de la largeur des canaux de la plaque BPP (W_{CN}) et de la largeur des dents (W_{RIB}).

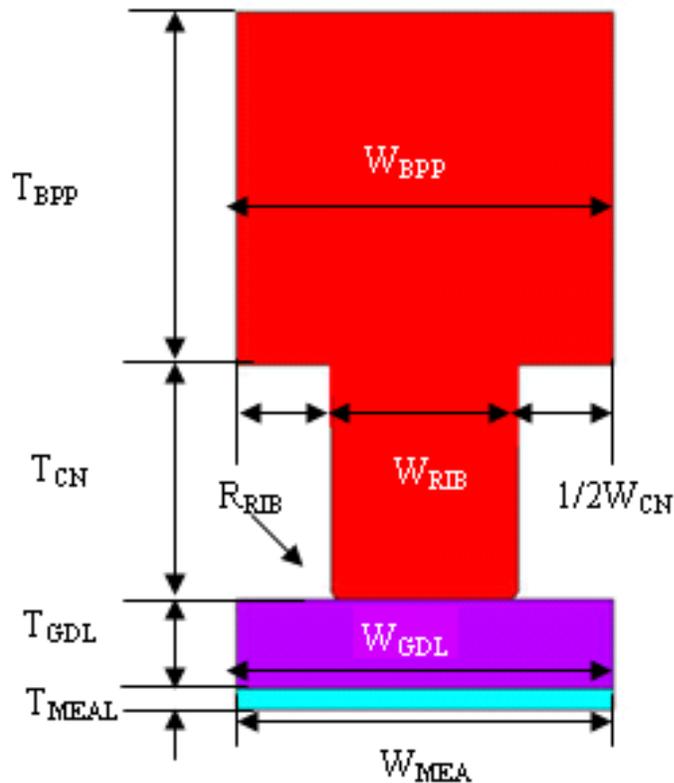


FIG. 3.2: Modèle paramétrique de la PAC

Les propriétés matérielles et géométriques [JL09] sont définies dans le tableau 3.2.

TAB. 3.2: Propriétés et géométries du modèle de contact paramétrique de la PAC

Paramètres	Définitions	Valeurs	Sources
T_{MEA}	Épaisseur de MEA (mm)	0.05	[DuP06]
W_{MEA}	Largeur de MEA (mm)	1.6	[DuP06]
E_{MEA}	Module de Young de MEA (Mpa)	64	[DuP06]
P_{MEA}	Coefficient de Poisson de MEA	0.09	[DuP06]
T_{GDL}	Épaisseur de GDL (mm)	0.375	[Jap08]
W_{GDL}	Largeur de GDL (mm)	1.6	[Jap08]
E_{GDL}	Module de Young de GDL (Mpa)	6.13	[Jap08]
P_{GDL}	Coefficient de Poisson de GDL	0.09	[Jap08]
T_{BPP}	Épaisseur de BPP (mm)	1.5	[All09]
W_{BPP}	Épaisseur de BPP (mm)	1.6	[All09]
W_{CN}	Largeur des canaux de BPP (mm)	0.8	[All09]
T_{CN}	Profondeur des canaux de BPP (mm)	1	[All09]
W_{RIB}	Largeur des dents de BPP (mm)	0.8	[All09]
R_{RIB}	Rayon des congés des dents de BPP (mm)	0.05	[All09]
E_{BPP}	Module de Young de BPP (Mpa)	13000	[All09]
P_{BPP}	Coefficient de Poisson de BPP	0.21	[All09]

3.3.2 Maillage

Dans une modélisation par éléments finis, le maillage est une étape importante. En effet, les résultats d'une simulation numérique dépendent du maillage et en particulier du type et de la taille des éléments. Un maillage très fin permet d'obtenir des résultats précis mais le coût du calcul peut être important. Il faut donc optimiser le maillage et trouver un compromis entre la précision des résultats et le coût de la ressource du calcul numérique.

Dans le modèle de la PAC, l'élément quadrilatéral à 8 nœuds est utilisé. Le maillage est plus fin aux interfaces dans le but de simuler correctement le contact. De plus, un maillage fin est également utilisé au niveau des congés des dents de la BPP car la zone de contact peut potentiellement s'étendre sous la précompression. Pour cette raison, la fine taille des éléments à l'interface est imposée à 0.025 mm et la taille des éléments des autres zones à 0.1 mm. Ainsi, le total nombre des éléments dans le modèle est 964, le nombre des nœuds est 3122.

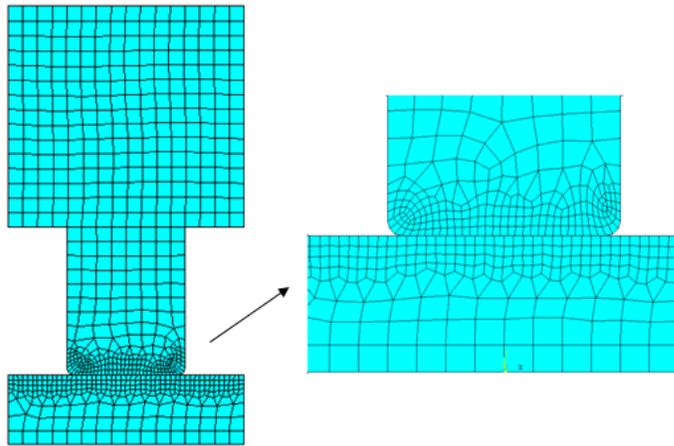


FIG. 3.3: Maillage du modèle éléments finis

3.3.3 Définition de l'objet "zones de contact"

Pour tout problème de contact, nous définissons dans le fichier de données sources une liste de zones potentielles de contact. La schéma 3.4 montre quels sont les éléments constitutifs de chacune de ces zones de contact. Cette façon de déclarer au préalable les zones potentielles de contact a un désavantage : il faut avoir une idée assez précise de ce qui va se passer au cours de la simulation. Dans le cas contraire, il est nécessaire de déclarer toutes les zones de contact possibles.

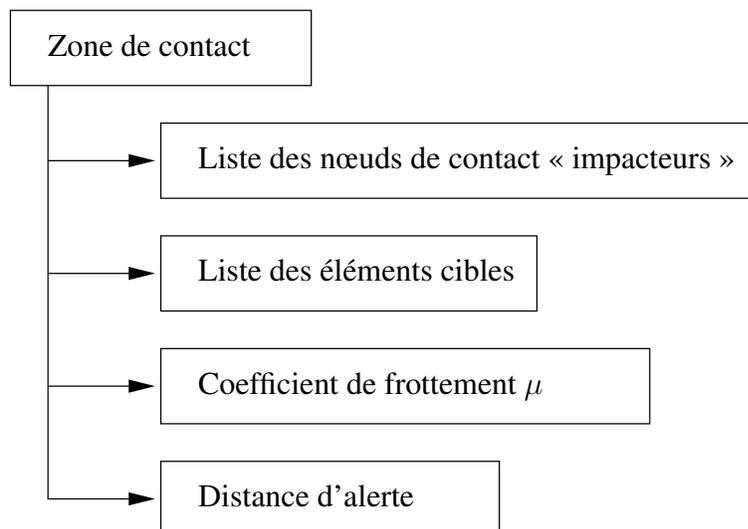


FIG. 3.4: Composantes d'une zone de contact

Par ailleurs, la désignation de l'impacteur et de l'obstacle peut avoir son importance dans le cadre des géométries discrétisées utilisées dans la méthode des éléments finis. En effet, dans le cas de la figure 3.5, si le solide \mathcal{B}^1 est désigné comme impacteur, l'algorithme de détection de contact renseignera que le nœud X est à l'intérieur de \mathcal{B}^1 . Dans le cas contraire,

où \mathcal{B}^2 est désigné comme étant l'impacteur, l'algorithme ne détecte aucun nœud de \mathcal{B}^2 à l'intérieur de \mathcal{B}^1 et renseigne qu'il n'y a pas de contact. Cette difficulté peut aisément être traitée en effectuant deux passages de l'algorithme de détection de contact et en inversant les rôles des deux solides entre les deux passages. Toutefois, il est bon de noter qu'il est préférable de choisir l'objet ayant la surface la plus régulière comme obstacle.

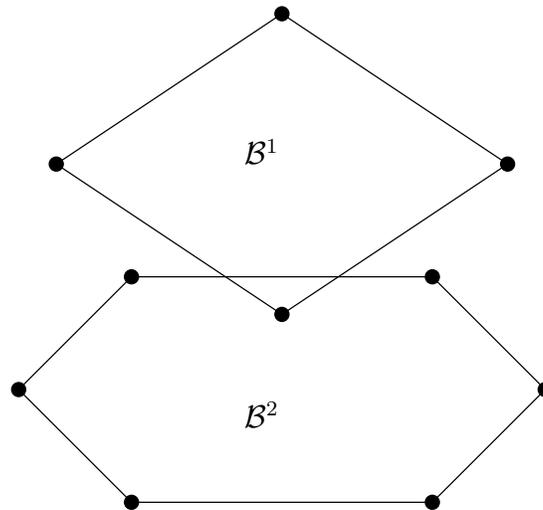
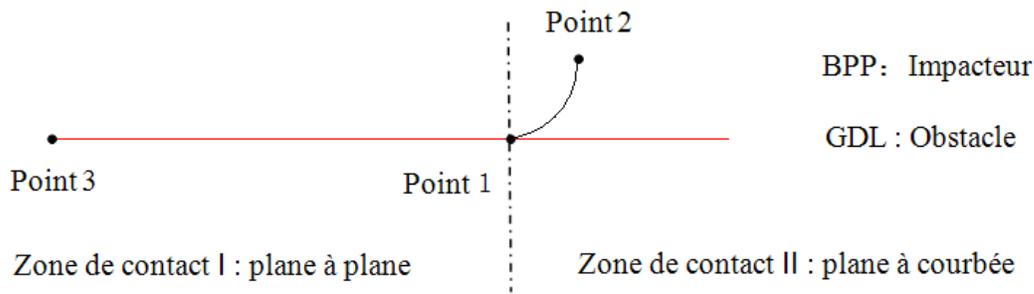


FIG. 3.5: Erreur de détection du contact

Il existe plusieurs autres traitements du contact. En particulier, il est possible (et avantageux) d'adopter un formalisme de type nœud-contre-nœud sous l'hypothèse des petites perturbations. D'autre part, l'utilisation d'une méthode segment-contre-segment en 2D et segment-contre-facette en 3D permet d'éviter l'utilisation d'un algorithme à double passage pour traiter le problème défini sur la figure 3.5 [PL04].

Dans le modèle de la PAC (figure 3.1), le contact existe aux interfaces entre la plaque GDL et la plaque BPP et entre la plaque GDL et la plaque MEA. Le contact entre la plaque GDL et la plaque MEA est de surface plane à surface plane. Le contact entre la plaque GDL et la plaque BPP est différent. La zone de contact à l'interface entre la plaque GDL et la plaque BPP est constituée par deux parties comme indiqué dans la figure 3.6 : une partie est le contact de plan à plan entre la plaque GDL et la partie plane inférieure de la dent de la plaque, l'autre partie est le contact de courbe à plan entre la plaque GDL et le congé de la dent de la plaque BPP. La plaque GDL est comme l'obstacle car sa surface est régulière par rapport à la plaque BPP avec un congé. Ainsi, la surface inférieure de la dent de la plaque BPP est définie comme l'impacteur.



Point 1 : point d'intersection entre le congé et la surface plane

Point 2 : point d'intersection entre le congé et le côté vertical de la dent

Point 3 : point sur l'axe de symétrie

FIG. 3.6: La zone de contact entre les plaques GDL et BPP

3.3.4 Conditions aux limites

Le modèle numérique des éléments finis doit être assorti de conditions aux limites afin de d'empêcher tout mouvement d'ensemble et refléter le cas réel. La figure 3.7 montre les conditions aux limites utilisées. Le chargement de la précompression est imposé sur la ligne (A) à travers un déplacement vertical dont la valeur est obtenue par le niveau de compression des joints soumis à une parfaite condition d'étanchéité des piles. Utilisant la symétrie de la structure, une condition de symétrie est imposée sur la ligne (B), c'est-à-dire, on impose un déplacement horizontal nul à tous les nœuds de (B). La symétrie horizontale de la cellule nous permet d'appliquer un déplacement vertical nul sur les nœuds de la ligne (C) correspondant à la ligne de symétrie au milieu de la plaque MEA. On pourrait encore considérer seulement la demi-structure de celle présentée sur la figure 3.7, ce que l'on fera plus tard.

3.3.5 Chargement de précompression de la PAC

Comme nous l'avons déjà énoncé précédemment dans le chapitre 1, la parfaite étanchéité est une condition indispensable pour le fonctionnement normal de la PAC. Un chargement de précompression est appliqué afin de garantir cette condition. Le chargement est effectué par une force de serrage par boulons tirants dans la PAC. Un niveau de compression suffisant des joints d'étanchéité dépend du chargement appliqué. Un niveau de 25% de compression des joints d'étanchéité est pris en compte dans nos études d'après les expériences de Parsons *et al.* [Par09]. L'épaisseur des joints étant identique à la somme des épaisseurs de la plaque MEA et de la plaque GDL (figure 1.15), l'épaisseur de joints d'étanchéité est de 0.8 mm ($2 * T_{GDL} + T_{MEA}$). Le déplacement imposé reflétant la précompression dans le modèle est 0.2 mm. Pour le demi-modèle symétrique de la PAC, le déplacement appliqué est $UY = 0.1$

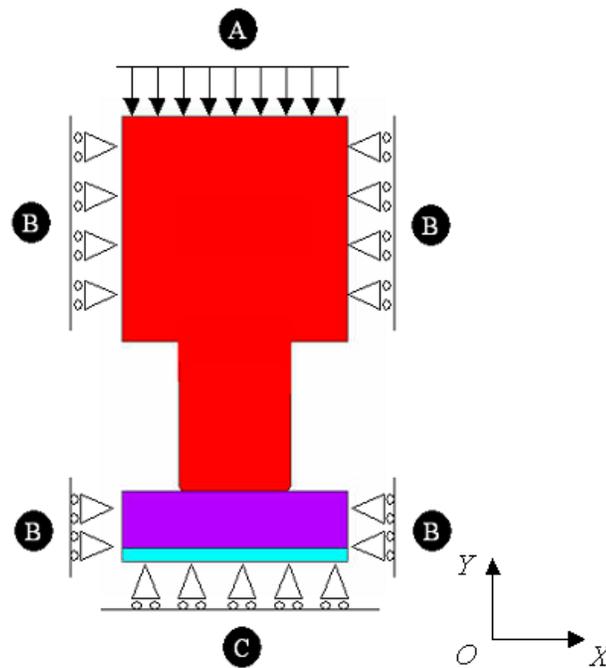


FIG. 3.7: Conditions aux limites et la charge

mm sur la plaque BPP (figure 3.7). Parce que le joint d'étanchéité n'influence ni l'état de contact, ni la déformation, les joints d'étanchéité ne sont pas modélisés dans le modèle de la PAC.

Par ailleurs, l'application d'un déplacement "de serrage", plutôt qu'une force de serrage présente l'avantage de garantir l'uniformité de l'étanchéité et d'éviter toutes les pertes fluidiques dans la pile.

3.4 Études des contacts dans la PAC

3.4.1 Étude de deux zones de contacts (GDL/BPP et GDL/MEA)

Dans un premier temps, un modèle de contact de la PAC avec deux zones de contact sous précompression est présenté, ce sont les zones de contact entre les plaques GDL et MEA, et entre les plaques GDL et BPP.

La figure 3.8 montre une distribution de la déformation du modèle. Sur la figure 3.9, sur laquelle sont représentées uniquement les déformations de la plaque GDL, nous pouvons trouver que le résultat est tout à fait symétrique. La déformation de la plaque GDL est plus importante que les plaques MEA et BPP car son module d'élasticité est faible par rapport aux autres. La zone de la GDL sous la dent de la plaque BPP est évidemment comprimée et la déformation y est négative. La zone initialement en contact reste en contact sur toute la

partie inférieure de la dent. En dehors de cette zone, on remarque que la surface supérieure de la GDL remonte légèrement, le gonflement de la GDL influence l'état de contact de deux interfaces (GDL et BPP, GDL et MEA), ce qui conduit la plaque GDL à s'approcher la plaque BPP et à s'éloigner de la plaque MEA.

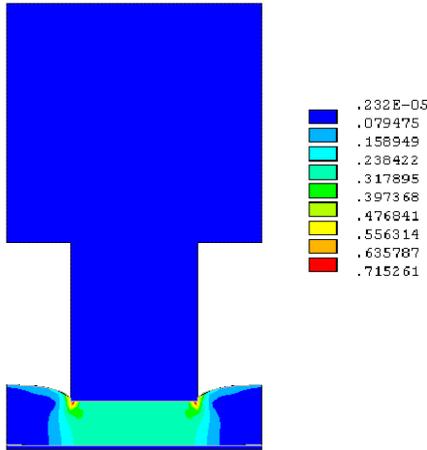


FIG. 3.8: Déformation totale du modèle

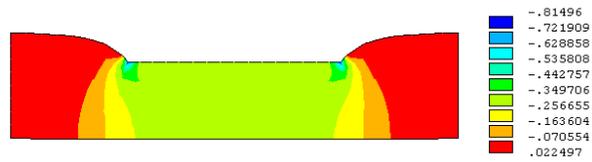


FIG. 3.9: Déformation de la GDL

Sur la figure 3.10 du déplacement normal, une perte de contact apparaît aux extrémités de l'interface entre la plaque GDL et la plaque MEA. La figure 3.11 montre qu'un décollement apparaît à l'interface de la plaque GDL et de la plaque MEA. On retrouve ce décollement lorsqu'on trace les déplacements normaux de la plaque GDL et de la plaque MEA à l'interface. De plus, les figures 3.12 et 3.13 représentant la distribution de la pression sur l'interface des plaques GDL et MEA confirment qu'il y a une zone de pression nulle où le décollement apparaît.

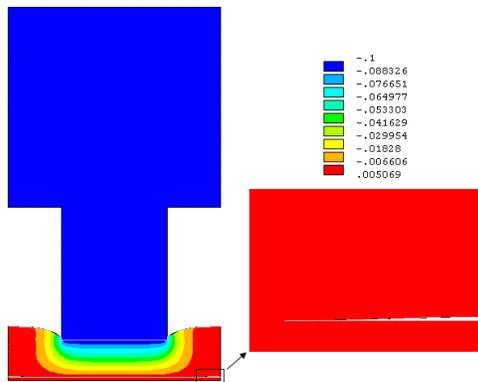


FIG. 3.10: Une séparation de contact

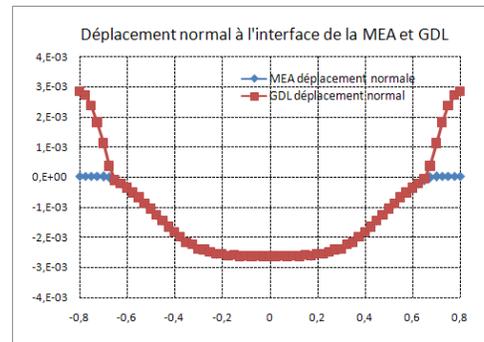


FIG. 3.11: déplacement normal

Le décollement entre la plaque MEA et la plaque GDL conduit à l'augmentation de la résistance de contact ce qui est très dommageable pour la performance de la pile. En plus, le gonflement de la GDL dans le canal de la plaque BPP, même s'il est faible, diminue le

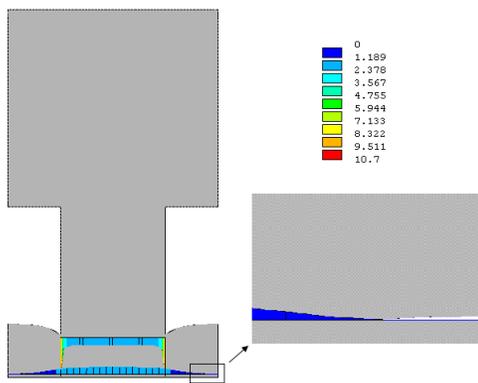


FIG. 3.12: Pression nulle

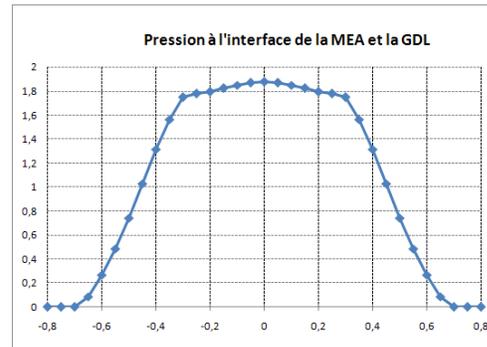


FIG. 3.13: Distribution de la pression

volume du canal, peut gêner la circulation fluïdique et diminuer l'efficacité de la réaction de la PAC. Ainsi une technologie comme le recuit thermique (Thermal annealing) [HWDA07] doit être appliquée à l'interface entre la plaque GDL et la plaque MEA afin d'éliminer la séparation de contact et diminuer le gonflement de la GDL dans le canal de la BPP. Le recuit est réalisé sous une température optimale avec une compression suffisante. Des catalyseurs sont insérés entre la plaque GDL et la plaque MEA afin de coller les deux plaques et diminuer la résistance de contact. Pour cette raison, un collage des deux plaques (GDL et MEA) a également été toujours réalisé dans le modèle numérique de la PAC. Le collage permet d'éviter le mouvement relatif des nœuds à l'interface entre la plaque GDL et la plaque MEA, et de réaliser un contact parfait entre la plaque GDL et la plaque MEA. Dans les études suivantes, on prend en compte ce collage.

3.4.2 Étude d'une zone de contact (GDL/BPP) avec l'angle droit

On considère maintenant une seule zone de contact entre la plaque GDL et la plaque BPP. Ce contact a lieu sur l'interface entre la surface supérieure de la plaque GDL et la surface inférieure de la dent formant le canal qui est gravé sur la plaque bipolaire. Ainsi la topologie de la BPP a un rôle dans ce contact interfacial. En effet une dent rectangulaire de la BPP peut conduire au problème mécanique comme la fissure sur la plaque GDL observée par Su *et al.* [SLC⁺08]. La fissure de la plaque GDL peut être provoquée par la concentration de contraintes sur la surface supérieure en contact avec les angles droits des dents de la plaque BPP.

La figure 3.14a montre la distribution de la contrainte $\sigma_{Vonmises}$ dans les plaques GDL, BPP et MEA. Sur la figure 3.14a, nous retrouvons bien un résultat symétrique, le modèle et le chargement étant symétriques. La contrainte maximale apparaît évidemment aux coins des dents rectangulaires qui sont en contact. Avec une concentration de contrainte de 10.1 Mpa, cela peut conduire à la fissure mécanique à l'interface de la GDL [BGGM08]. La figure 3.14b

donne la distribution de la pression de contact à l'interface. Nous constatons que la pression est la plus élevée aux angles des dents rectangulaires, elle est de 9.02 Mpa. En revanche, en dehors de cette zone, la pression peut être considérée comme uniforme le long de la zone de contact. Par rapport à la pression maximale, la plus petite pression de 1.5 Mpa sur l'interface apparaît sur l'axe de symétrie (c'est-à-dire, $X = 0$ sur la figure 3.14b).

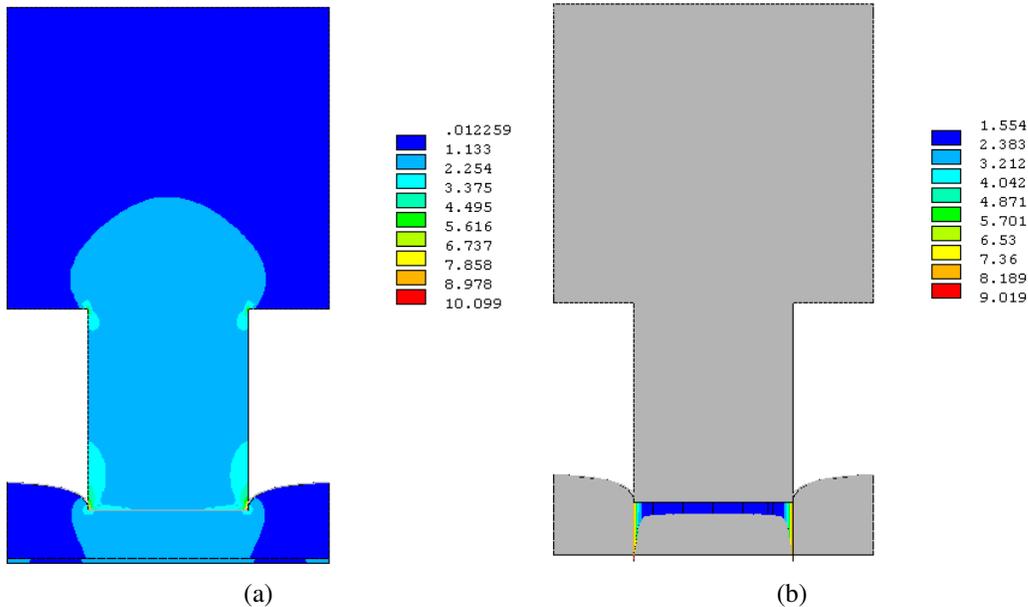


FIG. 3.14: (a) Concentration de contrainte et (b) pression de contact

Le modèle présenté ici met en évidence une concentration de contraintes due à la forte pression de contact aux angles des dents. Cette concentration peut être la cause de fissure mécanique dans la plaque GDL comme celle étudiée par Su *et al.* [SLC⁺08]. Stanic *et al.* [SH04] ont étudié que l'endommagement au sein de la pile intervient souvent dans la zone de la concentration de contraintes, une pression et contrainte élevée à l'interface causent des dommages sur la plaque GDL et raccourcissent la durée de vie de la PAC.

De plus, la non uniformité de la pression de contact sur la plaque GDL est aussi un paramètre important pour la performance de la PAC. Comme le montre de l'expérience de Wang *et al.* [WSZ08], plus la distribution de la pression est uniforme, plus l'état de contact et la résistance de contact sont uniformes, plus la performance des piles est bonne. Il faut donc chercher un moyen permettant de réduire cette concentration de contraintes. L'angle droit représente une singularité géométrique responsable de cette pression élevée. En remplaçant cet angle par un congé, la concentration devrait s'atténuer.

3.4.3 Modélisation avec congé au niveau de la dent

Pour éviter les problèmes de concentration de contraintes avec la dent rectangulaire de la BPP évoqués précédemment, on remplace donc l'angle droit par un congé de rayon R_{RIB} .

Le but de ce congé au niveau de la dent de la plaque BPP est de diminuer la concentration de contrainte et d'améliorer l'uniformité de la pression à l'interface entre les plaques GDL et BPP. Les résultats obtenus seront comparés avec les résultats d'une zone de contact avec une dent rectangulaire. L'aire de contact à l'interface entre les plaques GDL et BPP et la déformation de la plaque GDL vont aussi être présentées dans cette partie.

Pour affiner la modélisation à l'interface dent de la BPP/GDL, on utilise toutes les symétries pour réduire au minimum la géométrie (figure 3.15a).

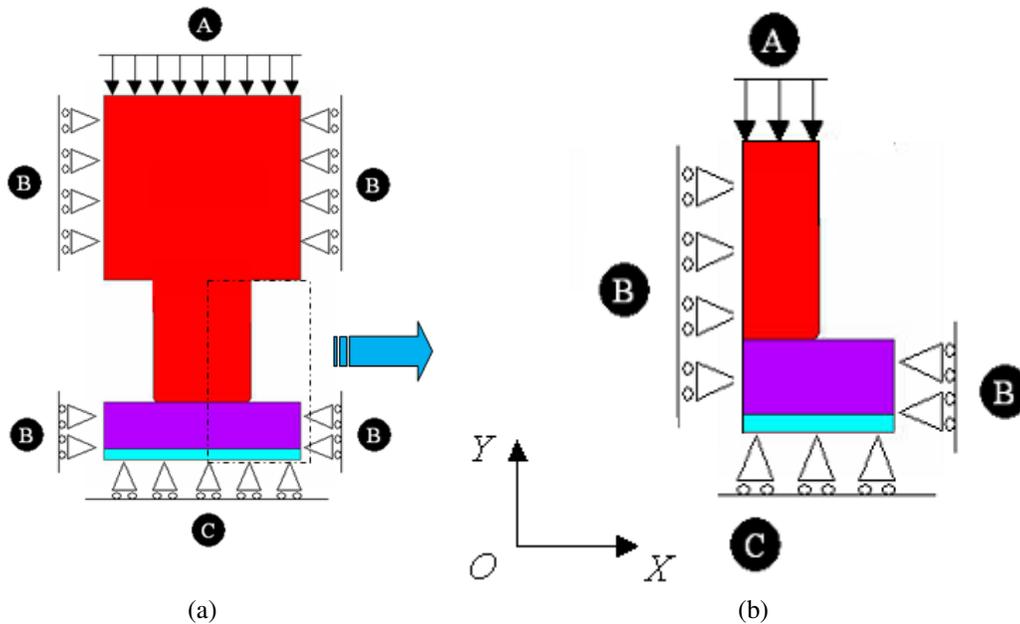


FIG. 3.15: (a) Modèle du contact actuel et (b) modèle symétrique

Sur la figure 3.15b, les conditions aux limites n'ont pas changé, sauf une condition de symétrie ($U_x=0$) verticalement sur B, le déplacement sur la surface supérieure de la plaque BPP n'influence pas le résultat numérique car la déformation de la plaque BPP peut être négligée grâce à sa rigidité élevée. Aussi pouvons nous appliquer ce même déplacement sur la partie supérieure de la dent (A). Les propriétés et géométries du modèle de contact de la PAC restent les mêmes (tableau 3.2). Le maillage contient 892 nœuds et 266 éléments (figure 3.16a).

3.4.3.1 Contrainte dans les plaques

Afin de garantir la durée de vie des composants de la PAC, une étude la contrainte maximale sur les composants fragiles, comme les plaques MEA et GDL est aussi réalisée.

La figure 3.17a montre la distribution de la contrainte de Von-mises dans les plaques. Nous constatons que la contrainte maximale (zone rouge : 3.352 Mpa) est présente au niveau des congés des dents de la plaque BPP. Par rapport aux contraintes (10.1 Mpa) avec une

dent rectangulaire (figure 3.14a), la concentration de contraintes est divisée par 3. De plus, la contrainte maximale de la plaque MEA (figure 3.17b) est de 2.87 Mpa. Un congé est permet donc d'éviter la concentration de contraintes dans la plaque GDL mais aussi la concentration de contraintes dans la plaque MEA (Stanic *et al.* [SH04]).

Pour une température de 23°C avec une humidité de 50%, la limite élastique de la plaque MEA est de 43 Mpa. Dans le cas de l'eau infiltré, la limite élastique de la plaque MEA est de 34 Mpa ; dans le cas de l'eau infiltré et une température de 100°C, la limite élastique s'abaisse à 25 Mpa. Par contre, la limite élastique de la plaque GDL de la série de TGP-H de TORAY est 40 Mpa. Les contraintes dans les plaques GDL et MEA de notre modèle sont encore loin de la limite élastique des matériaux. C'est donc bien une étude élastique.

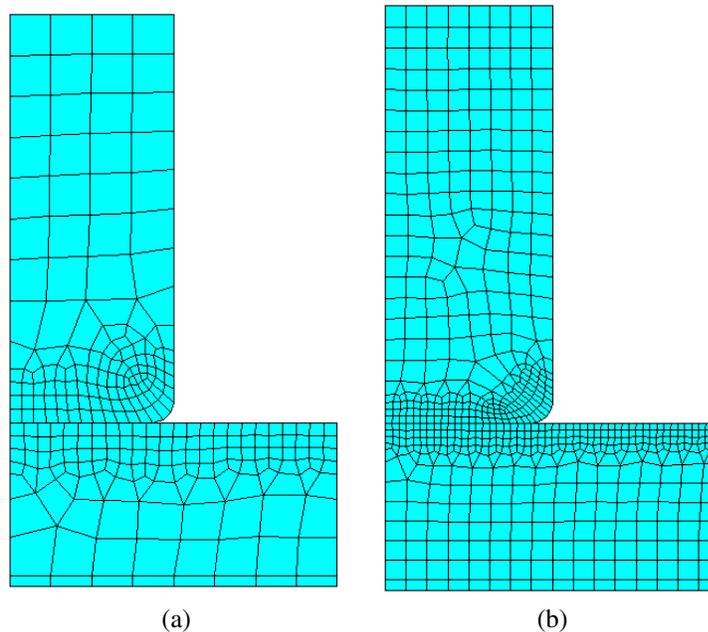


FIG. 3.16: (a) Maillage et (b) Maillage fin

Pour étudier l'influence de la taille du maillage sur la précision de la contrainte, nous avons comparé la contrainte avec un maillage différent. Sans changer la géométrie et les conditions aux limites, on affine le maillage. La taille des éléments passe de 0.0125 mm dans la zone de contact contre 0.025 mm avant. Dans les autres zones, la taille des éléments est diminuée : 0.05 mm contre 0.1 mm avant, le nouveau nombre d'éléments dans le modèle numérique est 623 et le nombre des nœuds est 2039.

La distribution des contraintes avec le maillage fin (figure 3.18a) montre que la contrainte maximale de la plaque GDL est de 3.359 Mpa et la contrainte maximale de la plaque MEA est de 2.88 Mpa. Si on compare avec les valeurs précédentes, la différence des contraintes est de 0.01 Mpa, l'ancien maillage était donc déjà suffisant pour la précision attendue. Pour les études suivantes, on conserve donc le maillage initial avec les tailles d'éléments suivantes : 0.025mm à l'interface entre la GDL et la BPP et 0.1 mm dans les autres zones du modèle de

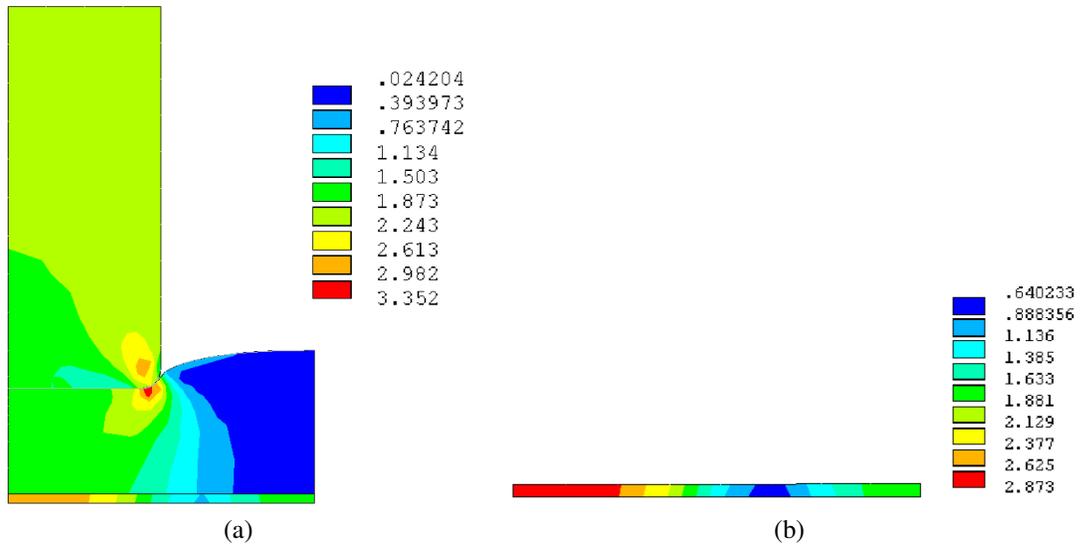


FIG. 3.17: (a) Contraintes de trois plaques et (b) contraintes de la MEA

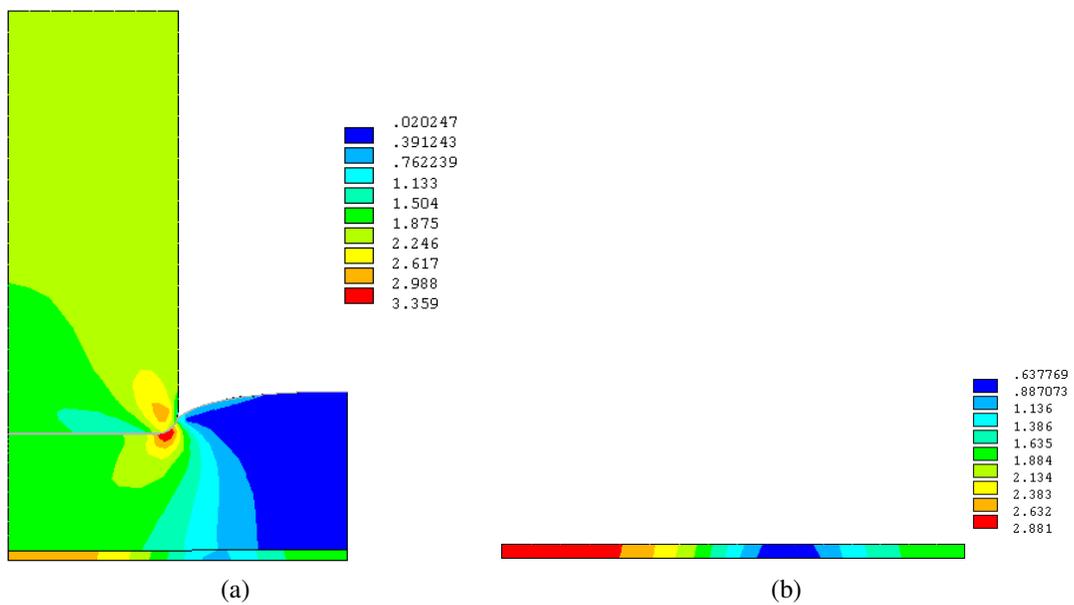


FIG. 3.18: (a) Contraintes de trois plaques et (b) contraintes de la MEA avec maillage fin

contact de la PAC.

3.4.3.2 Pression de contact

La distribution et l'uniformité de la pression de contact à l'interface vont être étudiées.

La figure 3.19a montre la distribution de la pression de contact entre la plaque GDL et la plaque BPP. Cette distribution dépend de la zone de contact (figure 3.6), qui est plan à plan puis courbe à plan. La pression le long de la zone de contact plan à plan est presque uniforme, alors qu'elle varie dans la zone de contact correspondant au congé.

La pression maximale est toujours localisée au niveau du congé de la dent de la plaque BPP (figure 3.19b) car le congé ne permet pas d'annuler complètement l'effet de l'angle droit. Toutefois, la valeur maximale est inférieure (3.44 Mpa), contre 9.02 Mpa (figure 3.14b) en présence de l'angle droit.

Sur la zone de contact coïncidant avec l'axe de symétrie ($x=0$), la pression est de 1.86 Mpa ce qui représente la valeur de la pression uniforme sur la zone de contact surface à surface. Par rapport à la pression maximale obtenue dans le modèle avec congé, la différence de pression à l'interface est de 1.58 Mpa. L'uniformité de la pression à l'interface a été améliorée par rapport au modèle avec l'angle droit pour lequel la différence de pression était de 7.5 Mpa. La présence d'un congé à la place de l'angle droit sur la dent de la plaque BPP permet donc de diminuer la concentration de contraintes et d'améliorer l'uniformité de la pression à l'interface.

De plus sur la zone de contact courbe à plan, correspondant au congé de la dent (figure 3.19b), la pression augmente jusqu'à la zone jaune et rouge puis diminue régulièrement comme la théorie de Hertz peut le prévoir. En plus, le changement de la pression au congé aussi montre que l'état de contact peut aussi changer au congé de la dent de la plaque BPP.

3.4.3.3 Aire de contact (longueur de contact)

Nous avons vu au chapitre 1 que la performance de la pile est liée à la conductivité électrique. Or, la capacité de la conductivité électrique entre la GDL et la BPP dépend de la résistance de contact et l'aire de contact à l'interface. Un contact parfait entre la plaque GDL et la plaque BPP permet d'obtenir une petite résistance et une bonne performance de la PAC. Si l'on regarde maintenant l'étendue de la zone de contact : avec un angle droit sur la dent de la plaque BPP, le contact a lieu seulement sur la surface rectiligne inférieure et s'arrête au niveau de l'angle droit. Avec un congé à la place de l'angle droit, le contact va s'étendre le long du congé, au delà de la surface rectiligne. L'étendue de la zone de contact est donc plus grande.

L'aire de contact peut être obtenue en additionnant toutes les longueurs des éléments en contact. La demi longueur maximale de la zone de contact avec le congé est $W'_{RIB} =$

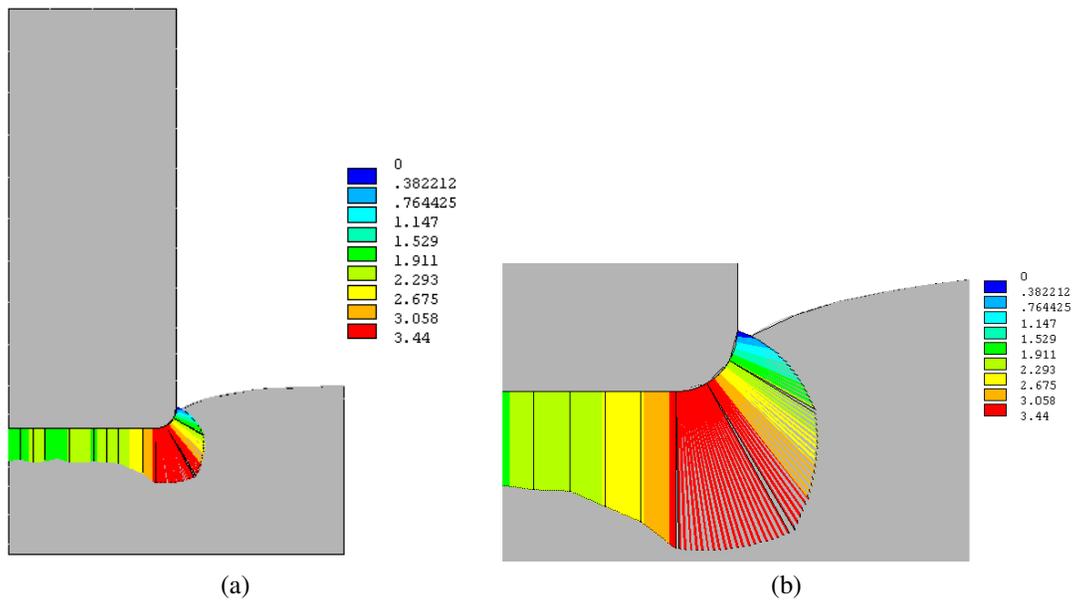


FIG. 3.19: (a) Pression à l'interface et (b) pression agrandie aux fonds des congés

$\frac{W_{RIB} + (\pi - 2) \times R_{RIB}}{2} = 0.42854$ mm. Le contact est insuffisant si la zone de contact n'atteint pas cette dimension.

Les éléments en contact sont détectés selon la condition Signorini. Sous une précompression de 0.1 mm, l'aire de contact de tous les éléments de contact à l'interface est indiquée dans le tableau 3.3 :

TAB. 3.3: Aire de contact à l'interface entre la plaque GDL et la plaque BPP

No. éléments	Longueur de contact (mm)	No. éléments	Longueur de contact (mm)
291	0.29163E-01	299	0.29166E-01
292	0.29166E-01	300	0.29167E-01
293	0.29167E-01	301	0.29167E-01
294	0.29167E-01	302	0.29167E-01
295	0.26177E-01	303	0.29167E-01
296	0.29165E-01	304	0.26174E-01
297	0.29164E-01	305	0.26175E-01
298	0.29167E-01		

La somme des longueurs des éléments de contact est de 0.42852 mm ce qui est très proche de la valeur théorique. Avec une précompression de 0.1 mm, la plaque GDL et la plaque BPP sont donc parfaitement en contact à l'interface, la structure lamellaire de la PAC a une résistance de contact minimale et une meilleure performance.

3.4.3.4 Déformation de la plaque GDL

Le congé peut améliorer la concentration de contrainte à l'interface, et la précompression élevée permet d'obtenir une petite résistance de contact dans la structure de la PAC. Un phénomène mécanique inévitable est la déformation de la GDL amenée par la précompression de la PAC. La déformation élevée peut conduire à une faible perméabilité de la plaque GDL ce qui influence la performance de la PAC. Parce que la capacité des GDLs à transporter des gaz réactifs est mesurée par la perméabilité, une petite perméabilité de la plaque GDL conduit à une alimentation des gaz insuffisante et une perte de performance de la PAC. Ainsi une petite déformation de la plaque GDL est préférable pour la PAC.

La non uniformité de la distribution de la pression conduit à une distribution non uniforme de la déformation à l'interface ce qui conduit à la non uniformité de la porosité et de la perméabilité de la GDL existant à l'interface entre les plaques GDL et BPP. La déformation élevée conduit à une petite porosité et une petite perméabilité de la GDL (d'après les équations 1.17 et 1.22), qui conduisent à une difficulté d'alimenter les gaz réactifs et à une perte de performance de la PAC. Ainsi la distribution de la déformation de la GDL locale est étudiée afin de connaître son interaction sur la performance des piles.

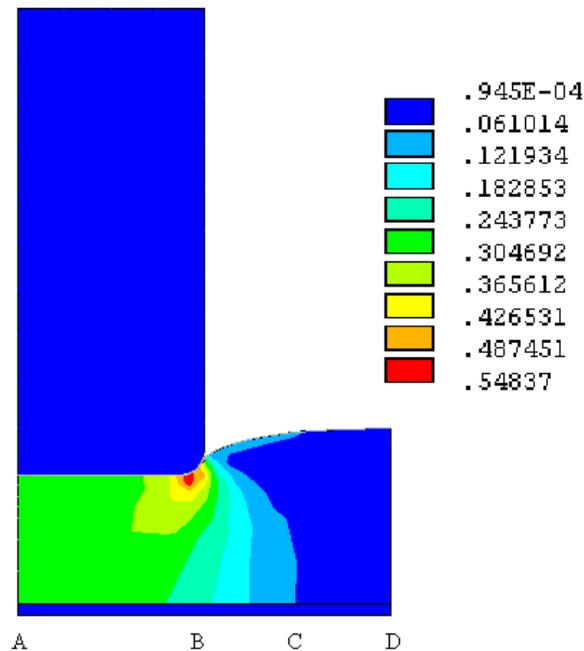


FIG. 3.20: Déformation de la plaque GDL, dont zone AB : zone comprimée sous la dent de la BPP ; zone BC : zone proche de la dent et sous le canal de la BPP ; zone CD : zone loin de la dent et sous le canal de la BPP.

La figure 3.20 montre la distribution de la déformation du modèle de la PAC. Parmi les trois composants (MEA, GDL et BPP), la déformation principale du modèle concerne la plaque GDL, la déformation maximale de la plaque GDL est de 0.548. En effet les plaques

MEA et la BPP sont plus rigides que la plaque GDL. La déformation maximale parmi des plaques MEA et BPP est $9.45E-5$, ce qui peut être négligé par rapport à la déformation de la GDL.

Sur la figure 3.20, la distribution de la déformation correspond à la distribution de la contrainte (figure 3.18a). Pour bien étudier la distribution de la déformation de la plaque GDL, la plaque GDL est divisé par trois zones. La zone AB est la zone comprimée sous la dent de la BPP ; la zone BC est la zone proche de la dent et sous le canal de la BPP ; et la zone CD est la zone loin de la dent et sous le canal de la BPP. La déformation de la plaque GDL a principalement lieu sur les zones AB et BC, la zone CD n'est quasiment pas déformée. La zone AB de la GDL située sous la dent de la plaque BPP est évidemment comprimée. De plus, la zone supérieure de BC et CD de la GDL est gonflée.

La zone comprimée et la zone gonflée peuvent individuellement influencer la performance de la PAC. En effet, la déformation importante de la zone AB de la plaque GDL peut entraîner une perte de porosité. Quand au "gonflement" de la partie supérieure de la zone BC, il va provoquer une diminution de la surface du canal de la plaque BPP entraînant, ainsi une accélération du flux des gaz et donc une diminution du temps réactifs des gaz.

Dans la zone comprimée AB de la GDL, la déformation maximale de la plaque GDL de 0.548 apparaît aux points inférieurs des dents de la BPP ; vers l'axe de symétrie, la distribution de la déformation est plus uniforme. Sous la précompression de la PAC, le changement de la déformation est donc à surveiller au niveau des congés des dents de la BPP.

La GDL est en papier carbone, son rôle est de fournir les gaz réactifs et d'évacuer l'eau. La couche GDL a une porosité initiale élevée qui lui permet d'acheminer les gaz efficacement. La porosité initiale de la GDL de TORAY est par exemple de 78%. Pendant l'assemblage de l'empilement de la PAC, la déformation de la plaque GDL augmente, alors que la porosité ou la perméabilité de la GDL diminue. La porosité minimale de la GDL apparaît au niveau des congés où la déformation de la GDL est la plus élevée. Par contre autour la zone de l'axe de symétrie, la déformation est plus uniforme et inférieure à la déformation maximale. Sur la figure 3.20, la déformation maximale au fond du congé $\varepsilon_v = \varepsilon_x + \varepsilon_y = 0.73$; la déformation sur l'axe de symétrie $\varepsilon'_v = \varepsilon'_x + \varepsilon'_y = 0.3$. Selon l'équation 1.22, la porosité de la GDL au fond du congé est presque 18%, la porosité de la GDL sur l'axe de symétrie est de 69%. Par rapport à la porosité initiale de la GDL (78%), la porosité de la GDL a donc effectivement diminué, la plus importante baisse se situant au niveau du congé. Il faut noter que la diminution de la porosité est inévitable sous une précompression de la PAC qui garantie la parfaite étanchéité. Cependant la précompression peut être contrôlée à un niveau acceptable permettant d'obtenir une aire de contact élevée pour une résistance de contact minimale une porosité correcte, tout en garantissant l'étanchéité de l'empilement des piles.

3.4.3.5 Déformation de la plaque GDL avec pores

Comme nous l'avons vu, la porosité de la plaque GDL est décrite par l'équation 1.22, notamment la porosité aux zones locales. Bien que l'équation 1.17 puisse donner une perméabilité précise de la plaque GDL, elle ne permet pas facilement d'étudier le changement de la porosité de la plaque GDL. Une description globale de la porosité est pourtant nécessaire pour connaître le changement de la porosité. Un modèle numérique tenant compte de petits pores qui existent dans la plaque GDL va permettre d'étudier ce phénomène. La taille du rayon r_i et le nombre de petits pores n_p sont importants et sont déterminés par la porosité initiale de la plaque GDL φ_0 et par le volume de la plaque GDL V_t . Le volume poreux V_p ($V_p = V_t \times \varphi_0$) est défini par l'équation :

$$V_p = \sum_{i=1}^{n_p} \pi r_i^2 \quad (3.1)$$

Un modèle éléments finis pour étudier la porosité globale est présenté sur la figure 3.21a, ce modèle est soumis aux mêmes conditions aux limites que le modèle précédent (figure 3.15b), la porosité initiale de la plaque GDL est de 78%.

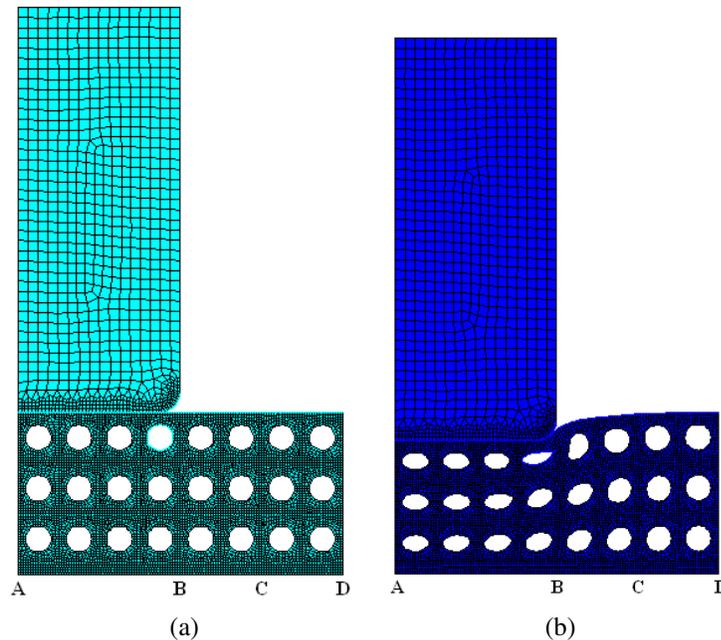


FIG. 3.21: (a) Plaque GDL avec des pores avec $n_p = 24$ et porosité de 78% de la GDL (b) porosité globale de la GDL après déformation, dont zone AB : zone compressée sous la dent de la BPP ; zone BC : zone proche de la dent et sous le canal de la BPP ; zone CD : zone loin de la dent et sous le canal de la BPP.

La porosité globale de la GDL après déformation est montrée dans la figure 3.21b. La porosité minimale de la GDL apparaît sous le congé de la dent de la BPP. Ce résultat corres-

pond au résultat obtenu par l'équation 1.22, parce que le pore sous le congé de la dent de la BPP a la déformation maximale comme nous avons étudié dans la figure 3.20. Pour les trois autres pores autour de l'axe de symétrie dans la zone AB, la porosité est plus uniforme que pour le pore sous le congé ce qui correspond à la conclusion ce que nous avons obtenu par l'équation 1.22.

Par ailleurs, la figure 3.22 montre la porosité de toute la plaque GDL après déformation et la porosité initiale de la GDL. Sur la figure 3.22, nous pouvons voir que le changement de la porosité des pores en zone AB est supérieur à la zone BC, qui lui-même est supérieur à la zone CD. La zone CD n'a pas changé, sa porosité correspond à la porosité initiale. En plus, le changement de la porosité des pores supérieurs de la GDL est plus important que les pores intermédiaires qui est lui-même plus important que les pores inférieurs de la GDL. C'est donc un modèle intéressant permettant de décrire la porosité totale de la GDL après déformation.

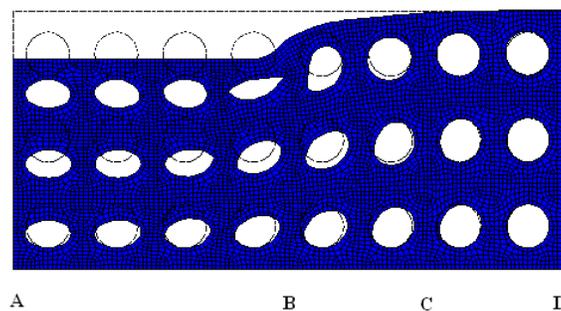


FIG. 3.22: Porosité de la GDL déformée et porosité initiale de la GDL

La figure 3.23 montre le même exemple mais avec une porosité initiale de 50% de la plaque GDL.

Sur la figure 3.23, nous pouvons voir que le changement de la porosité dans la plaque GDL est identique à la description de la figure 3.22, mais à cause d'une porosité initiale plus faible, le pore au fond du congé est plus comprimée que sur la figure 3.22.

D'après le résultat numérique de la distribution de la porosité totale de la GDL, on peut noter que la taille des pores aux zones importantes où la déformation est maximale doit être optimisée pendant la fabrication afin de garantir une porosité suffisante.

En réalité, la distribution des pores dans la plaque GDL n'est sûrement pas uniforme comme dans le modèle très simple précédemment décrit (figure 3.21a). Un modèle éléments finis a donc été développé avec une distribution aléatoire des pores dans la plaque GDL (figure 3.25a). Les espaces blancs sont les pores dans la plaque GDL. Ce modèle est toujours soumis aux mêmes conditions aux limites que le modèle de la figure 3.15b.

La porosité globale de la GDL avec des pores distribués aléatoirement est indiquée dans la figure 3.25b. La distribution des pores dans la GDL étant aléatoire, la taille et le nombre des pores sont incertains, mais l'espace des pores est soumise à la condition d'une porosité

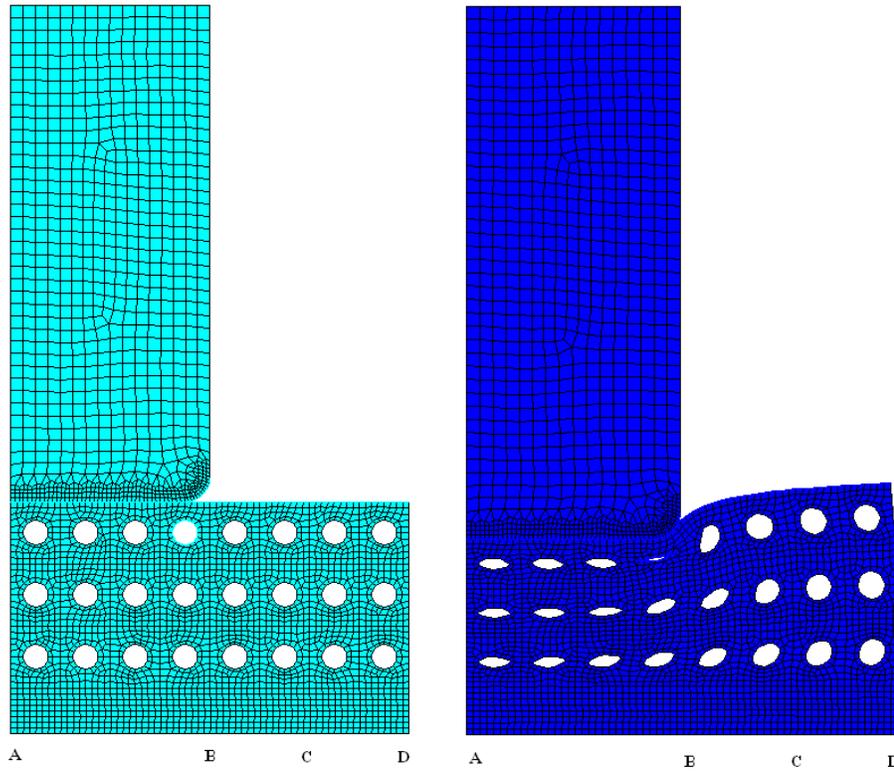


FIG. 3.23: (a) Plaque GDL avec des pores avec $n_p = 24$ et porosité de 50% de la GDL (b) porosité globale de la GDL après déformation, dont zone AB : zone compressée sous la dent de la BPP ; zone BC : zone proche de la dent et sous le canal de la BPP ; zone CD : zone loin de la dent et sous le canal de la BPP.

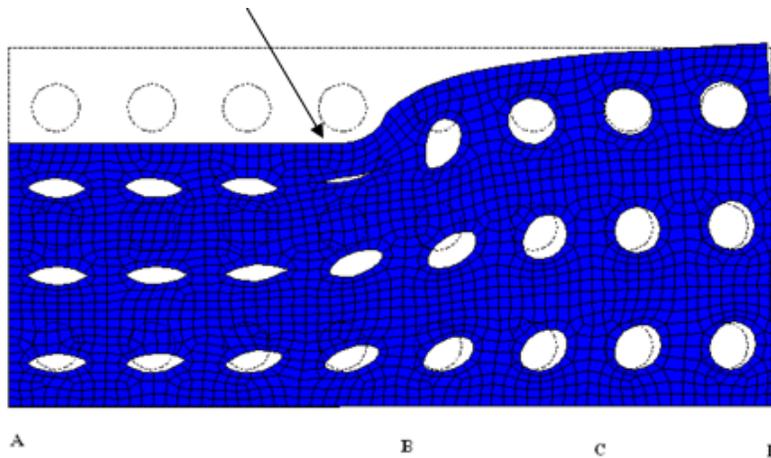


FIG. 3.24: Porosité de la GDL déformée et porosité initiale de la GDL

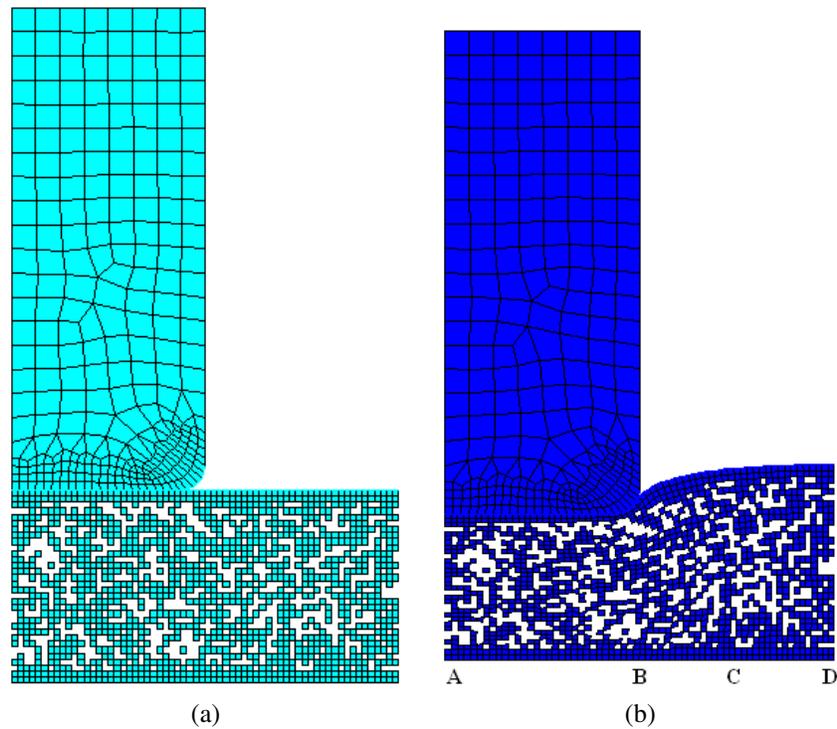


FIG. 3.25: (a) Modèle de distribution aléatoire des pores et (b) porosité globale de la GDL après déformation, zone AB : zone comprimée sous la dent de la BPP ; zone BC : zone proche de la dent et sous le canal de la BPP ; zone CD : zone loin de la dent et sous le canal de la BPP.

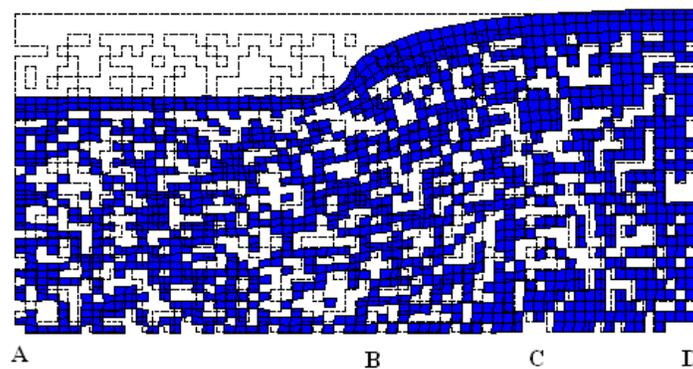


FIG. 3.26: Porosité de la GDL déformée et porosité initiale de la GDL

initiale de 78%, la déformation d'un petit pore dans la GDL n'est pas aussi évidente que sur la figure 3.21b. Cependant nous pouvons encore contrôler que la plus grande déformation apparaît au niveau des congés des dents de la BPP, mais on ne peut pas dire que la porosité minimale est encore localisée ici parce que la distribution des pores étant aléatoire, la taille des trous n'est pas uniforme dans la plaque GDL. La porosité dans la partie inférieure du congé est encore grande ce qui est mieux pour alimenter des gaz réactifs. La diminution de la porosité dans la zone AB est supérieure à la diminution de la porosité dans la zone BC qui elle même est supérieure à la diminution de la porosité dans la zone CD. Cette situation est montrée dans la figure 3.26.

Par rapport à la structure uniforme des pores dans la plaque GDL (figure 3.22), une distribution aléatoire des pores paraît meilleure pour conserver une porosité suffisante.

3.5 Conclusions

Dans ce chapitre, nous avons présenté un modèle éléments finis d'une cellule de la PAC (maillage, conditions aux limites, définition des zones de contact). Nous avons vu qu'un décollement apparaissait entre la plaque GDL et la plaque MEA. Un recuit permet de s'affranchir de ce problème. En considérant ces deux éléments collés, nous avons ensuite vu que l'angle droit de la dent de la plaque BPP engendrait une concentration de contraintes. L'utilisation d'un congé permet de réduire ce problème. Les pressions de contact et les aires de contact ont ici été étudiés dans les deux cas : avec l'angle droit et avec le congé. Différents maillages ont également été utilisés pour voir leur impact sur les résultats. Enfin, la déformation de la plaque GDL est étudiée pour décrire la porosité de la plaque GDL en utilisant un modèle éléments finis avec des pores.

Chapitre 4

Influence des principaux paramètres sur la performance des piles

4.1 Introduction

D'après l'étude menée dans le chapitre précédent, nous avons vu que certains effets mécaniques ont des influences importantes sur la performance de la PAC et sur la durée de vie. Notamment la contrainte, la déformation, la pression de contact et l'aire de contact peuvent être responsables d'une diminution de la performance de la PAC. Ces effets mécaniques dépendent des paramètres de la PAC comme la précompression, les propriétés des composants, et les paramètres géométriques de l'interface. Une étude de ces paramètres s'avère nécessaire pour obtenir la meilleure performance possible de la PAC et optimiser sa structure.

Dans cette partie, une étude sera effectuée sur les influences des paramètres modifiant les effets mécaniques aux interfaces de la structure de la PAC. Les paramètres tels que la précompression, la taille du congé des dents de la plaque BPP, la largeur des dents de la plaque BPP, l'épaisseur de la plaque GDL et de la membrane MEA, etc. vont être étudiés. Une étude sur l'influence de l'aspect de surface de la GDL et de la BPP sera également présentée. Ces études mécaniques pourront aider à déterminer des paramètres optimaux pour une meilleure performance et une conception optimale de la PAC.

4.2 Précompression de la PAC

L'empilement de la PAC est serré par des boulons tirants pour le fonctionnement normal, cette force produit une précompression dans tous les composants de la PAC. L'état de contact aux interfaces entre les plaques GDL et BPP est principalement influencé par la précompression. En effet, une précompression insuffisante conduit à un contact imparfait à l'interface, car il existe alors une zone où le contact ne s'établit pas encore, la PAC n'atteint pas la résis-

tance de contact minimale. À l’opposé, une précompression trop élevée diminue la porosité de la plaque GDL, ce qui peut rétrécir les pores dans la plaque GDL et réduire l’alimentation des gaz réactifs. L’objectif est donc de trouver une précompression optimale offrant un compromis entre ces deux cas extrêmes.

Dans le modèle de la PAC, la configuration géométrique du modèle est inchangée, seule la précompression appliquée dans le modèle varie. Nous étudions ici l’influence de la précompression sur la distribution de la pression de contact, l’aire de contact, la déformation et la porosité de la plaque GDL.

4.2.1 Pression de contact

Dans un premier temps, la variation de la pression de contact (en Mpa) entre la plaque GDL et la plaque BPP pour différentes précompressions (en mm) est indiquée dans les figures ci-dessous.

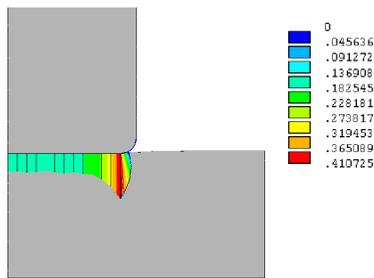


FIG. 4.1: Précompression = 0.01 mm

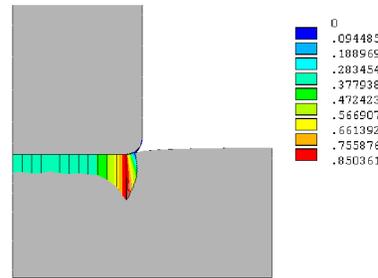


FIG. 4.2: Précompression = 0.02 mm

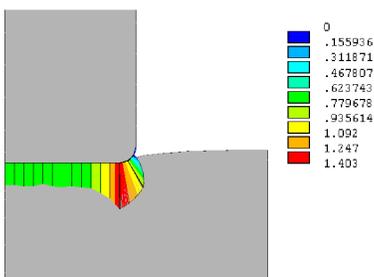


FIG. 4.3: Précompression = 0.04 mm

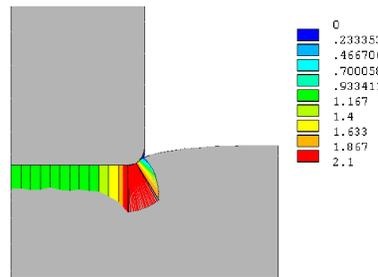


FIG. 4.4: Précompression = 0.06 mm

Sur les figures (figure 4.1 à figure 4.8), la distribution de la pression de contact est similaire avec différentes précompressions : la pression est relativement uniforme à l’interface sauf dans la zone du congé de la dent de la plaque BPP où la variation de la pression est importante. Lorsqu’on observe l’évolution de la répartition de la pression de contact lorsque la précompression augmente, la pression maximale localisée au niveau du congé comme la pression au niveau de l’axe de symétrie augmentent également. Toutefois la répartition de pression au niveau du congé se modifie au fur et à mesure de l’augmentation du chargement.

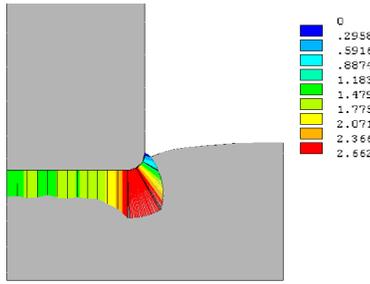


FIG. 4.5: Précompression = 0.08 mm

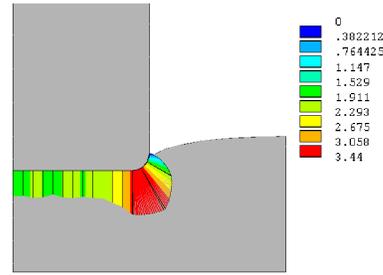


FIG. 4.6: Précompression = 0.1 mm

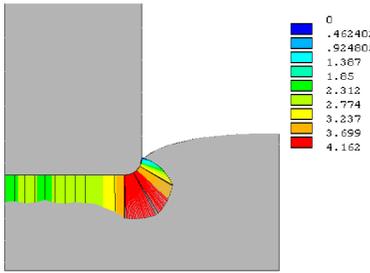


FIG. 4.7: Précompression = 0.12 mm

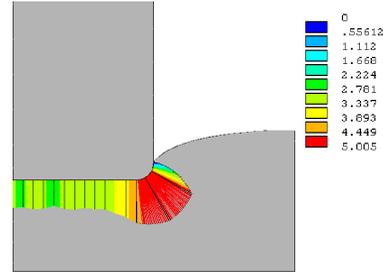


FIG. 4.8: Précompression = 0.14 mm

La pression sur l'axe de symétrie est considérée comme la pression moyenne uniforme à l'interface et la pression maximale est donnée par la pression au congé de la dent de la plaque BPP. La variation de ces deux pressions (courbe 1 et courbe 2) en fonction de la précompression est indiqué dans la figure 4.9. La pression de contact augmente évidemment avec la précompression, non seulement la pression à l'axe de symétrie (courbe 1), mais aussi la pression maximale au congé (courbe 2).

En force équivalente, la somme des produits de la pression et de l'aire de contact à l'interface est la précompression extérieure appliquée dans la PAC, ce qui peut être représentée par :

$$F = \sum_{i=1}^n p_i \times A_i, \quad (4.1)$$

où F est la précompression de la PAC, p_i est la pression de i^{ime} élément de contact, A_i est l'aire de contact de i^{ime} élément de contact, n est la somme des éléments de contact à l'interface. D'après l'équation 4.1, en cas de contact imparfait, l'augmentation de la précompression conduit à l'augmentation de la pression de contact et de l'aire de contact à l'interface. Par contre en cas de contact parfait, l'aire de contact est constante, la pression de contact peut toujours augmenter avec la précompression de la PAC comme les courbes 1 et 2 indiqués dans la figure 4.9.

Le pourcentage $P_{uni} = \frac{P_{max} - P_{axe}}{P_{max}} \times 100\%$ peut être utilisée pour représenter l'uniformité

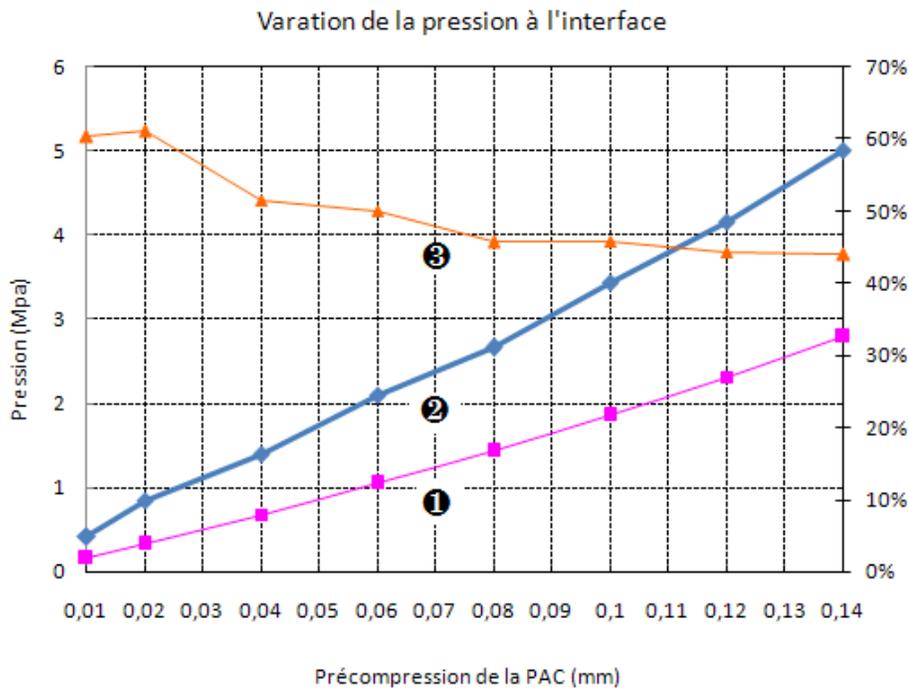


FIG. 4.9: Variation de la pression avec la précompression de la PAC

de la pression de contact, c'est-à-dire, le pourcentage de la différence de pression de contact entre la pression maximale et la pression à l'axe de symétrie par rapport à la pression maximale P_{max} . Sur la figure 4.9, le pourcentage P_{uni} (courbe 3) diminue avec la précompression de la PAC, c'est-à-dire, la variation de la pression à l'interface est de plus en plus faible avec l'augmentation de la précompression de la PAC. On peut donc conclure que dans une certaine mesure, l'augmentation de la précompression permet d'améliorer l'uniformité de la pression normale de contact. Une distribution de la pression uniforme à l'interface facilite la production de courant électrique et permet d'obtenir une température uniforme à l'interface, l'uniformité de la pression de contact joue donc un rôle important dans la performance de la PAC comme mentionné dans l'expérience effectuée par Wang *et al.* [WSZ08]. Ainsi une précompression de la PAC assez élevée est nécessaire pour réaliser un contact parfait à l'interface de la PAC et de ce fait, améliorer la performance de la PAC.

4.2.2 Aire de contact (longueur de contact)

L'équation 4.1 montre que si la précompression F croît ce qui est le cas pendant l'assemblage de la PAC, non seulement la pression de contact augmente avec la précompression, mais aussi l'aire de contact entre la plaque GDL et la dent de la plaque BPP grâce au changement de la zone de contact au niveau des congés de la plaque BPP. L'aire de contact est un paramètre principal dans la résistance de contact. Un contact parfait avec une large aire de contact permet d'avoir une faible résistance de contact à l'interface, obtenant ainsi une

meilleure performance. Ainsi une étude de la variation de la longueur de la zone de contact avec la précompression de la PAC est représentée dans la figure 4.10 pour trouver un état de contact parfait à l'interface avec la plus grande aire de contact possible.

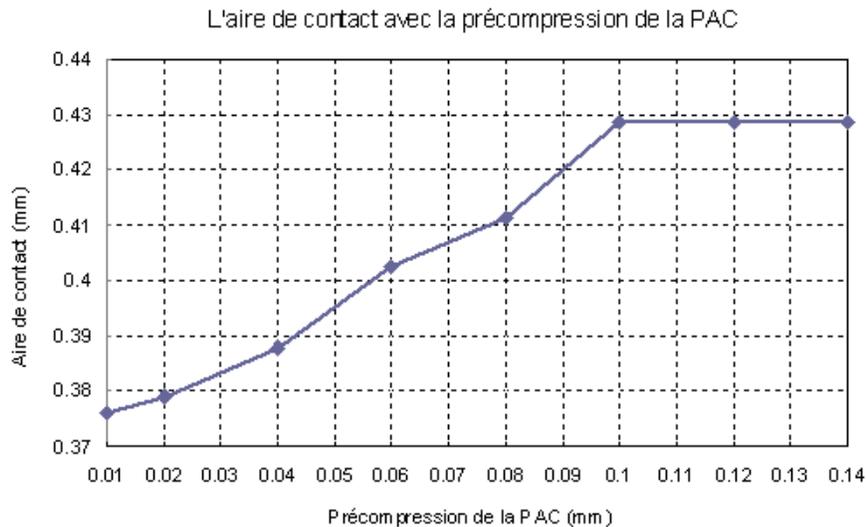


FIG. 4.10: Variation de l'aire de contact avec la précompression de la PAC

La figure 4.10 montre que la zone de contact s'élargit avec la précompression de la PAC jusqu'à 0.1 mm. En revanche, pour une précompression supérieure à 0.1 mm, la zone de contact ne varie plus, sa longueur se stabilise à 0.42852 mm. On constate donc que la précompression de 0.1 mm est la précompression minimale pour réaliser un contact parfait à l'interface avec une longueur de contact de 0.42852 mm. Toute la zone de contact potentielle à l'interface entre les plaques GDL et BPP est alors en contact. Bien sur l'augmentation de la précompression de la PAC mène également à l'augmentation de la pression à l'interface comme indiqué dans la figure 4.9.

Comme nous l'avons étudié dans le chapitre 3 (figure 3.6), la zone de contact à l'interface entre la plaque GDL et la plaque BPP est constituée de deux parties : une partie est le contact de surface plane à surface plane entre la plaque GDL et la surface basse de la dent de la plaque BPP, et l'autre partie est le contact surface plane à surface courbée entre la plaque GDL et le congé de la dent de la plaque BPP. Dans les figures (figure 4.1 à figure 4.8), les interfaces rentrent en contact initialement au niveau des surfaces planes puis entre le congé et la plaque plane de la GDL avec l'augmentation de la précompression. Quand la précompression est assez élevée, tout le côté du congé de la dent est en contact avec la plaque GDL. Dans le modèle, la précompression de 0.1 mm est la force minimale qui permet de réaliser "le contact parfait" entre le congé de la BPP et la plaque GDL. En revanche, quand la précompression dépasse 0.1 mm, il n'y a plus de zones de contact potentielles, c'est-à-dire, l'aire de contact n'augmente plus à l'interface. Ainsi pour une précompression de 0.1 mm, un état de contact

idéal permet d’obtenir une résistance de contact minimale à l’interface de la PAC.

Quand la précompression est suffisamment élevée, la résistance de contact est constante, ce qui correspond aux expériences effectuées par Lee *et al.* [LHVZM99], Ge *et al.* [GHL06] et Chang *et al.* [CHWC07], etc.

4.2.3 Porosité de la plaque GDL

Nous venons de voir qu’une certaine valeur de la précompression permet d’établir une zone de contact de taille maximale et donc une résistance de contact minimale ce qui est bon pour la performance de la pile. Cependant la précompression provoque aussi la déformation des trois plaques BPP, MEA et GDL au niveau du contact. Comme un matériau en tissu, mousse déformante, la plaque GDL a une grande déformation par rapport aux plaques BPP et MEA à cause de sa faible rigidité. La déformation est importante dans la zone compressée, sous la dent de la plaque BPP et dans la zone gonflée sous la canal de la plaque BPP. La déformation est liée à la porosité et à la perméabilité de la GDL et peut agir indirectement sur l’alimentation des gaz réactifs dans la PAC. Une grande déformation pouvant réduire la porosité de la plaque GDL, une étude de la variation de la déformation de la GDL en fonction de la précompression de la PAC a été réalisée dans cette partie.

Dans un premier temps, la variation de la déformation du modèle avec différentes pré-compressions est représentée dans les figures ci-dessous :

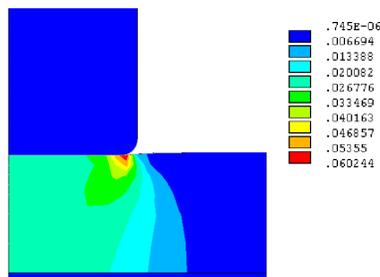


FIG. 4.11: Précompression = 0.01 mm

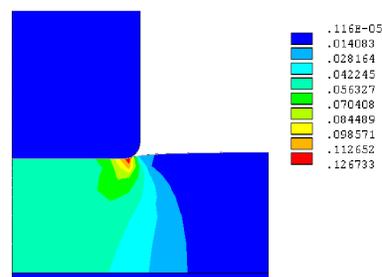


FIG. 4.12: Précompression = 0.02 mm

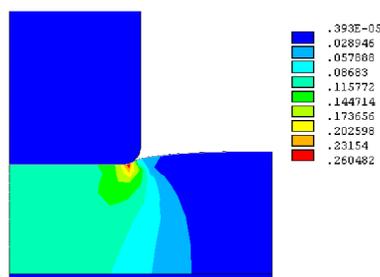


FIG. 4.13: Précompression = 0.04 mm

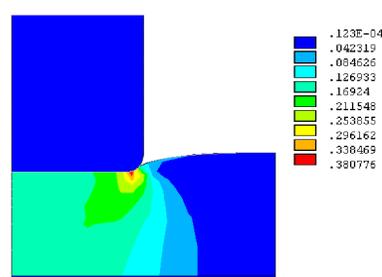


FIG. 4.14: Précompression = 0.06 mm

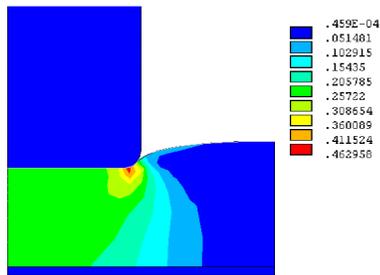


FIG. 4.15: Précompression = 0.08 mm

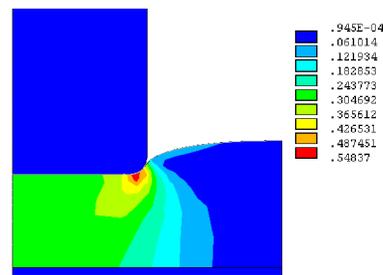


FIG. 4.16: Précompression = 0.1 mm

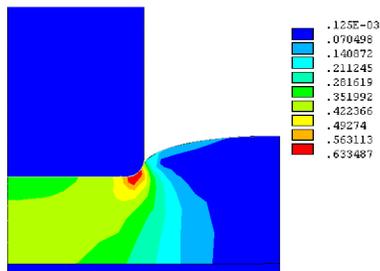


FIG. 4.17: Précompression = 0.12 mm

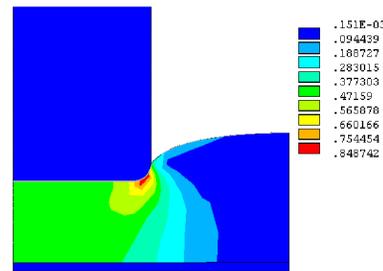


FIG. 4.18: Précompression = 0.14 mm

D'après les figures 4.11 à 4.18, la déformation de la plaque GDL augmente avec la précompression de la PAC, non seulement la déformation au congé (point 1, figure 3.6) mais aussi la déformation sur l'axe de symétrie (point 3, figure 3.6). L'augmentation de la précompression accroît l'aire de contact à l'interface, accroît la zone compressée de la plaque GDL et diminue la zone non déformée jusqu'à la précompression de 0.1 mm.

La figure 4.19 montre la variation de la déformation au point 1 et au point 3 (figure 3.6) et la porosité de la plaque GDL avec la précompression de la PAC. La déformation de la plaque GDL est quasi uniforme sauf au niveau du congé de la BPP. Elle peut donc être représentée par la déformation sur l'axe de symétrie. La déformation maximale apparaît au point d'intersection entre le congé et la surface plane représentée (point 1, figure 3.6). Ainsi la déformation maximale (courbe 1), la déformation sur l'axe de symétrie (courbe 2), les porosités correspondantes (courbe 3 et courbe 4) sont présentées dans la figure 4.19.

Sur la figure 4.19, la variation de la déformation maximale de la plaque GDL au niveau du congé (courbe 1) et de la déformation uniforme sur l'axe de symétrie (courbe 2) augmentent avec la précompression. La porosité étant contraire à la déformation (équation 1.22), la porosité de la plaque GDL au congé (courbe 3) et la porosité sur l'axe de symétrie (courbe 4) diminuent donc avec la précompression de la PAC comme indiqué dans la figure 4.19. Une porosité importante ne sera garantie que par une faible précompression. Or il est nécessaire de conserver une porosité assez élevée pour la performance de la pile.

En effet, une faible porosité conduit à une circulation insuffisante des gaz réactifs : l'eau produite par la réaction électrochimique ne s'évacue plus, ce qui conduit à un phénomène

d'inondation (gouttelette de l'eau) dans la plaque GDL et bloque la circulation des gaz dans la plaque GDL. Ainsi, il est important dans la conception de la plaque GDL d'éviter des zones de porosité nulle et il faut garder une grande porosité relative dans la plaque GDL.

Sur la figure 4.19 pour une précompression de 0.1 mm, la porosité minimale de la GDL au point 1 (figure 3.6) est environ de 18%. Quand la précompression est de 0.12 mm, on a une déformation de 0.84 et la porosité au point 1 est nulle. En ce qui concerne la porosité de la GDL sur l'axe de symétrie (point 3, figure 3.6), la porosité avec une précompression de 0.1 mm est de 69%, qui n'abaisse que de 9 % la porosité initiale de valeur 78%. La diminution de la porosité sur l'axe de symétrie est plus douce que celle au point 1. Toutefois si la précompression dépasse 0.1 mm, cette porosité diminuera plus vite. Parce que la précompression de 0.1 mm peut réaliser un contact parfait à l'interface avec une aire de contact maximale dans la PAC, la précompression de 0.1 mm est favorable non seulement à l'aire de contact mais aussi à la porosité de la plaque GDL.

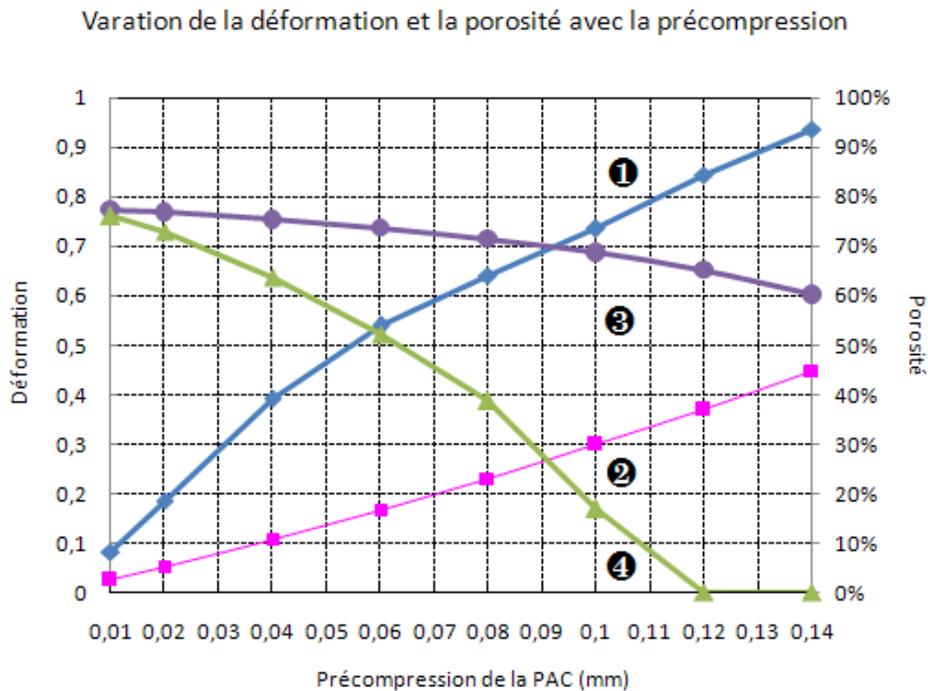


FIG. 4.19: Variation de la déformation et de la porosité avec la précompression

D'après cette étude, nous pouvons voir que la précompression de la PAC influence non seulement l'aire de contact qui est liée à la résistance de contact de la PAC, mais aussi la déformation de la GDL qui est liée à la porosité de la plaque GDL. L'aire de contact augmente avec la précompression la PAC, une précompression élevée peut réaliser un contact parfait à l'interface, ce qui conduit à une petite résistance de contact, favorable à la performance de la PAC. En revanche, la déformation de la plaque GDL augmente avec la précompression et conduit à une baisse de la porosité de la plaque GDL, ce qui provoque une alimentation insuffisante des gaz réactifs et abaisse la performance de la PAC. Ainsi un compromis concernant

la valeur de la précompression devra être fait pour permettre d'établir la plus grande zone de contact possible tout en conservant une porosité maximale.

Notre étude numérique de la PAC est en accord avec des expériences effectuées pour mesurer la distribution de la performance de la PAC pour différentes précompressions [LLA98] [WSZ08] [GHL06] : avant la précompression optimale, l'augmentation de la précompression conduit à l'augmentation de l'aire de contact à l'interface et à une performance élevée de la PAC ; si la précompression dépasse cette valeur optimale, l'aire de contact n'augmente plus, mais la diminution de la porosité continue ce qui abaisse la performance de la PAC.

Ces études indiquent que pour une meilleure performance de la PAC, une précompression optimale existe et garantit la condition de l'étanchéité de la PAC. Cette précompression produit une aire de contact maximale et une résistance de contact minimale à l'interface, mais la précompression doit permettre de conserver une porosité élevée dans la plaque GDL. D'après nos résultats, une précompression de 0.1 mm paraît être un choix optimal pour l'aire de contact dans ce cas là .

4.3 Rayon du congé des dents de la plaque BPP

La variation de la pression de contact et de l'aire de contact avec la précompression montrent que la précompression de la PAC peut influencer l'état de contact à l'interface, le changement de l'état de contact intervient principalement au niveau des congés des dents de la plaque BPP. La présence du congé améliore l'effet de la singularité de l'angle droit de la dent rectangulaire de la plaque BPP. Une variation du rayon du congé sur les effets mécaniques à l'interface dans la PAC va donc être étudiée. Dans cette partie, on regarde plus précisément l'influence du rayon du congé sur la pression, l'aire de contact et sur la porosité de la GDL.

4.3.1 Pression de contact

Nous avons vu dans le chapitre 3 que le remplacement de l'angle droit de la dent de la plaque BPP qui apporte une singularité au niveau du contact par un congé permettait d'obtenir une distribution de pression de contact plus régulière avec une valeur maximale moins élevée. Dans un premier temps, la variation de la pression de contact (en Mpa) entre la plaque GDL et la plaque BPP sous différents rayons du congé (en mm) est indiquée sur les figures de 4.20 à 4.31 :

Sur les figures 4.20 à 4.31, l'importance du rayon du congé sur la distribution de la pression à l'interface est évidente. On observe deux choses sur ces figures : la pression maximale de contact diminue à mesure que le rayon augmente et les pressions maximales se déplacent petit à petit vers l'axe de symétrie. La figure 4.32 montre la variation de la pression de contact

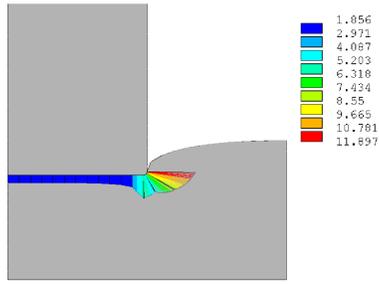


FIG. 4.20: Rayon $R_{RIB} = 0.01$ mm

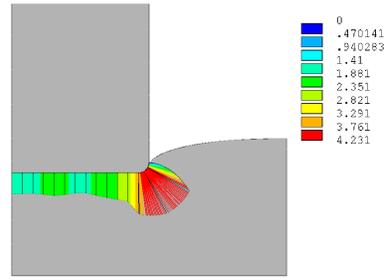


FIG. 4.21: $R_{RIB} = 0.03$ mm

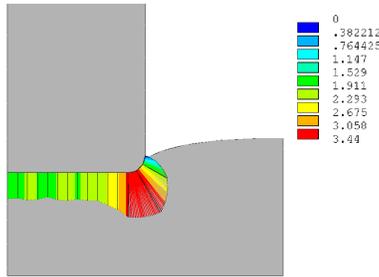


FIG. 4.22: $R_{RIB} = 0.05$ mm

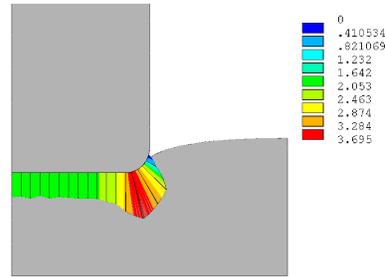


FIG. 4.23: $R_{RIB} = 0.07$ mm

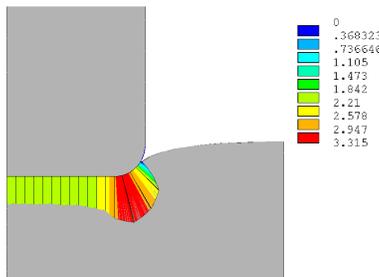


FIG. 4.24: $R_{RIB} = 0.09$ mm

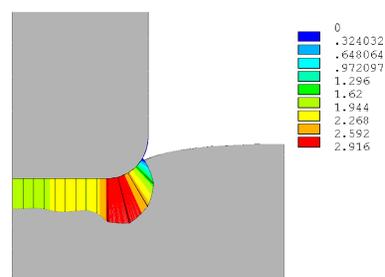


FIG. 4.25: $R_{RIB} = 0.12$ mm



FIG. 4.26: $R_{RIB} = 0.16$ mm

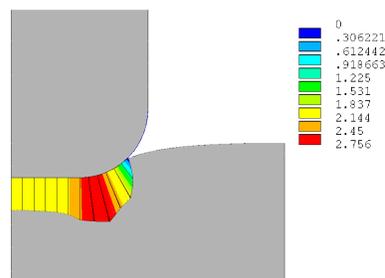
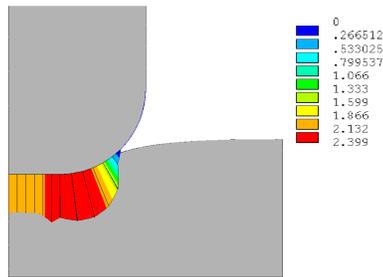
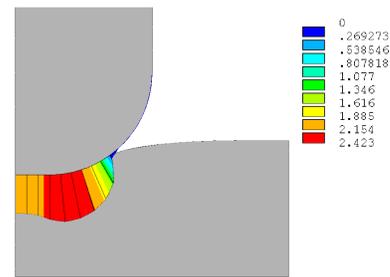
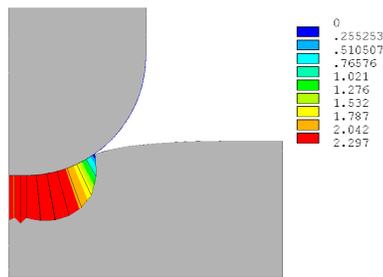
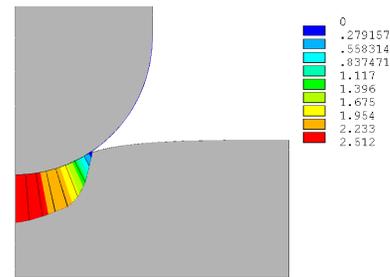


FIG. 4.27: $R_{RIB} = 0.20$ mm

FIG. 4.28: $R_{RIB} = 0.25$ mmFIG. 4.29: $R_{RIB} = 0.30$ mmFIG. 4.30: $R_{RIB} = 0.35$ mmFIG. 4.31: $R_{RIB} = 0.40$ mm

au niveau du congé (point 1, figure 3.6) et la pression sur l'axe de symétrie (point 3, figure 3.6) avec le rayon. Nous pouvons voir que l'augmentation du rayon du congé conduit à la diminution de la pression de contact, notamment la pression au point 1. La pression maximale au point 1 est très sensible au rayon du congé. La pression chute rapidement lorsqu'on passe d'un rayon de 0.01 mm à 0.03 mm.

Avec un rayon R_{RIB} de 0.01 mm, la forme de la dent est encore quasi-rectangulaire, on constate donc l'effet singulier de l'angle droit sur la pression. La précompression de la PAC produit une pression de contact élevée de 11.7 Mpa au point 1. Mais avec un rayon R_{RIB} de 0.05 mm, la pression de contact au point 1 diminue jusqu'à 3.44 Mpa, ce qui diminue de 72 % la pression obtenue avec un rayon de 0.01 mm, l'effet de l'angle droit à l'interface a été clairement amélioré. Enfin quand R_{RIB} est supérieur à 0.05 mm, la diminution de la pression de contact au point 1 est de plus en plus douce. Cependant, la distribution de la pression sur l'axe de symétrie (figure 4.32) augmente très légèrement avec l'augmentation du rayon du congé parce que le contact est plan à plan autour de la zone proche de l'axe de symétrie, le rayon du congé influence donc principalement la pression au niveau du congé à l'interface.

De plus, dans la figure 4.32, quand le rayon est supérieur à 0.3 mm, la pression sur l'axe de symétrie augmente légèrement avec le rayon du congé jusqu'au rayon de 0.4 mm. Parce que la largeur de la dent de la plaque BPP est de 0.8 mm dans le modèle de la PAC, le largeur de la demi dent est de 0.4 mm dans le modèle symétrique. Quand le rayon est supérieur à 0.3 mm, la fin du congé arrive presque au milieu de la dent de la BPP, les pressions maximales se rapprochent de l'axe de symétrie comme indiqué dans les figures 4.29, 4.30 et 4.31.

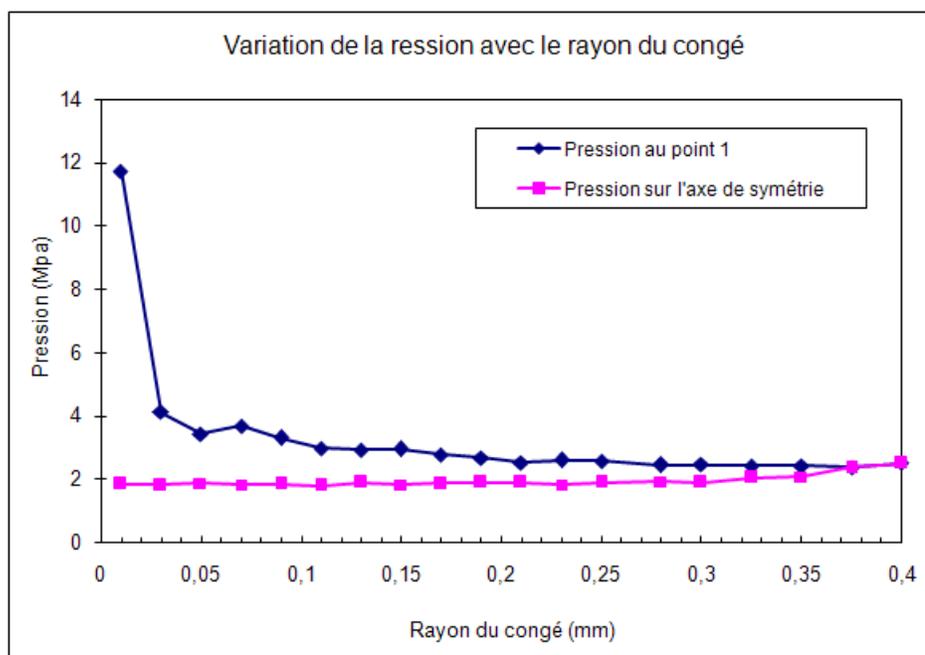


FIG. 4.32: Variation de la pression de contact avec le rayon du congé

Quand le rayon R_{RIB} est 0.4 mm, la dent de la plaque BPP est tout à fait semi-circulaire, la pression maximale est au point le plus bas de la dent, et la pression maximale est sur l'axe de symétrie (figure 4.31). C'est pour cette raison que la courbe de la pression maximale et la courbe de la pression sur l'axe de symétrie, dans la figure 4.32, se rejoignent pour un rayon de 0.4 mm. À ce moment, la pression maximale à l'interface est 2.52 Mpa, ce qui est inférieure de la pression maximale (3.44 Mpa) avec un rayon de 0.05 mm.

4.3.2 Aire de contact (longueur de contact)

Dans un premier temps, l'influence du rayon du congé sur la pression a été étudiée. La présence du congé permet d'améliorer la concentration de la pression de contact (figures 4.20 à 4.31) et peut aussi influencer la longueur de contact à l'interface. La figure 4.33 montre la variation de la longueur de la zone de contact avec le rayon du congé. La courbe n'est pas linéaire car elle augmente au début et puis diminue jusqu'à la fin avec l'augmentation du rayon du congé.

L'augmentation du rayon du congé dans la figure 4.33 va de 0 mm (dent rectangulaire) à 0.4 mm. Avec l'augmentation de la taille du rayon, la demi-longueur de la zone de contact augmente jusqu'à la valeur maximale de 0.428 mm pour $R_{RIB} = 0.05$ mm. D'après la relation entre l'aire de contact et la résistance de contact dans la PAC, quand $R_{RIB} = 0.05$ mm, la PAC a une résistance minimale et une performance élevée.

Quand la taille du rayon du congé est supérieure à 0.05 mm, l'aire de contact entre la plaque GDL et la plaque BPP commence à diminuer. Plus large du rayon du congé, moins de

l'aire de contact à l'interface. L'aire de contact minimale est de 0.42 mm avec un rayon du congé de 0.4 mm quand la dent de la plaque BPP est tout à fait semi-circulaire à ce moment. L'aire de contact avec $R_{RIB} = 0.4$ mm est réduite de 50% par rapport à l'aire maximale obtenue pour $R_{RIB} = 0.05$ mm. Même si la pression obtenue avec un rayon de 0.4 mm est inférieure à la pression pour un rayon de 0.05 mm (figure 4.32), un rayon de 0.05 mm est une meilleure alternative pour la performance de la PAC. Autrement dit, une dent rectangulaire avec un petit congé donnera une meilleure performance que une dent circulaire de la plaque BPP.

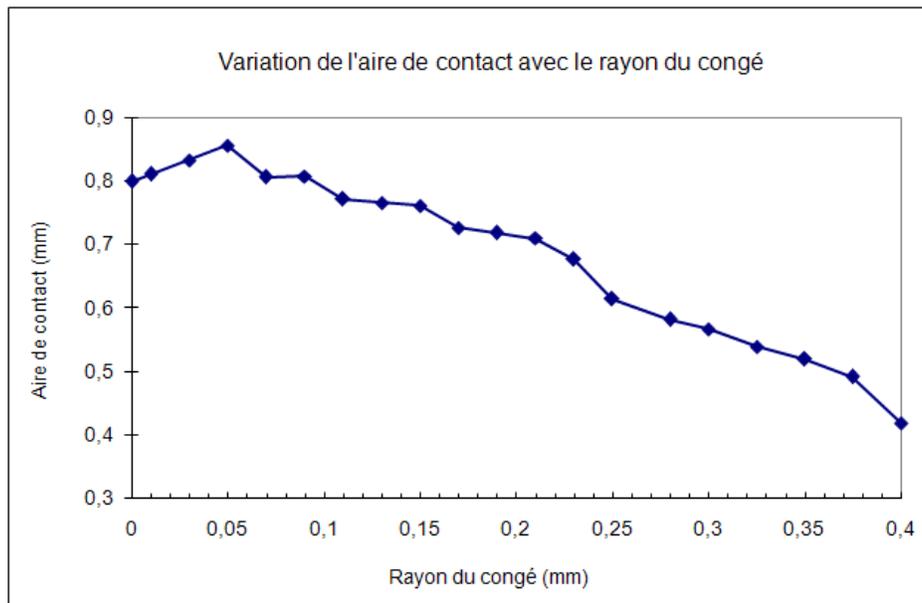


FIG. 4.33: Variation de l'aire de contact avec le rayon du congé

Enfin, il est bon de noter que dans la figure 4.33, quand le rayon du congé est inférieure à 0.09 mm, l'aire de contact est plus grande avec une dent qu'avec l'angle droit de la plaque BPP. La conception de la dent de la PAC avec un congé est donc meilleure que la conception de la dent avec un coin droit, non seulement pour l'amélioration de la concentration de pression de contact, mais aussi pour une aire de contact plus étendue.

Dans l'étude de la variation du rayon du congé sur l'étendue du contact, une valeur maximale de l'aire de contact est donnée pour un rayon ($R_{RIB} = 0.05$ mm) qui optimise la performance des piles.

4.3.3 Porosité de la plaque GDL

Tout comme l'influence du rayon R_{RIB} sur l'aire de contact et la pression de contact, nous allons étudier l'influence du rayon du congé sur la porosité de la plaque GDL. En effet, le rayon R_{RIB} modifie la distribution de la déformation de la plaque GDL. La figure 4.34 montre la variation de la déformation au point 1 (figure 3.6) et la déformation sur l'axe de

symétrie (point 3, figure 3.6) avec le rayon R_{RIB} et ses porosités correspondantes. Sur la figure 4.34, on constate que la déformation au point 1 (courbe 1), diminue avec le rayon du congé alors que la porosité associée augmente rapidement (courbe 3). En revanche, la déformation sur l'axe de symétrie (courbe 2) et sa porosité (courbe 4) varient très lentement mais toujours inversement.

La diminution de la déformation au point 1 s'explique comme dans le chapitre précédent par la diminution de l'effet de l'angle droit. Le congé améliore la circulation des gaz réactifs dans le cas d'une dent rectangulaire de la plaque BPP. Avec l'augmentation du rayon du congé, la concentration de contrainte a été améliorée et la déformation de la plaque GDL diminuée. Quand la dent de la BPP est juste circulaire avec un rayon de 0.4 mm, le point 1 coïncide alors avec l'axe de symétrie. Ainsi, dans la figure 4.34, la déformation au point 1 et la déformation sur l'axe de symétrie sont identiques pour un rayon de 0.4 mm. Mais la porosité de la GDL varie inversement à la déformation, l'augmentation du rayon du congé conduit donc à l'accroissement de la porosité de la plaque GDL au point 1. La porosité sur l'axe de symétrie varie très doucement car le contact est régulier (plan à plan) autour l'axe de symétrie.

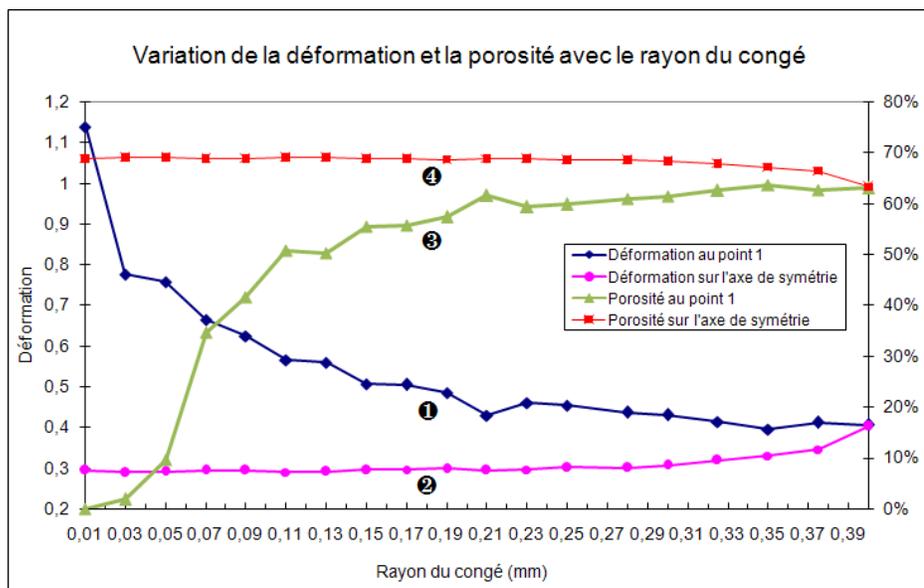


FIG. 4.34: Variation de la déformation et la porosité avec le rayon du congé

Sur la figure 4.34, pour $R_{RIB} = 0.01$ mm, la porosité de la plaque GDL sur l'axe de symétrie est de 68,8 % ; au même endroit pour $R_{RIB} = 0.4$ mm, la porosité est de 63,2 %, la variation de la porosité sur l'axe de symétrie est d'environ 6 % ce qui est faible. En revanche au point 1, la déformation diminue rapidement avec le rayon du congé et la porosité de la GDL augmente logiquement . La déformation au point 1 pour 0.01 mm est assez élevée et sa porosité est nulle. Avec l'augmentation du rayon du congé, la porosité atteint 12 % pour un rayon de 0.05 mm et 42 % pour 0.09 mm. Pour un rayon supérieur à 0.15 mm, la courbe

de la porosité au point 1 (courbe 3) est presque proportionnelle au rayon du congé jusqu'à ce qu'elle atteigne 63 % pour un rayon de 0.4 mm.

Considérant l'influence du rayon du congé sur l'aire de contact, la pression à l'interface et la porosité de la plaque GDL, un rayon de 0.05 mm semble être le meilleur compromis pour la performance de la PAC même s'il désavantage la porosité de la pile. Cependant on pourra considérer un rayon pour le congé compris entre 0.05 mm et 0.09 mm si une baisse du coût de fabrication le nécessite.

4.4 Largeur des dents de la plaque BPP

Comme indiquée dans la figure 1.14, la plaque BPP de la PAC comprend des canaux et des dents afin de réaliser le fonctionnement de la conductivité des électrons et de la distribution des gaz réactifs dans la PAC. La largeur des dents dans la PAC détermine largement l'aire de contact initiale entre les plaques GDL et BPP, ce qui représente un chemin pour le passage des électrons produits. La largeur des canaux influence la circulation des gaz réactifs comme l'hydrogène et l'oxygène, c'est-à-dire la capacité de flux des gaz réactifs pour la réaction électrochimique. Ces deux largeurs entrent en jeu pour la performance des piles. Un petit canal conduit à une alimentation insuffisante des gaz réactifs et une petite dent conduit à une résistance de contact élevée à l'interface. La dimension de la plaque BPP étant fixe, il faut donc essayer de trouver un bon rapport entre les dimensions du canal et de la dent. Pour l'instant, les différentes études présentées ont été réalisées en considérant une taille identique pour la dent et le canal. Mais l'augmentation de la largeur des dents permet peut être d'augmenter l'aire de contact à l'interface. Dans ce modèle, la largeur des dents W_{RIB} et celle des canaux W_{CN} varient l'une et l'autre en conservant $W_{RIB} + W_{CN} = 1.6$ mm.

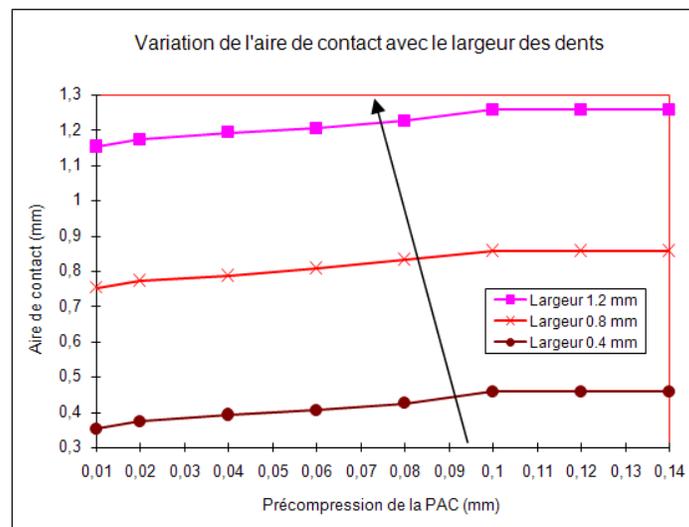


FIG. 4.35: Variation de l'aire de contact avec la largeur des dents de la BPP

La figure 4.35 montre la variation de l'aire de contact avec différentes largeurs des dents de la BPP ($W_{RIB}=0.4$ mm, 0.8 mm et 1.2 mm) sous différentes précompressions de la PAC. L'aire de contact augmente comme prévu avec la largeur des dents. Plus les dents de la plaque BPP sont larges, plus l'aire de contact est grande, moins la résistance de contact est élevée. En revanche, un canal large est plus favorable à la circulation des gaz réactifs. Or un canal plus large implique une dent plus étroite car $W_{RIB} + W_{CN}$ doit rester constant. Il faudra là encore trouver un compromis.

Les figures 4.36, 4.37, 4.38 représentent la distribution de la différence entre la pression au point 1 et la pression sur l'axe de symétrie (point 3), de la porosité de la GDL au point 1 et de la porosité de la GDL sur l'axe de symétrie (point 3). Sur la figure 4.36, nous pouvons voir qu'avec l'augmentation de la précompression, l'uniformité de la pression à l'interface pour différentes largeurs de dents est très proche. Sur les figures 4.37, 4.38, on constate que la largeur des dents de la BPP n'influence ni la porosité au point 1, ni la porosité sur l'axe de symétrie. La largeur des dents de la plaque BPP n'influence donc que principalement l'aire de contact.

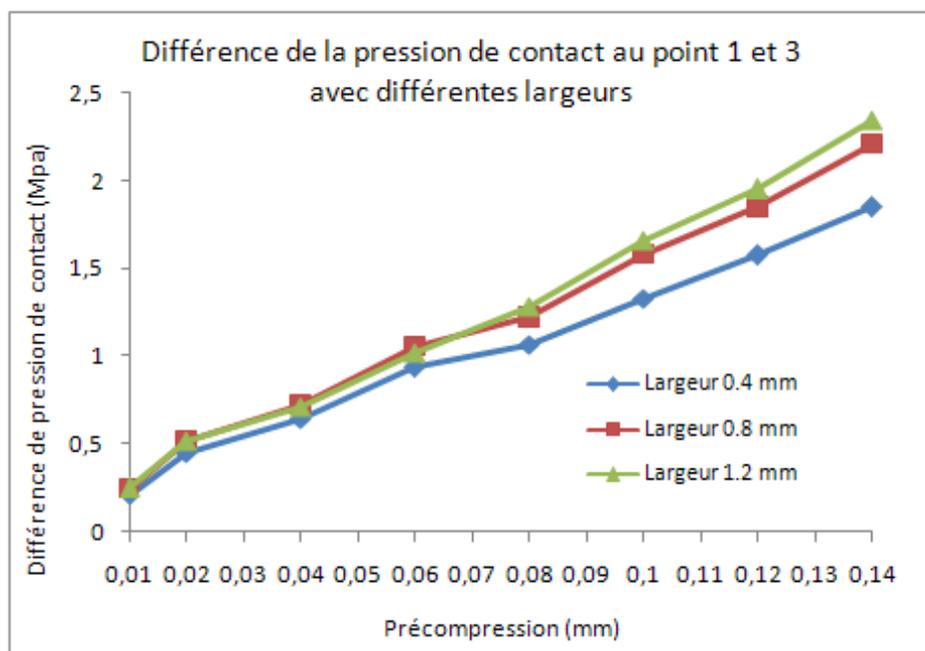


FIG. 4.36: Différence de la pression de contact au point 1 et 3 avec différentes largeurs

Pour une plaque BPP de longueur L_{BPP} , de largeur W_{BPP} , si la largeur des dents est W_{RIB} , la largeur des canaux est W_{CN} , la longueur des dents est L_{BPP} , la longueur de contact avec des congés est W'_{RIB} , l'aire de contact totale aux interfaces multi-contacts A_T entre les petits dents de la plaque BPP et la plaque GDL est le somme des aires de contact individuelles

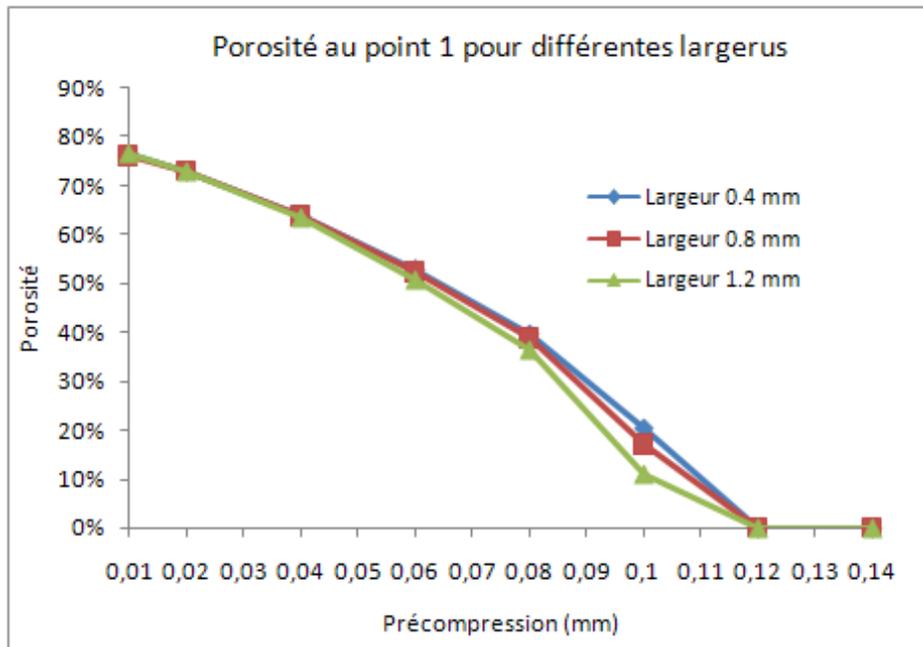


FIG. 4.37: Porosité au point 1 pour différentes largeurs

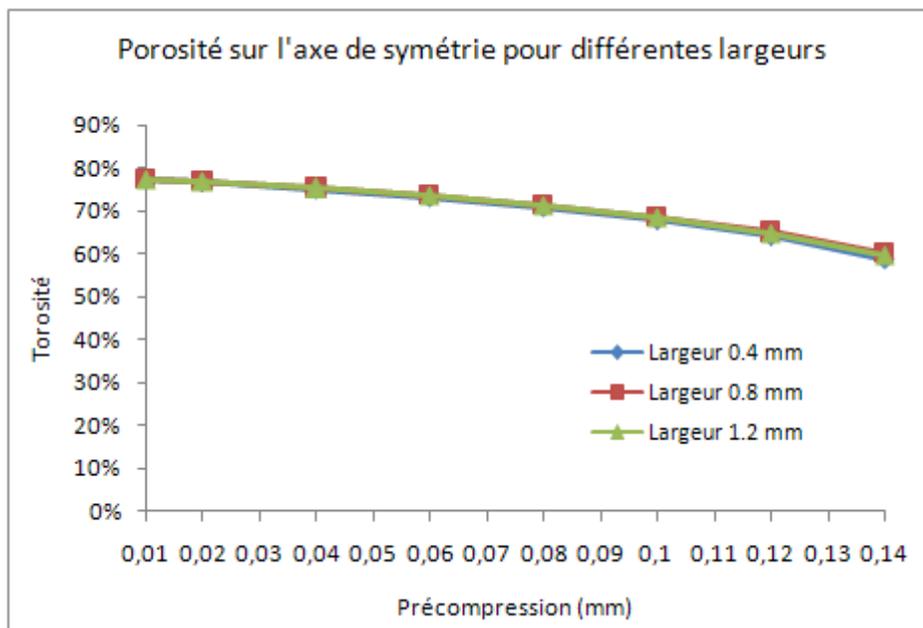


FIG. 4.38: Porosité sur l'axe de symétrie avec différentes largeurs des dents

d'une dent avec la plaque GDL.

$$A_T = \sum_{i=1}^N W'_{RIB}(i) \times L_{BPP} \quad (4.2)$$

N est le nombre de dent de la plaque BPP, i est la i^{ime} zone de contact.

$$N = \frac{W_{BPP}}{W_{RIB} + W_{CN}} \quad (4.3)$$

Parce que le déplacement appliqué s'applique de la même façon sur toute la largeur de la BPP, toutes les zones de contact ont la même aire de contact. On peut donc écrire :

$$A_T = N \times W'_{RIB} \times L_{BPP} = \frac{W'_{RIB} \times L_{BPP} \times W_{BPP}}{W_{RIB} + W_{CN}} \quad (4.4)$$

si le rapport entre la largeur des canaux et la largeur des dents est $R_{W_{CN}/W_{RIB}}$, c'est-à-dire, le $W_{CN} = R_{W_{CN}/W_{RIB}} \times W_{RIB}$, on a

$$A_T = \frac{W'_{RIB}}{W_{RIB}} \left(\frac{L_{BPP} \times W_{BPP}}{1 + R_{W_{CN}/W_{RIB}}} \right) \quad (4.5)$$

puisque $W'_{RIB} = W_{RIB} + (\pi - 2) \times R_{RIB}$,

$$A_T = \left(1 + \frac{(\pi - 2) \times R_{RIB}}{W_{RIB}} \right) \frac{L_{BPP} \times W_{BPP}}{1 + R_{W_{CN}/W_{RIB}}} \quad (4.6)$$

Parce que la dimension de la plaque BPP est constante et carrée, L_{BPP} et W_{BPP} dans l'équation 4.6 sont constants, l'aire de contact totale est déterminée par les paramètres R_{RIB} , W_{RIB} et le rapport $R_{W_{CN}/W_{RIB}}$. Le R_{RIB} est un paramètre positive à l'aire de contact totale aux interfaces multi-contacts en cas d'un contact parfait, par contre le W_{RIB} et le rapporteur $R_{W_{CN}/W_{RIB}}$ sont les paramètres négatives à l'aire de contact totale aux interfaces multi-contacts. Au cas du contact parfait, l'aire de contact augmente avec le rayon R_{RIB} avant d'un rayon de 0.05 mm comme être étudié dans la figure 4.33. Le R_{RIB} de 0.05 mm est le rayon qui réalise l'aire de contact maximale aux interfaces. Par contre, pour les deux paramètres négatives à l'aire de contact, le W_{RIB} et le rapporteur $R_{W_{CN}/W_{RIB}}$, ses petits valeurs sont favorables à l'aire de contact totale aux interfaces. C'est-à-dire, la largeur des dents plus fin conduit à une plus large de l'aire de contact totale aux interfaces. Afin de trouver un bon compromis entre une largeur de dent importante (mais un canal plus étroit) qui favorise l'aire de contact et une largeur de canal assez grande qui favorise la circulation des gaz réactifs, nous garderons une largeur 0.8 mm identique pour les deux largeurs.

4.5 Épaisseur de la plaque GDL

Nous avons vu que le contact parfait était déterminé par la précompression de la PAC, la pression de contact influencée par le rayon du congé, l'aire de contact déterminée en grande partie par la largeur des dents de la plaque BPP. L'épaisseur de la plaque GDL est aussi un paramètre important pour la performance de la PAC, qui intervient dans la porosité de la plaque GDL. La plaque GDL est poreuse et permet le passage des gaz réactifs. Comme nous avons étudié dans l'équation 1.22, la porosité et la perméabilité de la GDL sont déterminées par la déformation volumique de la GDL. Le changement de l'épaisseur de la plaque GDL peut influencer la distribution de la déformation volumique et la porosité. Il apparaît donc intéressant de considérer l'influence de l'épaisseur de la plaque GDL sur la performance de la pile.

Actuellement quatre types de plaque GDL sont disponibles dans la commerce dans la série TGP-H, ce sont TGP-H-120, TGP-H-90, TGP-H-60 et TGP-H-30. Leurs épaisseurs sont 0.375 mm, 0.285 mm, 0.195 mm et 0.11 mm. Dans un premier temps, la porosité de la plaque GDL au point 1 et la porosité sur l'axe de symétrie pour différentes épaisseurs de la plaque GDL sont représentées dans les figures 4.39 et 4.40.

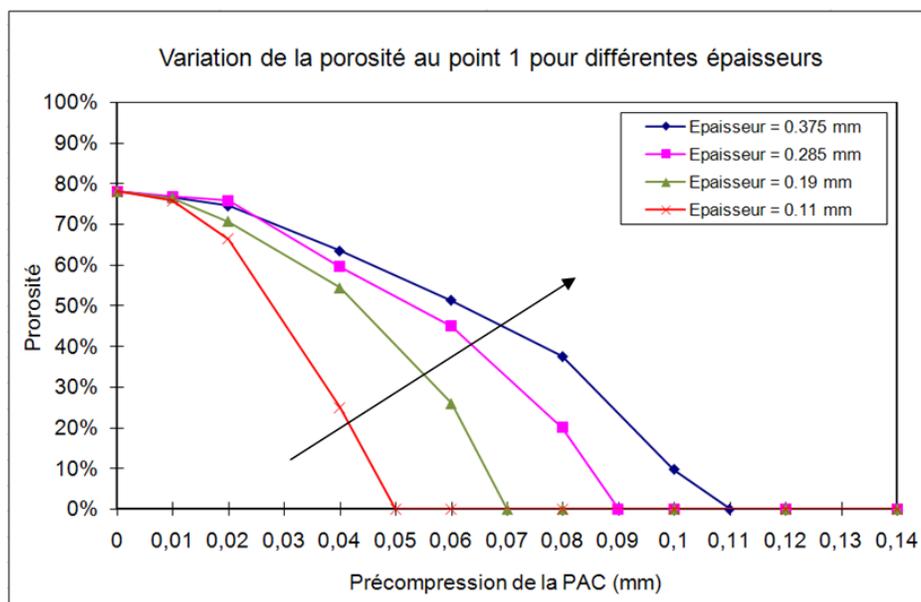


FIG. 4.39: Variation de la porosité au point 1 pour différentes épaisseurs

Les figures 4.39 et 4.40 montrent que l'épaisseur de la plaque GDL a une influence importante sur la porosité de la plaque GDL. Plus l'épaisseur de la plaque augmente, plus la porosité est importante. Afin d'optimiser la performance de la PAC, l'épaisseur de la GDL recommandée sera de 0.375 mm.

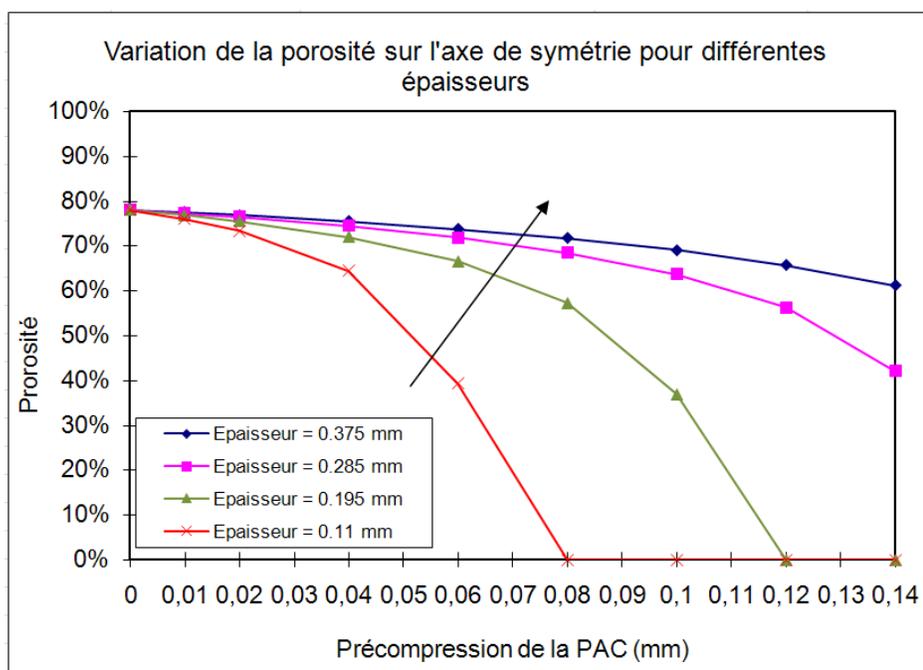


FIG. 4.40: Variation de la porosité sur l'axe de symétrie pour différentes épaisseurs

4.6 Épaisseur de la membrane MEA

Nous étudions maintenant l'influence de l'épaisseur de la membrane MEA sur la performance de la PAC. Afin de diminuer la résistance propre de la membrane MEA et d'augmenter la conductivité des protons, on considère une membrane MEA de plus en plus fine dans la PAC. Actuellement quatre types de la membrane MEA commerciales sont disponibles dans la série de Nafion. Leur épaisseurs sont 0,185 mm de Nafion 117, 0,125 mm de Nafion 115, 0,09 mm de Nafion 113 et 0,05 mm de Nafion 112. L'influence de l'épaisseur de la membrane MEA sur les effets mécaniques sera effectuée dans cette partie.

Dans un premier temps, la différence des pressions entre la valeur maximale au point 1 et la valeur sur l'axe de symétrie est indiquée dans la figure 4.41 pour différentes épaisseurs des plaques MEAs. Cette différence de pression à l'interface s'améliore lorsque la précompression de la PAC augmente. Nous pouvons constater que l'épaisseur de la membrane n'influence pas la différence de pression.

Les figures 4.42 et 4.43 montrent la variation de la porosité au point 1 et de la porosité sur l'axe de symétrie pour différentes épaisseurs des membranes. La porosité de la plaque GDL diminue avec la précompression de la PAC, mais nous constatons que l'épaisseur de la membrane n'agit pas sur la porosité. En fait la précompression de la PAC influence la déformation de la plaque GDL qui n'est pas liée à l'épaisseur des membranes MEAs. L'épaisseur de la plaque GDL peut donc influencer la déformation et la porosité comme nous l'avons étudié, mais pas l'épaisseur des membranes MEAs.

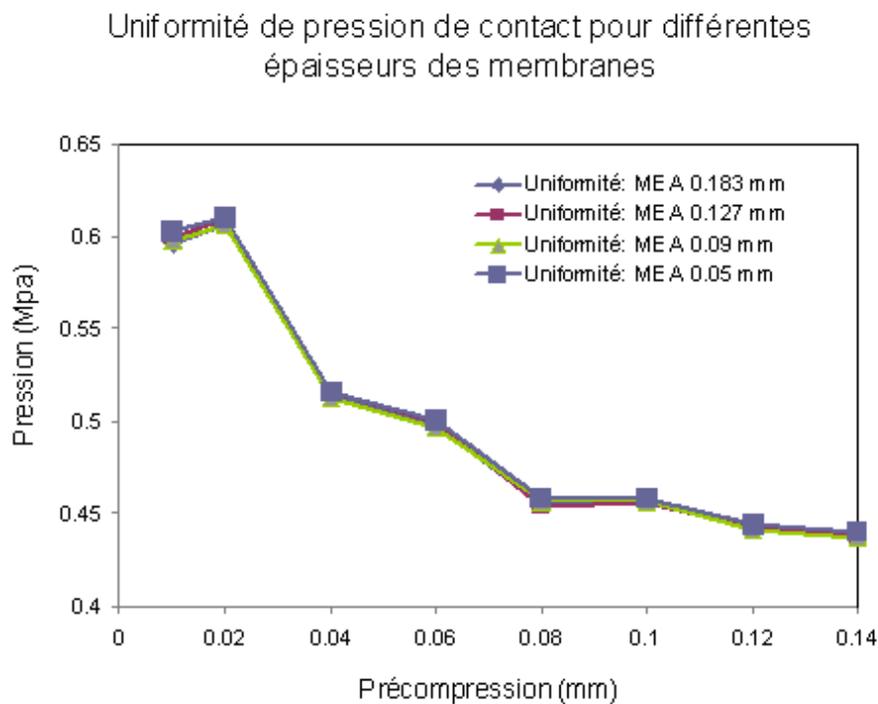


FIG. 4.41: Uniformité de pression de contact pour différentes épaisseurs des MEAs

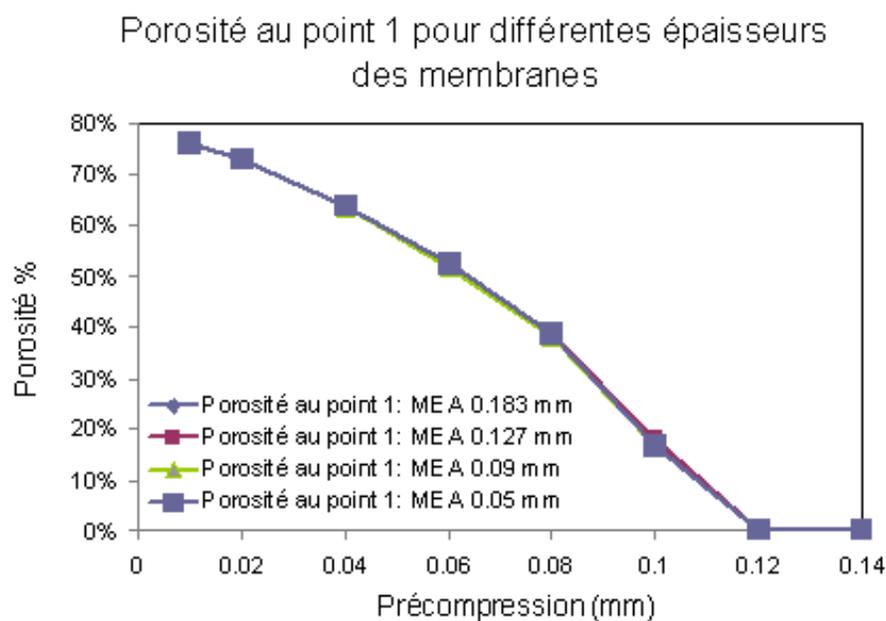


FIG. 4.42: Porosité au point 1 pour différentes épaisseurs des membranes

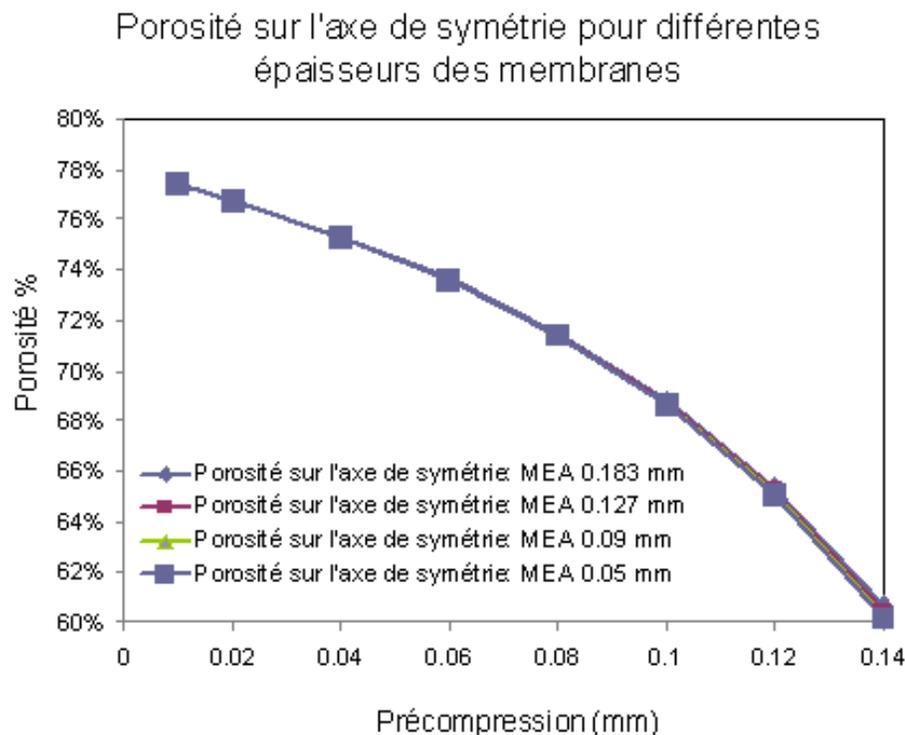


FIG. 4.43: Porosité sur l'axe de symétrie pour différentes épaisseurs des membranes

En revanche l'épaisseur de la membrane MEA peut influencer la distribution de la contrainte au sein de la membrane MEA. Les figures 4.44 et 4.45 montrent la distribution de la contrainte dans une membrane MEA fine (0.05 mm) et dans la membrane MEA épaisse (0.183 mm). La distribution de la contrainte avec les deux épaisseurs est similaire, la contrainte maximale de deux épaisseurs est tout au centre de la membrane MEA. Mais la contrainte maximale est de 0.5 Mpa (figure 4.44) avec la membrane MEA fine, ce qui est 35 % plus élevée que la contrainte de 0.37 Mpa (figure 4.45) avec la membrane MEA épaisse. La membrane la plus fine, soumise à des plus fortes contraintes sera donc probablement moins résistante dans le temps (fatigue, endommagement) ce qui aura un impact sur la durée de vie de la pile. Toutefois dans nos études, les contraintes des membranes MEAs sont encore relativement petites par rapport à la contrainte limite élastique de la membrane MEA.

De plus, la résistance propre de la membrane est plus petite avec une membrane MEA fine qu'avec une membrane MEA épaisse, la plaque MEA de 0.05 mm sera donc privilégiée dans le modèle de contact de la PAC.

4.7 Étude de la géométrie à l'interface

Comme nous l'avons vu, la géométrie comme la largeur des dents et des canaux de la BPP, le rayon du congé, l'épaisseur de la GDL, l'épaisseur de la MEA influencent la performance

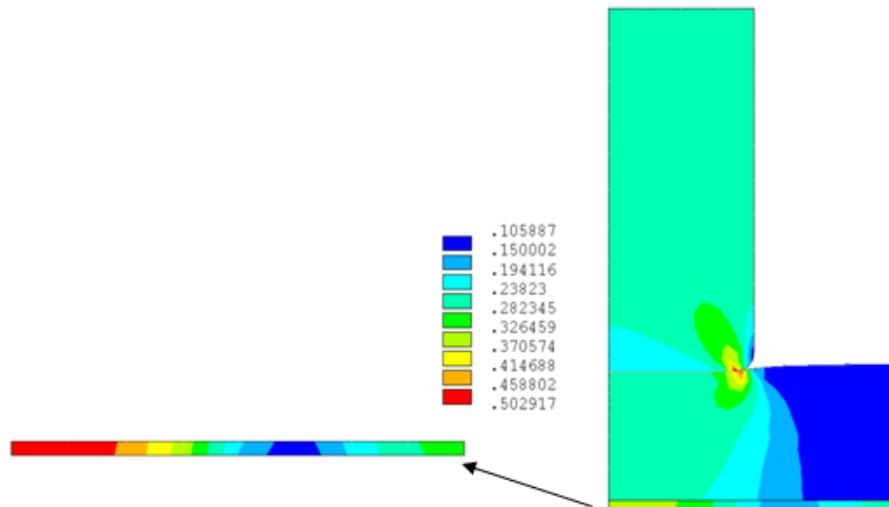


FIG. 4.44: Contrainte dans la MEA (0.05 mm)

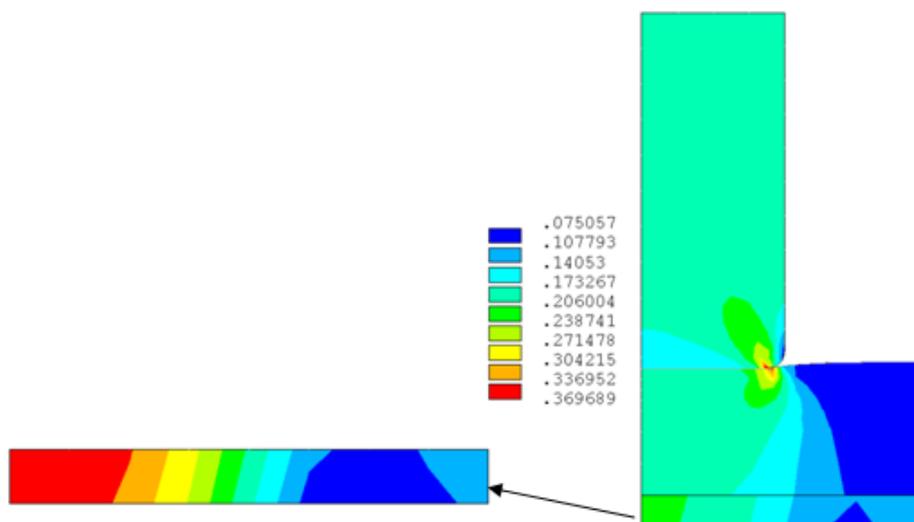


FIG. 4.45: Contrainte dans la MEA (0.183 mm)

des piles à combustibles. La géométrie à l'interface joue un rôle direct sur l'état de contact entre les plaques BPP et GDL. On considère maintenant la tolérance géométrique issue de la procédure de fabrication industrielle. Dans cette partie, deux études géométriques sont considérées : la première porte sur la géométrie de l'interface, c'est-à-dire, la prise en compte d'une interface rugueuse, la seconde sur la tolérance des hauteurs des dents de la plaque BPP. En effet, sous une précompression uniforme, différentes hauteurs de dents peuvent conduire à différents états de contact entre la plaque BPP et la plaque GDL.

4.7.1 Influence des aspérités de l'interface

D'un point de vue microstructure, la plaque GDL est en papier carbone, la plaque BPP est gravée en graphite. À cause des imperfections de la fabrication industrielle, leurs surfaces sont inévitablement rugueuses au niveau microscopique. La surface de la plaque GDL est rugueuse car son matériau est en tissu avec des pores. La série de TGP-H a une rugosité unique de 8 % comme indiquée dans le tableau 1.3 du chapitre 1. La rugosité de la plaque BPP est plus difficile à contrôler que celle de la plaque GDL parce que la plaque BPP, en graphite, est rigide. Besmann *et al.*[BKH03] ont mesuré l'aire de contact entre une plaque GDL et une plaque BPP rugueuse avec trois types de rugosité différente. Dans ces expériences, ils ont étudié l'influence des différentes aspérités de la plaque BPP sur la résistance à l'interface. Une relation existe entre l'aspérité et la résistance comme indiqué dans la figure 4.46[BKH03]. Sur la figure 4.46, la résistance augmente avec l'aspérité de la surface, c'est-à-dire, plus de l'interface est rugueuse, plus la résistance est élevée. Mais Besmann *et al.* n'ont pas donné d'explication pour cette expérience. Aussi nous avons trouvé intéressant de prendre en compte une interface rugueuse dans notre modèle afin d'étudier l'influence des aspérités sur l'aire de contact entre les plaques GDL et BPP.

En fait, il existe deux façons de produire une surface rugueuse des plaques GDL et BPP. Une façon est le VEECO (Vacuum Electronic Equipment Company) [Vee07] et l'autre façon est la distribution de Gauss pour simuler l'aspérité de l'interface rugueuse. VEECO prend un profilomètre optique pour capturer les données des points de contact à la surface rugueuse. Puis, les données de la surface rugueuse sont transférées dans le code des éléments finis pour simuler la surface.

L'autre façon est de créer des aspérités avec une distribution de GAUSS pour simuler la procédure de la fabrication industrielle. La taille de l'aspérité est supposée vérifier une distribution Gaussienne normale avec une moyenne nulle et une déviation standard.

Dans le modèle de contact de la PAC, nous ferons l'hypothèse que la distribution des aspérités à l'interface rugueuse des plaques GDL et BPP est soumise à une distribution Gaussienne normale. Deux paramètres sont importants : l'un est la déviation standard de la hauteur de l'aspérité, l'autre est le nombre de sommets sur l'interface rugueuse, c'est-à-

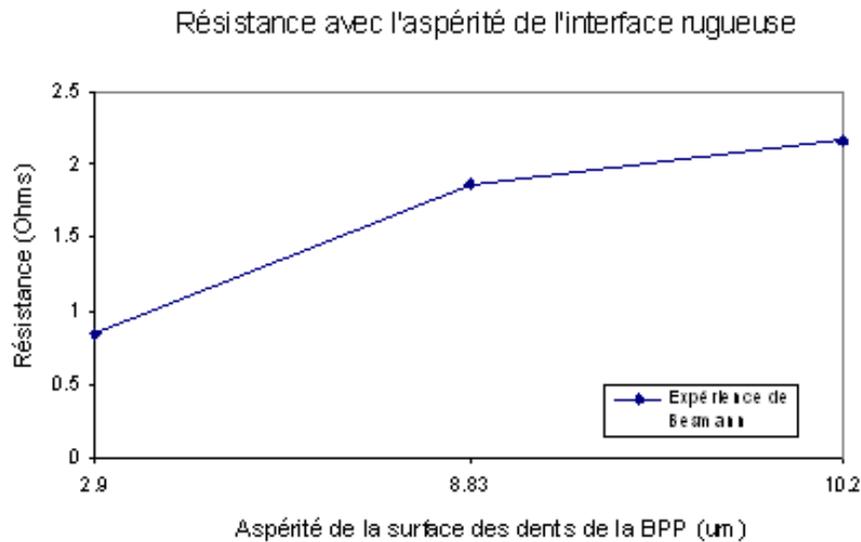


FIG. 4.46: La tendance entre la résistance de contact et la rugosité différente

dire, la densité des aspérités. Les différentes hauteurs des aspérités ainsi que leur nombre peuvent influencer l'état de contact à l'interface et la résistance. Les hauteurs des aspérités à l'interface rugueuse sont indiquées dans le tableau 4.1 selon l'expérience réalisée par Besmann et al [BKH03]. L'aspérité de 8 mm de la surface de la plaque GDL est donnée dans le tableau 1.3 dans le chapitre 1.

TAB. 4.1: Aspérités des plaques BPP et GDL

Aspérité de la BPP (μm)	2.9	8.83	10.2	[BKH03]
Aspérité de la GDL (μm)	8	8	8	[Jap08]

Le modèle des éléments finis avec une interface rugueuse est représenté dans la figure 4.47. Ce modèle n'est pas symétrique car la rugosité ne l'est pas. La surface haute de la plaque GDL est rugueuse avec une rugosité de $8 \mu m$, et la surface basse de la plaque BPP a une rugosité de : $2.9 \mu m$, $8.83 \mu m$ ou $10.2 \mu m$. Le maillage du modèle est indiqué dans la figure 4.48. Le maillage est plus fin que le modèle utilisé avec l'interface lisse pour tenir compte des petits aspérités sur les surfaces rugueuses. Les propriétés et les conditions aux limites du modèle sont identiques à celles des études précédents.

Dans un premier temps, l'influence des différentes aspérités de la surface de la plaque BPP sur l'aire de contact est étudiée. La figure 4.49 montre la variation de l'aire de contact avec trois types d'aspérité ($2.9 \mu m$, $8.3 \mu m$ et $10.2 \mu m$). L'aire de contact avec une surface lisse est différente de celle avec une surface rugueuse, car quand la précompression est faible,

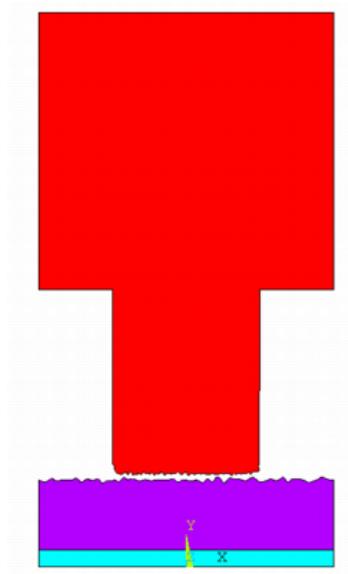


FIG. 4.47: Modélisation des rugosités

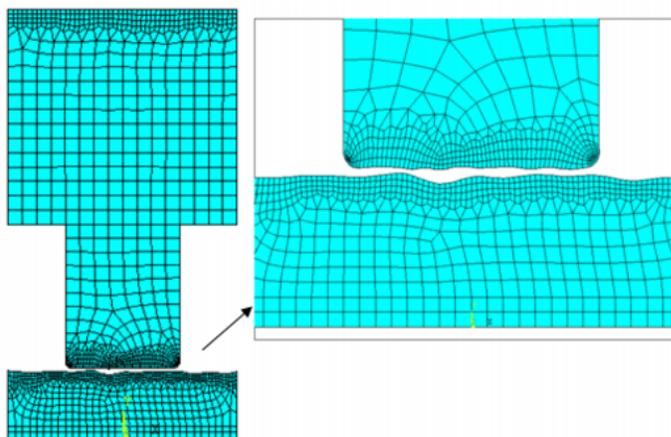


FIG. 4.48: Maillage de l'interface rugueuse

l'aspérité produit des espaces non en contact entre les plaques BPP et GDL. Mais quand la précompression est assez élevée comme 0.1 mm ou plus, l'aire de contact avec interface rugueuse est proche de l'aire de contact avec interface lisse. Une précompression élevée diminue donc les aspérités à l'interface et conduit à l'augmentation de l'aire de contact.

Plus les aspérités sont faibles, plus de l'aire de contact se rapproche de celle obtenue avec une surface lisse. En revanche, les aspérités importantes défavorisent le taille de la zone de contact, ceci d'autant plus que la pré-compression est faible.

Quand la précompression de la PAC est assez élevée, l'influence des aspérités sur l'aire de contact se fait moindre, parce que la précompression élevée réduit les aspérités et les met en contact avec la plaque GDL.

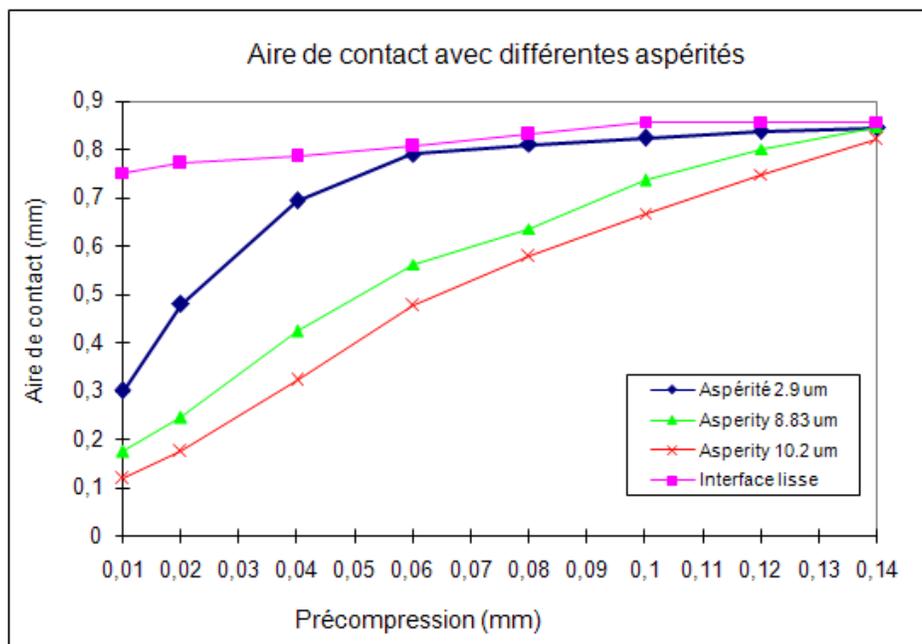


FIG. 4.49: Influence des aspérités sur l'aire de contact

La figure 4.50 montre que l'influence de la densité des aspérités de la plaque BPP sur l'aire de contact avec une taille des aspérités de 2.9 mm. La densité des aspérités est le nombre des aspérités par unité de surface. Les aires de contact avec les densités d'aspérités de 20/mm, 40/mm et 80/mm sont représentées dans la figure 4.50. Nous pouvons voir que plus il y a d'aspérités à l'interface, moins l'aire de contact est importante, plus d'aspérités produit plus d'espaces à l'interface et ces espaces ne sont pas en contact.

Enfin, dans la figure 4.50, une précompression de la PAC élevée augmente toujours l'aire de contact. Ainsi une précompression élevée et une petite densité d'aspérités à l'interface permettent de réaliser une aire de contact plus large. La précision de la fabrication de la plaque BPP est donc importante dans la performance de la PAC. Il faut avoir la plus faible densité d'aspérités possible.

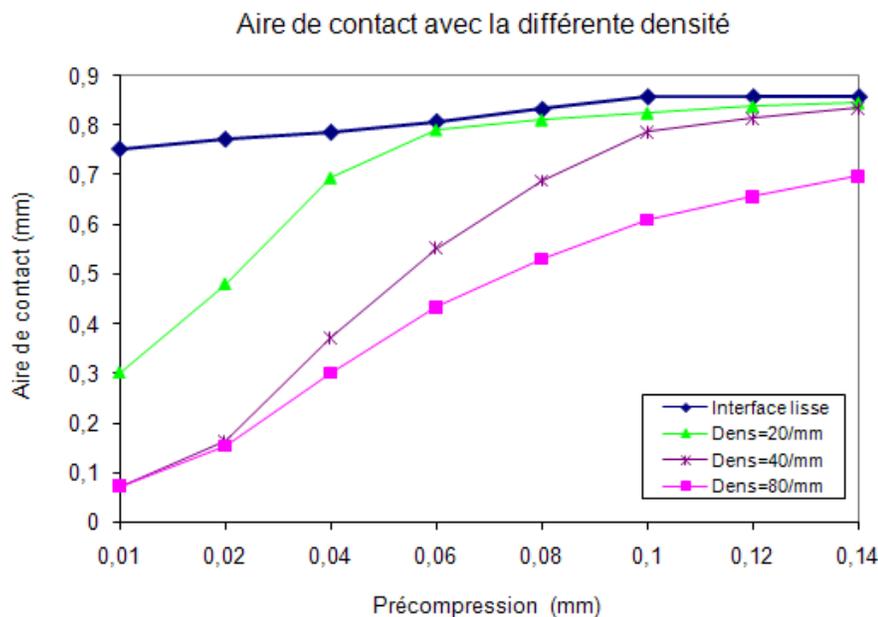


FIG. 4.50: Influence de la densité des aspérités

Pour conclure, on peut dire que l'interface entre la plaque GDL et la plaque BPP doit être la plus lisse possible, pour avoir une aire de contact large et une performance de la PAC supérieure. La précision dans la fabrication de la surface de la plaque BPP est donc très importante. Toutefois, si les conditions de la fabrication ne le permettent pas (coût de fabrication élevé), une précompression assez élevée devra être appliquée afin de diminuer les effets de la rugosité à l'interface.

4.7.2 Influence des hauteurs de dents de la BPP

Les études précédentes ont été réalisées avec un modèle de contact singulier, c'est-à-dire, un modèle d'un contact entre une seule dent de la plaque BPP et la plaque GDL. Ce modèle permet de représenter les contacts multiples entre les dents de la plaque BPP et la plaque GDL à condition que chaque dent soit identique à celle du modèle. Or, la plaque BPP, en graphite, est un matériau rigide avec de nombreuses dents et canaux, qui sont difficiles à graver. La précision de la configuration de la plaque est donc difficile à contrôler. Les hauteurs des dents de la plaque BPP doivent notamment être bien contrôlées, car elle peuvent avoir une influence sur l'état de contact.

Normalement la plaque BPP a une hauteur unique D_{CN} et une épaisseur unique T_{BP} , ainsi les surfaces basses de toutes les dents de la plaque BPP sont à la même position horizontale. Si une différence existe parmi les hauteurs de dent, la précompression uniforme de la PAC peut produire un contact non-uniforme aux interfaces multiples. Ainsi l'influence de la tolérance que l'on peut avoir sur les hauteurs de dents de la BPP est intéressante à étudier.

Sur la figure 4.51, les hauteurs des dents de la BPP ont été modifiées et suivent une distribution Gaussienne normale. Le maillage et les propriétés du modèle de contact multiples sont identiques au modèle avec une seule dent.

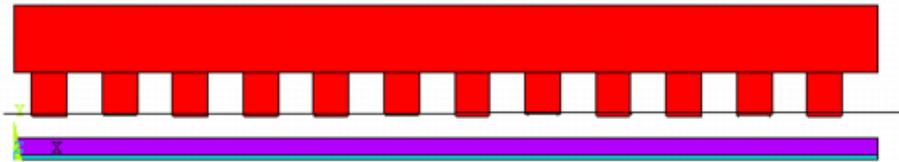


FIG. 4.51: Modèle avec différentes hauteurs de dent

Dans un premier temps, la distribution de la pression de contact entre la GDL et la BPP est présentée dans la figure 4.52. Sous une précompression uniforme, la distribution de la pression dans chaque zone de contact est évidemment différente car les différentes hauteurs de dents de la plaque BPP conduisent à différents états de contact. Certaines zones de contact sont totales pour des hauteurs élevées, certaines zones de contact sont incomplètes quand la hauteur est courte. Sous un chargement la précompression uniforme, c'est la dent avec la hauteur la plus élevée parmi les dents de la plaque BPP qui est la première en contact avec la plaque GDL. Il est évident que les différents états de contact conduisent à différentes aires de contact et à différentes déformations de la plaque GDL.

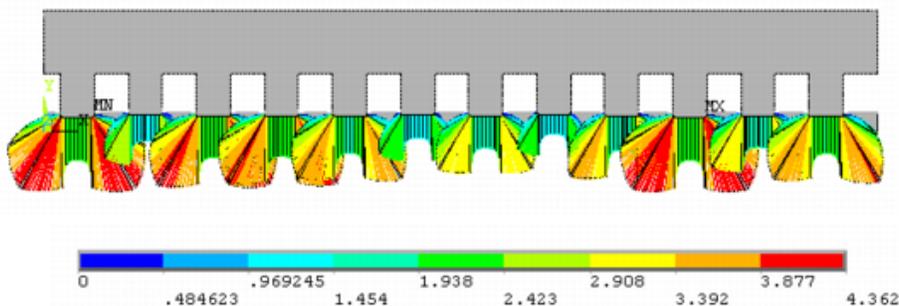


FIG. 4.52: Pression avec différentes dents

La figure 4.53 montre la distribution de la déformation de la plaque GDL pour différentes hauteurs des dents de la plaque BPP. La déformation de la plaque GDL est différente pour chaque dent, ce qui conduit à une porosité non uniforme. Pour des hauteurs élevées, la contrainte élevée conduit à une déformation élevée et à une faible porosité de la plaque GDL. En revanche, les zones tout juste en contact obtenues pour de faibles hauteurs des dents ne sont pas fortement compressées et la porosité y est donc meilleure.

L'aire de contact, la pression de contact au point 1 et la pression de contact sur l'axe de symétrie de chaque dent sont indiquées dans le tableau 4.2.

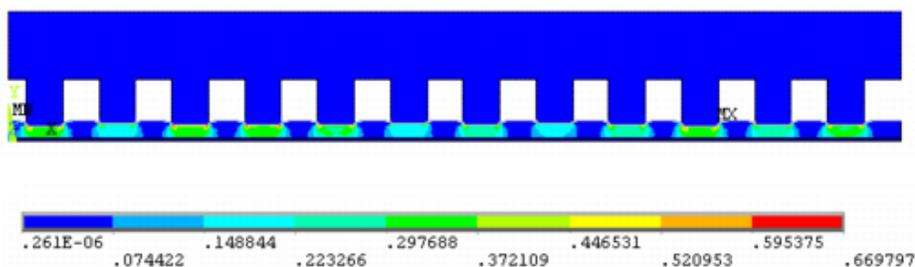


FIG. 4.53: Déformation de la plaque GDL avec différentes hauteurs des dents

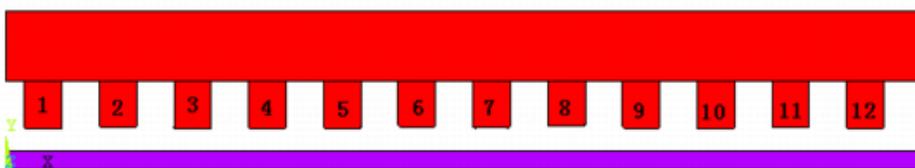


FIG. 4.54: Numéro des dents

TAB. 4.2: Variation des états de contact sur les dents

No. des dents	Aire de contact (mm)	Pression au point 1 (Mpa)	Pression sur l'axe de symétrie (Mpa)	Différence de pression (Mpa)	Hauteurs des dents (mm)
1	0.85704	4.36	2.26	2.10	1.046
2	0.80469	2.62	1.35	1.27	0.971
3	0.85704	4.14	2.13	2.01	1.017
4	0.85704	4.05	2.08	1.97	1.005
5	0.85704	3.79	1.93	1.86	1.002
6	0.80469	2.43	1.22	1.21	0.97
7	0.80469	3.24	1.68	1.56	0.979
8	0.80469	2.19	1.03	1.16	0.966
9	0.83087	3.82	1.78	2.04	1.003
10	0.85704	4.36	2.27	2.09	1.046
11	0.80469	3.34	1.63	1.71	0.993
12	0.85705	3.95	1.94	2.01	1.01

La différence des hauteurs de dents de la plaque BPP conduit à différents états de contact entre toutes les petites dents de la plaque BPP et la plaque GDL : la pression et l'aire de contact sont différentes, ce qui a une influence sur la performance des piles. En effet, les résistances de contact sont différentes, les températures aussi. Tout ceci n'est pas favorable à une performance optimale de la PAC et peut agir sur la durée de vie des piles.

4.8 Conclusions

Dans ce chapitre, une étude est effectuée sur les influences des paramètres variables attribués aux effets mécaniques aux interfaces de la structure de la PAC. La variation des paramètres comme la précompression, le rayon du congé et la largeur des dents de la plaque BPP, les épaisseurs de GDL et MEA est étudiée. On a trouvé que la précompression a une influence importante pour le contact à l'interface, la précompression de 0.1 mm permet de réaliser un contact complet entre BPP/GDL, d'obtenir une bonne uniformité de la pression de contact à l'interface, et la porosité la plus grande possible pour la plaque GDL. Le rayon du congé de dents change la pression de contact, la longueur de contact entre BPP/GDL et la déformation de la plaque GDL. On a trouvé qu'un rayon de congé de 0.05 mm est un bon compromis pour la performance de la PAC. En ce qui concerne l'influence des épaisseurs de GDL et MEA, une plaque GDL épaisse de 0.375 mm permet de garder une grande porosité. De plus, une membrane de 0.05 mm est considérée grâce à sa petite résistance propre pour la performance de la PAC. L'étude de l'influence de la géométrie à l'interface a montré que les aspérités réduisent la surface de contact et diminuent donc la performance de la pile. Il en est de même avec les irrégularités des hauteurs de dents de la plaque BPP.

Ces défauts de fabrication doivent donc être bien contrôlés au moment de la mise en œuvre de la pile.

Conclusions et perspectives

Conclusions

Le but de ce travail était de développer un modèle de la pile basé sur la méthode des éléments finis et permettant d'étudier le comportement mécanique au niveau des interfaces multi-contacts dans la pile à combustible. La pile de type PEM ayant une structure lamellaire, tous les éléments sont en contact les uns avec les autres. Il est évident que le contact joue un rôle important dans le fonctionnement et la performance des piles. Aussi nous a-t-il paru pertinent d'approfondir les connaissances sur ces différents contacts et de proposer des valeurs optimales pour certains paramètres qui pourraient être prises en compte au moment de la conception.

Tout au long de ce mémoire nous avons présenté des points importants qui ont permis de mieux connaître les phénomènes de contact au sein d'une pile. En résumé, nous pouvons définir trois points pour lesquels les études dans ce travail sont originales :

- **le traitement du contact** : pour ce premier point, nous avons utilisé la méthode du bi-potential développée par De Saxcé et Feng pour la résolution des problèmes de contact avec frottement en statique dans la structure de la pile.
- **le rôle du contact dans la pile à combustible** : pour ce second point, nous avons étudié le rôle du contact dans la performance de la pile à travers : la pression de contact, la zone de contact et la déformation sur la zone de contact.
- **L'influence de certains paramètres sur la performance** : pour ce troisième point, nous avons étudié l'influence de différents paramètres sur les interfaces de la pile à combustible : précompression, rayon du congé et largeur des dents de la BPP, épaisseurs de la plaque GDL et MEA, etc. afin de proposer une structure optimale pour la performance de la pile à combustible.

Comme nous l'avons présenté dans la chapitre 2, la résolution des problèmes de contact

par la méthode du bi-potentiel, développée par De Saxcé et Feng [Fen95], est précise et rapide.

Dans le chapitre 3, la modélisation de la plaque bipolaire (BPP), de la couche de diffusion gazeuse (GDL) et de la membrane échangeuse de protons (MEA) a permis de montrer que des zones de décollements existaient entre la MEA et la GDL. Considérant ensuite que ces deux éléments étaient collés (physiquement possible par un recuit), nous avons constaté que la dent rectangulaire avec angle droit engendrait une répartition de la pression normale de contact d'allure hyperbolique à l'approche du coin. L'introduction d'un congé à la place de l'angle droit a permis d'atténuer de manière conséquente cette concentration de contraintes. Une modélisation prenant en compte la porosité des matériaux de la GDL a ensuite montré qu'une déformation importante diminuait la porosité et gênait la circulation des gaz réactifs.

Le chapitre 4 a été consacré à l'influence de certains paramètres de chargement ou d'ordre géométrique sur le fonctionnement de la pile. Des valeurs optimales ont été proposées pour les paramètres suivants : précompression, largeur et rayon du congé des dents de la BPP, épaisseur de la GDL et MEA. Nous avons également vu que les aspérités de surface provenant d'une fabrication non parfaite des surfaces lisses diminuaient indirectement la performance de la pile. Ces valeurs pourront par la suite être utilisées pour la conception des piles et pour de futures études sur les piles à combustibles.

Il est à noter que ce travail a donné lieu à une publication dans un journal scientifique [ZRFY10] et deux communications dans des congrès [ZRF09b][ZRF09a].

Perspectives

Les différents résultats obtenus dans ce travail nous encouragent fortement à poursuivre dans cette voie. De nombreuses modifications peuvent être envisagées à plus ou moins court terme dans le but d'étendre nos connaissances sur la façon d'améliorer le fonctionnement des piles à combustible. Ces recherches à venir peuvent être regroupées en deux parties indépendantes : l'optimisation de la structure multi-contact de la PAC et la modélisation des phénomènes couplés (mécano-électro-chimiques) au sein de la pile.

La première partie apparaît comme une suite logique du dernier chapitre de cette thèse. En effet nous avons vu que les effets inter-agissaient parfois de manière contraire, et qu'il fallait trouver des compromis. Il serait donc très intéressant de suivre un plan d'expériences, appliqué au numérique, pour dégager les paramètres les plus influents sur la performance de la pile et ainsi proposer une optimisation globale de la pile. Nous pourrions peut être ajouter de nouveaux paramètres à ceux déjà étudiés comme par exemple, le profondeur D_{CN} des dents de la plaque BPP afin d'étudier l'influence de D_{CN} sur le flux des gaz réactifs.

Dans le second axe de recherche, nous envisageons d'étendre le champ de l'étude mécanique aux phénomènes chimiques et électroniques présents dans la pile à combustible. Différents couplages peuvent être étudiés :

- **mécanique-électronique** : nous avons vu dans le chapitre 3 que la pression de contact et la zone de contact sont liées à la résistance de contact et au courant électrique de la pile. De nombreux développements peuvent être apportés au niveau du choix d'un modèle entre les paramètres mécaniques et le phénomène électrique. En effet, chaque domaine d'application propose ses spécificités et il est nécessaire d'adapter au mieux notre modélisation aux cas étudiés.
- **mécanique-chimique** : dans notre travail dans le chapitre 4, nous avons observé l'influence des paramètres mécaniques sur la porosité de la plaque GDL. Nous avons vu que l'alimentation des gaz réactifs était influencée par la déformation mécanique de la plaque GDL et par la largeur des dents de la plaque BPP. Cependant, il existe bien d'autres phénomènes chimiques pour lesquels l'étude mécanique-chimique serait essentielle.

Nous espérons que les travaux présentés dans ce mémoire pourront constituer une base à de futures recherches dans le domaine de la modélisation des phénomènes couplés mécaniques, électriques, chimiques présents au sein d'une pile à combustible.

Références bibliographiques

- [AC91] P. Alart and A. Curnier. A mixed formulation for frictional contact problems prone to Newton like solution methods. *Comp. Meth. Appl. Mech. Engng.*, 92, :353–375, 1991.
- [All09] SGL Co. Allemagne. <http://www.sglcarbon.com>, 2009.
- [APT02] E. Antolini, R. R. Passos, and E. A. Ticianelli. Effects of the carbon powder characteristics in the cathode gas diffusion layer on the performance of polymer electrolyte fuel cells. *Journal of Power Sources*, 109 :477–482, 2002.
- [AUW05] M. Aoki, H. Uchida, and M. Watanabe. Novel evaluation method for degradation rate of polymer electrolytes in fuel cells. *Electrochem Commun*, 12 :1434–1438, 2005.
- [Bat82] K. J. Bathe. Finite element procedures in engineering analysis. *Prentice-Hall*, 1982.
- [BGGM08] D. Bograchev, M. Gueguen, J.-C. Grandidier, and S. Martemianov. Stress and plastic deformation of MEA in fuel cells-stress generated during cell assembly. *Journal of Power Sources*, 180 :393–401, 2008.
- [BKH03] T. M. Besmann, J. W. Klett, and J. J. Henry. Carbon composite bipolar plates. *Progress Report*, 1-4, 2003.
- [BL05] J. J. Baschuk and X. Li. A general formulation for a mathematical PEM fuel cell model. *Journal of Power Sources*, 134-153, 2005.
- [BN91] T. Belytschko and M. O. Neal. Contact-impact by the pinball algorithm with penalty and lagrangian methods. *Int. J. Num. Meth. Engng.*, 31 :547–572, 1991.
- [BSP⁺08] M. Barber, T. S. Sun, E. Petrach, X. Wang, and Q. Zou. Contact mechanics approach to determine contact surface area between bipolar plates and current collector in proton exchange membrane fuel cells. *Journal of Power Sources*, 185 :1252–1256, 2008.
- [Can08] Ballard Co. Canada. <http://www.ballard.com>, 2008.

- [CB86] A. B. Chaudhary and K. J. Bathe. A solution method for static and dynamic analysis of three dimensional contact problems with friction. *Computers & Structures*, 24 :855–873, 1986.
- [CB97] T. R. Chandrupatla and A. D. Belegundu. Introduction to finite elements in engineering. *Prentice-Hall*, Upper Saddle Rive, 1997.
- [CEA06] <http://www.cea.fr>, 2006.
- [CFC04] J. M. Corr ea, F. A. Farret, and L. N. Canha. An electrochemical based fuel cell model suitable for electrical engineering automation approach. *IEEE Trans. on Industrial Electronics*, 1103 - 1112, 2004.
- [CHW97] C. Cavalca, S. T. Homeyer, and E. Walsworth. Flow field plate for use in a proton exchange membrane fuel cell. *US Patent*, No. 5,686,199, 1997.
- [CHWC07] W. R. Chang, J. J. Hwang, F. B. Weng, and S. H. Chan. Effect of clamping pressure on the performance of a PEM fuel cell. *Journal of Power Sources*, 115 :149–154, 2007.
- [Cia88] P. G. Ciarlet. *Mathematical Elasticity, Vol. 1 : Three-dimensional elasticity*. North-Holland, 1988.
- [Cia90] P. G. Ciarlet. *Plates and Junctions in Elastic multi-structures*. SpringerVerlag, 1990.
- [Cia97] P. G. Ciarlet. *Mathematical elasticity, Vol.2 : Theory of plates*. Elsevier Science Publishers, 1997.
- [CKPS98] P. W. Christensen, A. Klarbring, J. S. Pang, and N. N. Str mberg. Formulation and comparison of algorithms for frictional contact problems. *Int. J. Numer. Meth. Engng.*, 42 :145–173, 1998.
- [CT71] S. H. Chan and I. S. Tuba. A finite element method for contact problems of solid bodies. *Int. J. Mech. Sci.*, 13 :615–639, 1971.
- [CTK91] N. J. Carpenter, R. L. Taylor, and M. G. Katona. Lagrange constraints for transient finite element surface contact. *Int. J. Num. Meth. Engng.*, 32 :103–128, 1991.
- [Cur84] A. Curnier. A theory of friction. *Int. J. Solids Structures*, 20(7) :637–647, 1984.
- [dSF91] G. de Saxc e and Z.-Q. Feng. New inequality and functional for contact with friction : The implicit standard material approach. *Mech. Struct. Mach.*, 19 :301–325, 1991.
- [dSF98] G. de Saxc e and Z.-Q. Feng. The bi-potential method : a constructive approach to design the complete contact law with friction and improved nume-

-
- tical algorithms. *Mathematical and Computer Modeling*, 28(4-8) :225–245, 1998.
- [DuP06] DuPont. <http://www2.dupont.com>, 2006.
- [FCP⁺96] N. J. Fletcher, C. Y. Chow, E. G. Pow, H. H. Wozniczka, G. H. Voss, and D. P. Wilkinson. *Canadian Patent*, No. 2,192,170, 1996.
- [Fen95] Z.-Q. Feng. 2D or 3D frictional contact algorithms and applications in a large deformation context. *Comm. Numer. Meth. Engng.*, 11 :409–416, 1995.
- [FPA06] J. Feser, A. Prasad, and S. Advani. Experimental characterization of in-plane permeability of gas diffusion layers. *Journal of Power Sources*, 162 :1226–1231, 2006.
- [FPH06] Z.-Q. Feng, F. Peyraut, and Q.-C. He. Finite deformations of Ogden’s materials under impact loading. *Int. J. Non-linear Mech.*, 41 :575–585, 2006.
- [FPZ90] D. François, A. Pineau, and A. Zaoui. *Comportement mécanique des matériaux*. Hermes, 1990.
- [Fri01] F. Frisch. PEM fuel cell stack sealing using silicone elastomers. *Sealing Technology*, 93 :7–9, 2001.
- [Fun65] Y. C. Fung. *Foundations of solid mechanics*. Prentice-Hall, 1965.
- [FVFP06] Z.-Q. Feng, C. Vallée, D. Fortuné, and F. Peyraut. The 3é hyperelastic model applied to the modeling of 3D impact problems. *Finite Elements in Analysis and Design*, 43 :51–58, 2006.
- [Gar99] J. Garrigues. Eléments finis, <http://esm2.imt-mrs.fr/gar/ef.html>, 1999.
- [GFP⁺06] J. T. Gostick, M. W. Fowler, M. D. Pritzker, M. A. Ioannidis, and L. M. Behra. Experimental characterization of in-plane permeability of gas diffusion layers. *Journal of Power Sources*, 162 :228–238, 2006.
- [GHL06] J. Ge, A. Higier, and H. Liu. Effect of gas diffusion layer compression on PEM fuel cell performance. *Journal of Power Sources*, 922-927, 2006.
- [GHV69] J. M. Grimwood, B. C. Hacker, and P. J. Vorzimmer. Project gemini technology and operations :. *A Chronology NASA*, SP-4002, 1969.
- [GN60] W. T. Grubb and L. W. Niedrach. Batteries with solid ion-exchange membrane electrolytes. *Journal of The Electrochemical Society*, 107 :131–135, 1960.
- [Gro39] W. R. Grove. On voltaic series and the combination of gases by platinum. *The London and Edimburgh philosophical magazine and journal of science*, 14 :127–130, 1839.

- [HC93] Q.-C. He and A. Curnier. Anisotropic dry friction between two orthotropic surfaces undergoing large displacements. *European Journal of Mechanics -A/Solids*, 12 :631–666, 1993.
- [HCCP05] R. Hayre, S. W. Cha, W. Colella, and F. B. Prinz. *Fuel Cell Fundamentals*. Wiley, 2005.
- [HFdM04] M. Hjjaj, Z.-Q. Feng, G. de Saxcé, and Z. Mróz. There-dimensional finite element computations for frictional contact problems with non-associated sliding rule. *Int. J. Numer. Meth. Engng.*, 60 :2045–2076, 2004.
- [Hoo03] G. Hoogers. *Fuel cell Technology Handbook*. CRC Press, 2003.
- [HP98] P. Hunter and A. Pullan. FEM/BEM notes. *Bioengineering Research Group, Departement of Engineering Science, University of Auckland(New Jersey)*, 1998.
- [HSK07] A. Husar, M. Serra, and C. Kunusch. Description of gasket failure in a 7 cell PEMFC stack. *Journal of Power Sources*, 169 :85–91, 2007.
- [HTS⁺76] T. J. R. Hughes, R. L. Taylor, J. L. Sackman, A. Curnier, and W. Kanoknukulchai. A finite element method for a class of contact-impact problems. *Comp. Meth. Appl. Mech. Engng.*, 8 :249–276, 1976.
- [Hug87] T. J. R. Hughes. The finite element method : Linear static and dynamic finite element engng. *Pretic-Hall,Inc*, Enlewood cliffs :New Jersey, 1987.
- [Hun92] I. Huněk. On a penalty formulation for contact-impact problems. *Computers & Structures*, 48(2) :192–203, 1992.
- [HWDA07] J. E. Hensleya, J. D. Waya, S. F. Decb, and K. D. Abneyc. The effects of thermal annealing on commercial nafion membranes. *J. Membr. Sci.*, 298 :190–201, 2007.
- [IML04] J. Ihonon, M. Mikkola, and G. Lindbergh. Flooding of gas diffusion backing in PEMFCs physical and electrochemical characterization. *J. Electrochemical Society*, 151 :1152–1161, 2004.
- [Iqb03] M. T. Iqbal. Modeling and control of a wind fuel cell hybrid energy system. *Renewable Energy*, 223 - 237, 2003.
- [Jap08] Toray Co. Japon. <http://www.toray.com>, 2008.
- [JL09] K. Jiao and X. G. Li. Effects of various operating and initial conditions on cold start performance of polymer electrolyte membrane fuel cells. *Int. J. Hydr. Energ.*, 34 :8171–8184, 2009.
- [JSB⁺00] L. R. Jordan, A. K. Shukla, T. Behrsing, N. R. Avery, B. C. Muddle, and M. Forsyth. Diffusion layer parameters influencing optimal fuel cell performance. *Journal of Power Sources*, 86 :250–254, 2000.

-
- [KFT08] J. Kleemanna, F. Finsterwaldera, and W. Tillmetz. Characterisation of mechanical behaviour and coupled electrical properties of polymer electrolyte membrane fuel cell gas diffusion. *Journal of Power Sources*, 153 :130–135, 2008.
- [KH98] T. H. Ko and L. C Huang. The influence of cobaltous chloride modification on physical properties and microstructure of modified PAN fiber during carbonization. *J. Appl. Polymer Sci.*, 70 :2409–2415, 1998.
- [KKS⁺06] A. Kusoglu, A. M. Karlsson, M. H. Santare, S. Cleghorn, and W. B. Johnson. Mechanical response of fuel cell membranes subjected to hygro-thermal loading. *Journal of Power Sources*, 161 :987–996, 2006.
- [KKS⁺07] A. Kusoglu, A. M. Karlsson, M. H. Santare, S. Cleghorn, and W. B. Johnson. Mechanical behavior of fuel cell membranes under humidity cycles and effect of swelling anisotropy on the fatigue stresses,. *Journal of Power Sources*, 170 :345–358, 2007.
- [Kla92] A. Klarbring. Mathematical programming and augmented Lagrangian methods for frictional contact problems. In A. Curnier, editor, *Contact Mechanics International Symposium*, pages 409–422. Presses Polytechniques et Universtaires Romandes, Lausanne, Switzerland, 1992.
- [KS81] N. Kikuchi and Y. J. Song. Penalty/finite element approximations of a class of unilateral problems in linear elasticity. *Quarterly of Applied Mathematics*, 39 :1–22, 1981.
- [LD03] J. Larminie and A. Dicks. Fuel cell systems explained. *John Wiley and Sons, Inc.*, New York, 2003.
- [LHH05] S. J. Lee, C. D. Hsu, and C. H. Huang. Analyses of the fuel cell stack assembly pressure. *Journal of Power Sources*, 145 :353–361, 2005.
- [LHVZM99] W. K. Lee, C. H. Ho, J. W. Van Zee, and M. Murthy. The effects of compression and gas diffusion layers on the performance of a PEM fuel cell. *Journal of Power Sources*, 84 :45–51, 1999.
- [LLA98] J. H. Lee, T. R. Lalk, and A. J. Appleby. Modeling electrochemical performance in large scale proton exchange membrane fuel cell stacks. *Journal of Power Sources*, 258 - 268, 1998.
- [LM04] S. Litster and G. McLean. PEM fuel cell electrodes. *Journal of Power Sources*, 130 :61–76, 2004.
- [MABHAJ07] A. R. Maher, S. Al-Baghdadi, A. K. Haroun, and S. Al-Janabi. Influence of the design parameters in a proton exchange membrane (PEM) fuel cell on the

- mechanical behavior of the polymer membrane. *Journal of Power Sources*, 21 :2258–2267, 2007.
- [Mac09] C. S. MacDonald. *Effect of Compressive Force on PEM Fuel Cell*. PhD thesis, University of Waterloo, 2009.
- [MC03] V. Mehta and J. S. Cooper. Review and analysis of PEM fuel cell design and manufacturing. *Journal of Power Sources*, 114 :32–53, 2003.
- [Men00] T. Mennola. *Design and Experimental Characterization of Polymer Electrolyte Membrane Fuel Cells*. PhD thesis, Helsinki University of Technology, 2000.
- [Mor88] J. J. Moreau. Unilateral contact and dry friction in finite freedom dynamics. In J.J. Moreau and P.D. Panagiotopoulos, editors, *Non Smooth Mechanics and Applications, CISM Courses and Lectures*, volume 302, pages 1–82. Springer-Verlag, Wien, New York, 1988.
- [Mor94] J. J. Moreau. Some numerical methods in multibody dynamics : application to granular materials. *Eur. J. Mech., A/Solids*, 13 :93–114, 1994.
- [Mos03] R. Mosdale. Transport électrique routier, véhicules électriques à piles à combustible. *Techniques de l'ingénieur*, 12 :1–16, 2003.
- [MYP04] V. Mishra, F. Yang, and R. Pitchumani. Measurement and prediction of electrical contact resistance between gas diffusion layers and bipolar plate for applications to PEM fuel cells. *Journal of Fuel Cell Sci. Technol.*, 1 :2–9, 2004.
- [MYP05] V. Mishra, F. Yang, and R. Pitchumani. Analysis and design of PEM fuel cells. *Journal of Power Sources*, 141 :47–64, 2005.
- [Nes04] M. Nesme. Modèle déformable par éléments finis élasticité linéaire et grands déplacements, pour application à la simulation chirurgicale. *PhD thesis*, Institut National Polytechnique de Grenoble, 2004.
- [NHM08] I. Nitta, O. Himanen, and M. Mikkola. Contact resistance between gas diffusion layer and catalyst layer of PEM fuel cell. *Electrochemistry Communications*, 10 :47–51, 2008.
- [Ode67] J. T. Oden. *Mechanics of elastic structures*. Mc Graw-Hill, 1967.
- [Ogd84] R. W. Ogden. *Non-linear elastic deformations*. Ellis Horwood, 1984.
- [Par89] H. A. Parisch. Consistent tangent stiffness matrix for three-dimensional non-linear contact analysis. *Int. J. Numer. Meth. Engng.*, 28 :1803–1812, 1989.
- [Par09] J. Parsons. Low cost, durable seals for PEM fuel cells, <http://www.hydrogen.energy.gov/>, 2009.

-
- [PDA01] G. Picinbono, H. Delingette, and N. Ayache. Non-linear and anisotropic elastic soft tissue models for medical simulation. *ICRA 2001 (IEEE International Conference on Robotics and Automation, Seoul, Korea, 21-26 May)*, pages 1370–1375, 2001.
- [PL04] M. A. Puso and T. A. Laursen. A mortar segment-to-segment contact method for large deformation solid mechanics. *Comp. Meth. Appl. Mech. Engng.*, 193 :601–629, 2004.
- [Pou63] M. Pourbaix. Atalax d’équilibres electrochimiques. In *Engineering and Technology*, Gauthier-Villars, 1963.
- [PS80] A. Pellegrini and P. M. Spaziante. Bipolar separator for electrochemical cells and method of preparation thereof. *US Patent*, No.4,197,178, 1980.
- [PS98] P. Papadopoulos and J. M. Solberg. A Lagrange multiplier method for the finite element solution of frictionless contact problems. *Mathematical and Computer Modelling*, 28 :373–384, 1998.
- [PTG95] V. Paganin, E. A. Ticianelli, and E. R. Gonzalez. Development and electrochemical studies of gas diffusion electrodes for polymer electrolyte fuel cells. *Journal of Applied Electrochemistry*, 26 :297–304, 1995.
- [RA09] <http://bama.ua.edu/~rreddy/projects/fuel-cells.htm>, 2009.
- [RF03] C. Renaud and Z.-Q. Feng. BEM and FEM analysis of Signorini contact problems with friction. *Comput. Mech.*, 31 :390–399, 2003.
- [Sch97] G. G. Scherer. Interfacial aspects in the development of polymer electrolyte fuel cells. *Solid State Ionics*, 94 :249–257, 1997.
- [SGVZ07] S. Shimpalee, S. Greenway, and J. W. Van-Zee. Numerical studies on rib channel dimension of flow-field on PEMFC performance. *Journal of Power Sources*, 32 :842–856, 2007.
- [SH04] V. Stanic and M. Hoberecht. Mechanism of pin-hole formation in membrane electrode assemblies for PEM fuel cells. *Proceedings of 4th International Symposium on Proton Conducting Membrane Fuel Cells*, 1891, 2004.
- [SL92] J. C. Simo and T. A. Laursen. An augmented Lagrangian treatment of contact problems involving friction. *Computers & Structures*, 42 :97–116, 1992.
- [SLC⁺08] Z. Y. Su, C. T. Liu, H. P. Chang, C. H. Li, K. J. Huang, and P. C. Sui. A numerical investigation of the effects of compression force on PEM fuel cell performance. *Journal of Power Sources*, 183 :182–192, 2008.
- [SLVZ06] S. Shimpalee, W. K. Lee, and J. W. Van-Zee. The impact of channel path length on PEMFC flow field design. *Journal of Power Sources*, 160 :398–406, 2006.

- [SLVZNN01] S. Shimpalee, W. K. Lee, J. W. Van-Zee, and H. Naseri-Neshat. Advances in computational fluid dynamics modeling for PEM fuel cells. *Proceedings of ASME IECEC IECEC-2001-10*, Savannah :GA, 2001.
- [SNCH00] P. Stevens, F. Novel-Cattin, and A. Hammou. *Pile à combustible, Techniques de l'Ingénieur*. Trainté Génie Electrique, 2000.
- [SP98] A. M. Solberg and P. Papadopoulos. A finite element method for contact/impact. *Finite Elements in Analysis and Design*, 30 :297–311, 1998.
- [Spe84] A. J. M. Spencer. *Continuum Thoery of Fiber-Reinforced Composites*. Springer-Verlag, New York, 1984.
- [Sri06] S. Srinivasan. *Fuel Cells : From Fundamentals to Applications*. Springer Science, 2006.
- [TR05] M. M. Tomadakis and T. J. Robertson. The viscous permeability of random fiber structure : comparison of elctrical and diffusional estimates with experimental and analytical results. *J. composite materials*, 163-187, 2005.
- [TY73] T. Tsuta and S. Yamaji. Finite element analysis of contact problem. In Tokyo seminar on element analysis, editor, *Theory and practice in finite element structural analysis*, pages 178–194, 1973.
- [UFS⁺96] M. Uchida, Y. Fukuoka, Y. Sugawaya, N. Eda, and A. Ohta. Effects of microstructure of carbon support in the catalyst layer on the performance of polymer-electrolyte fuel cells. *J. Electrochemical Society*, 143 :2245–2252, 1996.
- [Vee07] <http://www.veeco.com>, 2007.
- [WBB⁺04] M. Williams, E. Begg, L. Bonville, H. R. Kunz, and J. M. Fenton. Characterization of gas diffusion layers for PEMFC. *Journal of the Electrochemical Society*, 8 :1173–1180, 2004.
- [WDE91] D. S. Watkins, K. W. Dircks, and D. G. Epp. Novel fuel cell fluid flow field plate. *US Patent*, No. 4,988,583, 1991.
- [WDE92] D. S. Watkins, K. W. Dircks, and D. G. Epp. Fuel cell fluid flow field plate. *US Patent*, No. 5,108,849, 1992.
- [WN04] A. Z. Weber and J. Newman. A theoretical study of membrane constraint in polymer-electrolyte fuel cells. *AIChE Journal*, 50 :3215–3226, 2004.
- [Wri02] P. Wriggers. *Computational contact mechanics*. John Wiley & Sons, 2002.
- [WST03] H. L. Wang, M. A. Sweikart, and J. A. Turner. Stainless steel as bipolar plate material for polymer electrolyte membrane fuel cells. *Journal of Power Sources*, 115 :243–251, 2003.

-
- [WSZ08] X. T. Wang, Y. Song, and B. Zhang. Experimental study on clamping pressure distribution in PEM fuel cells. *Journal of Power Sources*, 179 :305–309, 2008.
- [Zie77] O. C. Zienkiewicz. *The Finite Element Method*. Mc Graw-Hill, London, 1977.
- [ZL06] T. Zhou and H. Liu. Effects of the electrical resistances of the gdl in a PEM fuel cell. *Journal of Power Sources*, 161 :444–453, 2006.
- [ZLS⁺06] L. H. Zhang, Y. Liu, H. M. Song, S. X. Wang, Y. Y. Zhou, and S. J. Hu. Estimation of contact resistance in proton exchange membrane fuel cells. *Journal of Power Sources*, 162 :1165–1171, 2006.
- [ZRF09a] Z. M. Zhang, C. Renaud, and Z.-Q. Feng. Numerical analysis of mechanical multi-contacts on the interfaces in a PEM fuel cell stack. In *Computational Structure Engineering*, Shanghai-Chine, 2009.
- [ZRF09b] Z. M. Zhang, C. Renaud, and Z.-Q. Feng. Simulation numérique des interfaces multi-contacts dans une pile à combustible de pem. In *Colloque National en calcul des structures*, Giens-France, 2009.
- [ZRFY10] Z. M. Zhang, C. Renaud, Z.-Q. Feng, and H. P. Yin. Mechanical contact analysis on the interfaces in a proton exchange membrane fuel cell. *Mécanique et Industries*, In Press, 2010.
- [ZWHT84] O. C. Zienkiewicz, W. L. Wood, L. W. Hine, and R. L. Taylor. A unified set of single step algorithms. part 1. general formulation and application. *Int. J. Numer. Meth. Engng.*, 20 :1529–1552, 1984.
- [ZWM06] P. Zhou, C. W. Wu, and G. J. Ma. Contact resistance prediction and structure optimization of bipolar plates. *Journal of Power Sources*, 159 :1115–1122, 2006.

Table des figures

1.1	Pollution environnementale	8
1.2	Accroissement de CO_2 depuis le 19ème siècle	8
1.3	Pile inventée par Grove [Gro39]	10
1.4	Francis Thomas Bacon et la pile à combustible [Sri06]	11
1.5	Pile à combustible de PEM utilisée dans le programme Gemini [GHV69]	11
1.6	Schéma d'une MEA relatif au principe de fonctionnement d'une pile de PEM	14
1.7	Courbe de polarisation de la pile PEM	16
1.8	Schéma de la structure d'un empilement de la pile de PEM	18
1.9	Assemblage d'une cellule de la PAC de PEM avec tous les composants	19
1.10	Processus de l'assemblage d'une cellule de la PAC	19
1.11	Schéma du processus opératoire de la réaction de la pile	20
1.12	Profil de la MEA (électrolyte, anode et cathode) et GDL [CEA06]	21
1.13	Image SEM des couches fibres carbonées de la GDL [Mac09]	23
1.14	Profils des plaques bipolaires commerciales [Men00]	24
1.15	Schéma de la localisation des joints dans une cellule de la PAC	25
1.16	Schéma d'une cellule unitaire représente des interfaces multi-contacts	27
1.17	Profile de la plaque de la GDL [TR05]	29
1.18	Relation "perméabilité-porosité"	30
1.19	Schéma des phénomènes mécaniques existants dans une pile de PEM	34
1.20	Fissure sur GDL [SLC+08]	36
1.21	'Pinhole' sur MEA [SH04]	36
2.1	Exemples d'éléments finis surfaciques et volumiques.	38
2.2	Interpolation linéaire et quadratique	39
2.3	La transformation iso-paramétrique d'un élément cubique.	40
2.4	Approximation linéaire d'une loi de comportement	41
2.5	Repère local de contact	46
2.6	Graphe des conditions de Signorini.	48
2.7	Loi de frottement de Coulomb	50
2.8	Cône de Coulomb	51

2.9	Régularisation des lois de contact	54
2.10	Projection sur le disque de Coulomb	58
2.11	Projection sur le cône de Coulomb	59
2.12	Un barreau avec des conditions aux limites	60
2.13	Maillage initial et déformé	61
2.14	Distribution de la contrainte de cisaillement	61
2.15	Pression normale et pression tangentielle par ANSYS et FER	62
2.16	Pression normale par ANSYS et FER	62
2.17	Déplacement tangentiel sur la zone AD	63
2.18	Déplacement normal sur la zone AD	63
3.1	Modèle symétrique 2D de la PAC	67
3.2	Modèle paramétrique de la PAC	68
3.3	Maillage du modèle éléments finis	70
3.4	Composantes d'une zone de contact	70
3.5	Erreur de détection du contact	71
3.6	La zone de contact entre les plaques GDL et BPP	72
3.7	Conditions aux limites et la charge	73
3.8	Déformation totale du modèle	74
3.9	Déformation de la GDL	74
3.10	Une séparation de contact	74
3.11	déplacement normal	74
3.12	Pression nulle	75
3.13	Distribution de la pression	75
3.14	(a) Concentration de contrainte et (b) pression de contact	76
3.15	(a) Modèle du contact actuel et (b) modèle symétrique	77
3.16	(a) Maillage et (b) Maillage fin	78
3.17	(a) Contraintes de trois plaques et (b) contraintes de la MEA	79
3.18	(a) Contraintes de trois plaques et (b) contraintes de la MEA avec maillage fin	79
3.19	(a) Pression à l'interface et (b) pression agrandie aux fonds des congés	81
3.20	Déformation de la plaque GDL	82
3.21	Déformation de la plaque GDL avec pores de la porosité de 78%	84
3.22	Porosité de la GDL déformée et porosité initiale de la GDL	85
3.23	Déformation de la plaque GDL avec pores de la porosité de 50%	86
3.24	Porosité de la GDL déformée et porosité initiale de la GDL	86
3.25	Déformation de la plaque GDL avec pores aléatoires	87
3.26	Porosité de la GDL déformée et porosité initiale de la GDL	87
4.1	Précompression = 0.01 mm	90

4.2	Précompression = 0.02 mm	90
4.3	Précompression = 0.04 mm	90
4.4	Précompression = 0.06 mm	90
4.5	Précompression = 0.08 mm	91
4.6	Précompression = 0.1 mm	91
4.7	Précompression = 0.12 mm	91
4.8	Précompression = 0.14 mm	91
4.9	Variation de la pression avec la précompression de la PAC	92
4.10	Variation de l'aire de contact avec la précompression de la PAC	93
4.11	Précompression = 0.01 mm	94
4.12	Précompression = 0.02 mm	94
4.13	Précompression = 0.04 mm	94
4.14	Précompression = 0.06 mm	94
4.15	Précompression = 0.08 mm	95
4.16	Précompression = 0.1 mm	95
4.17	Précompression = 0.12 mm	95
4.18	Précompression = 0.14 mm	95
4.19	Variation de la déformation et de la porosité avec la précompression	96
4.20	Rayon $R_{RIB} = 0.01$ mm	98
4.21	$R_{RIB} = 0.03$ mm	98
4.22	$R_{RIB} = 0.05$ mm	98
4.23	$R_{RIB} = 0.07$ mm	98
4.24	$R_{RIB} = 0.09$ mm	98
4.25	$R_{RIB} = 0.12$ mm	98
4.26	$R_{RIB} = 0.16$ mm	98
4.27	$R_{RIB} = 0.20$ mm	98
4.28	$R_{RIB} = 0.25$ mm	99
4.29	$R_{RIB} = 0.30$ mm	99
4.30	$R_{RIB} = 0.35$ mm	99
4.31	$R_{RIB} = 0.40$ mm	99
4.32	Variation de la pression de contact avec le rayon du congé	100
4.33	Variation de l'aire de contact avec le rayon du congé	101
4.34	Variation de la déformation et la porosité avec le rayon du congé	102
4.35	Variation de l'aire de contact avec la largeur des dents de la BPP	103
4.36	Différence de la pression de contact au poin 1 et 3 avec différentes largeurs	104
4.37	Porosité au point 1 pour différentes largeurs	105
4.38	Porosité sur l'axé de symétrie avec différentes largeurs des dents	105
4.39	Variation de la porosité au point 1 pour différentes épaisseurs	107

4.40	Variation de la porosité sur l'axe de symétrie pour différentes épaisseurs . . .	108
4.41	Uniformité de pression de contact pour différentes épaisseurs des MEAs . . .	109
4.42	Porosité au point 1 pour différentes épaisseurs des membranes	109
4.43	Porosité sur l'axe de symétrie pour différentes épaisseurs des membranes .	110
4.44	Contrainte dans la MEA (0.05 mm)	111
4.45	Contrainte dans la MEA (0.183 mm)	111
4.46	La tendance entre la résistance de contact et la rugosité différente	113
4.47	Modélisation des rugosités	114
4.48	Maillage de l'interface rugueuse	114
4.49	Influence des aspérités sur l'aire de contact	115
4.50	Influence de la densité des aspérités	116
4.51	Modèle avec différentes hauteurs de dent	117
4.52	Pression avec différentes dents	117
4.53	Déformation de la plaque GDL avec différentes hauteurs des dents	118
4.54	Numéro des dents	118

Liste des tableaux

1.1	Types des piles à combustibles	12
1.2	Caractéristiques des MEAs de la série de Nafion	22
1.3	Tableau des caractéristiques de GDL de la série de TGP-H	23
1.4	Caractéristiques des BPPs de la SGL	25
1.5	Paramètres du modèle de Tomadakis	30
2.1	Temps de CPU	64
3.1	Propriétés mécaniques de la plaque BPP, la plaque GDL et la plaque MEA .	66
3.2	Propriétés et géométries du modèle de contact paramétrique de la PAC . . .	69
3.3	Aire de contact à l'interface entre la plaque GDL et la plaque BPP	81
4.1	Aspérités des plaques BPP et GDL	113
4.2	Variation des états de contact sur les dents	118