

## Modélisation d'un électrolyseur à haute température dans ThermoOptim

Nous nous contenterons ici de présenter un modèle assez simple, correspondant à une technologie présentée dans [Rodriguez et Pinteaux, 2003].

L'électrolyse à haute température (HTE) est un procédé avancé qui effectue la réaction d'électrolyse en phase gazeuse, c'est-à-dire à partir de vapeur, à une température comprise entre 750 °C et 950 °C.

À la sortie de l'électrolyseur, l'hydrogène mélangé à de la vapeur d'eau est collecté. La séparation ne pose pas de problème particulier : il suffit de condenser l'eau pour obtenir de l'hydrogène pur.

Un électrolyseur haute température reçoit un mélange d'eau et d'hydrogène (de composition molaire 80% - 20%) à 30 bar et 800 °C. Il en sort deux fluides : l'oxygène et le mélange initial enrichi en hydrogène.

Le modèle ThermoOptim comporte un mélangeur classique en amont servant à créer le mélange, et un diviseur externe en aval, les deux étant reliés par une transfo-point jouant un rôle passif. La structure du modèle est donnée figure 1 et l'écran de l'électrolyseur figure 2.

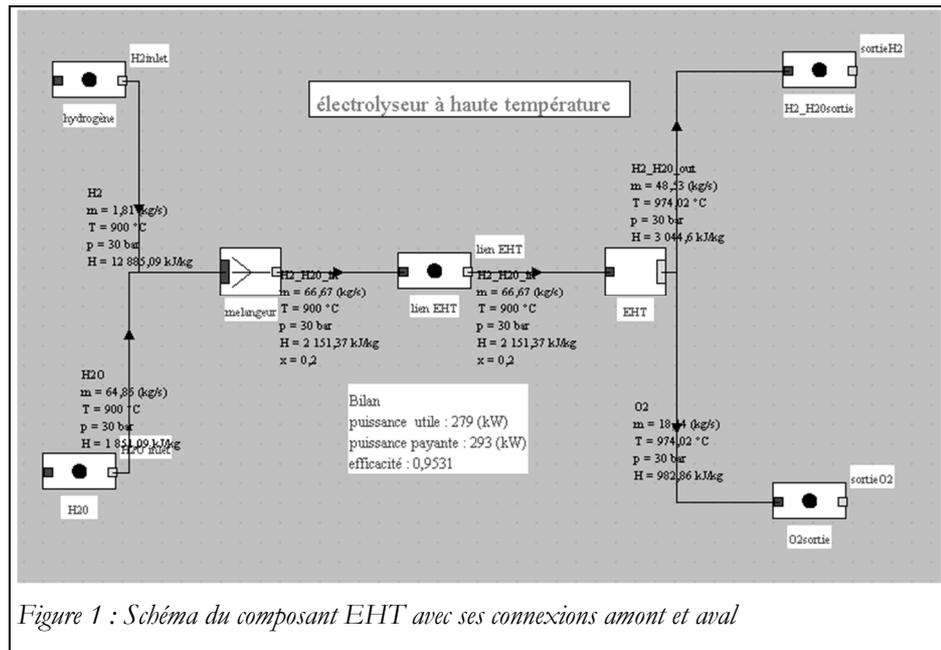


Figure 1 : Schéma du composant EHT avec ses connexions amont et aval

Le modèle que nous présentons est particulièrement

simple : il prend en compte comme paramètres la fraction molaire d'hydrogène en sortie  $\alpha$  ou l'électricité fournie  $\Delta H$ , et le « rendement » en kWh/Nm<sup>3</sup>, qui exprime la quantité d'électricité à fournir pour électrolyser 1 Nm<sup>3</sup> d'hydrogène.

Le bilan des espèces est facile à établir. L'électricité apportée sert à électrolyser l'eau et à produire de l'hydrogène et de l'oxygène, et est convertie pour partie en chaleur qui élève la température de l'appareil.

Deux modes de calcul sont possibles :

- soit déterminer  $\Delta H$  connaissant  $\alpha$  et le rendement en kWh/Nm<sup>3</sup> ;
- soit déterminer  $\alpha$  en se donnant  $\Delta H$  et le rendement en kWh/Nm<sup>3</sup>.

Dans le premier mode, le calcul se fait de la manière suivante : le modèle détermine la fraction molaire d'entrée et le débit molaire d'entrée à partir de la veine principale du diviseur externe, en déduit le débit molaire d'hydrogène à électrolyser, et établit ses bilans.

Appelons  $\beta$  la fraction molaire d'entrée en hydrogène, et  $\dot{m}_{\text{mol}}$  le débit molaire total en entrée.

Le débit molaire d'hydrogène électrolysé  $\dot{m}_{\text{H}_2}$  est :

$$\dot{m}_{\text{H}_2} = (\alpha - \beta) \dot{m}_{\text{mol}}$$

La composition du mélange  $\frac{[H_2]}{[H_2O]}$  étant connue, sa masse molaire peut être déterminée. Comme son débit molaire est égal au débit molaire d'entrée, son débit massique est connu.

Le débit molaire d'oxygène est  $\frac{\dot{m}_{H_2}}{2}$ . Son débit massique s'en déduit directement.

Le « rendement » en kWh/Nm<sup>3</sup> permet de calculer la quantité d'électricité  $\Delta H$  à fournir par :

$$\Delta H = \dot{m}_{H_2} M_{H_2} \frac{3600}{1000 \cdot 0,08988}$$

$\Delta H_0$  étant la chaleur de réaction théorique (246 kJ/mol), la chaleur libérée vaut :

$$Q = \Delta H - \dot{m}_{mol} \Delta H_0,$$

Dans le second mode, l'enchaînement des calculs est légèrement modifié : connaissant  $\Delta H$ ,  $\dot{m}_{H_2}$  peut être déterminé. On en déduit  $\alpha$ . Q est déterminé de la même manière.

### Résultats du modèle

Avec les paramétrages ci-dessus (0,9 kmol/s d'hydrogène et 3,6 kmol/s d'eau à l'entrée de l'électrolyseur), les compositions gazeuses obtenues sont données dans les figures 3 et 4.

Ce modèle peut être utilisé pour représenter un électrolyseur intégré dans un système, et notamment pour étudier l'intégration thermique du procédé, afin de minimiser l'apport de chaleur externe.

nom du composant	fraction molaire	fraction massique
H2	0,1999998	0,02721328
H2O	0,8000002	0,9727867

Figure 3 : Hydrogène humidifié en entrée, débit 66,7 kg/s, PCI : 3 264 kJ/kg, PCS : 3 854 kJ/kg

nom du composant	fraction molaire	fraction massique
H2	0,452	0,084497
H2O	0,548	0,915503

Figure 4 : Hydrogène humidifié en sortie, débit 48,53 kg/s, PCI : 10 136 kJ/kg, PCS : 11 968 kJ/kg

Figure 2 : Ecran du composant EHT