

EXEMPLE D'APPLICATION PROSIMPLUS

PRODUCTION D'HYDROGENE PAR ELECTROLYSE

OBJECTIFS DE CET EXEMPLE

L'intérêt principal de cet exemple est de présenter l'utilisation du module « électrolyseur » permettant la production d'hydrogène par électrolyse de l'eau. Il permet également de découvrir des fonctionnalités graphiques de ProSimPlus (changement du visuel des modules, affichage de tags sur le flowsheet).

DIFFUSION	<input checked="" type="checkbox"/> Libre Internet	<input type="checkbox"/> Réservée aux clients ProSim	<input type="checkbox"/> Réduite	<input type="checkbox"/> Confidentielle
------------------	---	---	---	--

FICHIERS CORRESPONDANTS	<i>PSPS_EX_FR-Production-Hydrogene-Electrolyse.pmp3</i>
--------------------------------	---

Il est rappelé au lecteur que ce cas d'utilisation est un exemple et ne doit pas être utilisé à d'autres fins. Bien que cet exemple soit basé sur un cas réel il ne doit pas être considéré comme un modèle de ce type de procédé et les données utilisées ne sont pas toujours les plus exactes disponibles. ProSim ne pourra en aucun cas être tenu pour responsable de l'application qui pourra être faite des calculs basés sur cet exemple.

Energy

Fives ProSim

Siège social : Immeuble Stratège A - 51 rue Ampère - 31670 Labège - FRANCE

Tél. : +33 (0)5 62 88 24 30

S.A.S. au capital de 147 800 € - 350 476 487 R.C.S. Toulouse - Siret 350 476 487 00037 - APE 5829C - N° TVA FR 10 350 476 487

www.fivesgroup.com / www.fives-prosim.com

TABLE DES MATIERES

1. MODELISATION DU PROCEDE	3
1.1. Présentation du procédé	3
1.2. Schéma de simulation	5
1.3. Constituants	6
1.4. Modèle thermodynamique	6
1.5. Conditions opératoires	7
1.5.1. Section « Production d'hydrogène »	7
1.5.2. Section « Utilités »	15
1.6. Initialisations	16
1.6.1. Section « Production d'hydrogène »	16
1.6.2. Section « Utilités »	16
1.7. « Trucs et astuces »	17
1.7.1. Changement du visuel des modules	17
1.7.2. Affichage de « tags » sur le flowsheet	18
2. RESULTATS	19
2.1. Productions d'hydrogène et d'oxygène	19
2.2. Caractéristiques de l'électrolyseur	19
2.3. Bilan d'énergie sur l'électrolyseur	21
2.4. Etude de sensibilité	22
3. BIBLIOGRAPHIE	24

1. MODELISATION DU PROCEDE

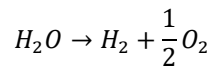
1.1. Présentation du procédé

L'hydrogène fait l'objet d'un intérêt croissant dans les projets de transition énergétique et devrait être amené à prendre une place importante dans le mix énergétique. Utilisé à ce jour essentiellement dans l'industrie chimique ou le raffinage, il représente également un vecteur énergétique offrant une alternative intéressante aux énergies fossiles. C'est un carburant inépuisable et non polluant, permettant de stocker l'énergie produite par les principales sources d'énergie renouvelable (hydraulique, éolien, photovoltaïque) [AFH17], [CEA12], [DAM92].

L'hydrogène étant quasiment inexistant dans la nature à l'état moléculaire, il est obtenu par les principaux modes de production suivants :

- Le reformage ou la gazéification d'hydrocarbures ;
- La dissociation thermochimique de l'eau ou de la biomasse ;
- L'électrolyse de l'eau.

L'intérêt de l'hydrogène comme énergie propre reste aujourd'hui limité par le fait qu'il est essentiellement produit à partir d'énergies fossiles (reformage et gazéification d'hydrocarbures). L'électrolyse de l'eau représente la principale alternative pour une production décarbonée d'hydrogène. Cela consiste en l'application d'un courant électrique afin de décomposer l'eau en oxygène et en hydrogène :



Une cellule d'électrolyse est constituée de deux électrodes (l'anode et la cathode) reliées à un générateur de courant continu et séparées par un électrolyte. Cet électrolyte peut être à l'état liquide (solution aqueuse acide ou basique) ou solide (membrane en polymère ou en céramique). Le module d'électrolyse est constitué d'un empilement de cellules d'électrolyse. Ces dernières peuvent être associées en parallèle ou en série.

*Remarque : une distinction est ainsi faite, dans cet exemple, entre les grandeurs associées à une **cellule** d'électrolyse et celles associées au **module** (empilement de cellules).*

La loi de Faraday permet de calculer la production d'hydrogène dans un électrolyseur idéal composé de N cellules d'électrolyse :

$$F_{H_2,prod} = \frac{\eta_F \cdot I_{cell} \cdot N}{z F}$$

Avec :

$F_{H_2,prod}$: le débit molaire total d'hydrogène produit par l'électrolyseur (mol/s)

η_F : l'efficacité de Faraday (-)

I_{cell} : l'intensité électrique d'une cellule d'électrolyse (A)

N : le nombre total de cellules d'électrolyse (-)

z : le nombre d'électrons échangés par mole d'hydrogène produit ($z = 2$ électrons/mol)

F : la constante de Faraday (96485 C/mol)

Le module d'électrolyse disponible dans ProSimPlus permet de représenter les trois principales technologies d'électrolyseur :

- L'électrolyseur alcalin : les cellules sont séparées par un diaphragme et sont immergées dans une solution électrolytique.
- L'électrolyseur PEM (Proton Exchange Membrane) : les cellules sont séparées par un électrolyte solide constitué d'une membrane polymère assurant la conduction des protons H^+ .
- L'électrolyseur SOEC (Solid Oxide Electrolysis Cell) : les cellules sont séparées par un électrolyte solide constitué d'une membrane en céramique assurant la conduction des ions O^{2-} .

Dans ce contexte, cet exemple d'application (inspiré des travaux de recherche publiés dans [SAN18]) présente la simulation d'un procédé de production d'hydrogène par électrolyse alcaline. Les bilans de matière et d'énergie sont calculés pour les éléments suivants :

- Le module d'électrolyse ;
- Les équipements annexes (pompes, ballons de séparation liquide – vapeur) ;
- Les utilités.

1.2. Schéma de simulation

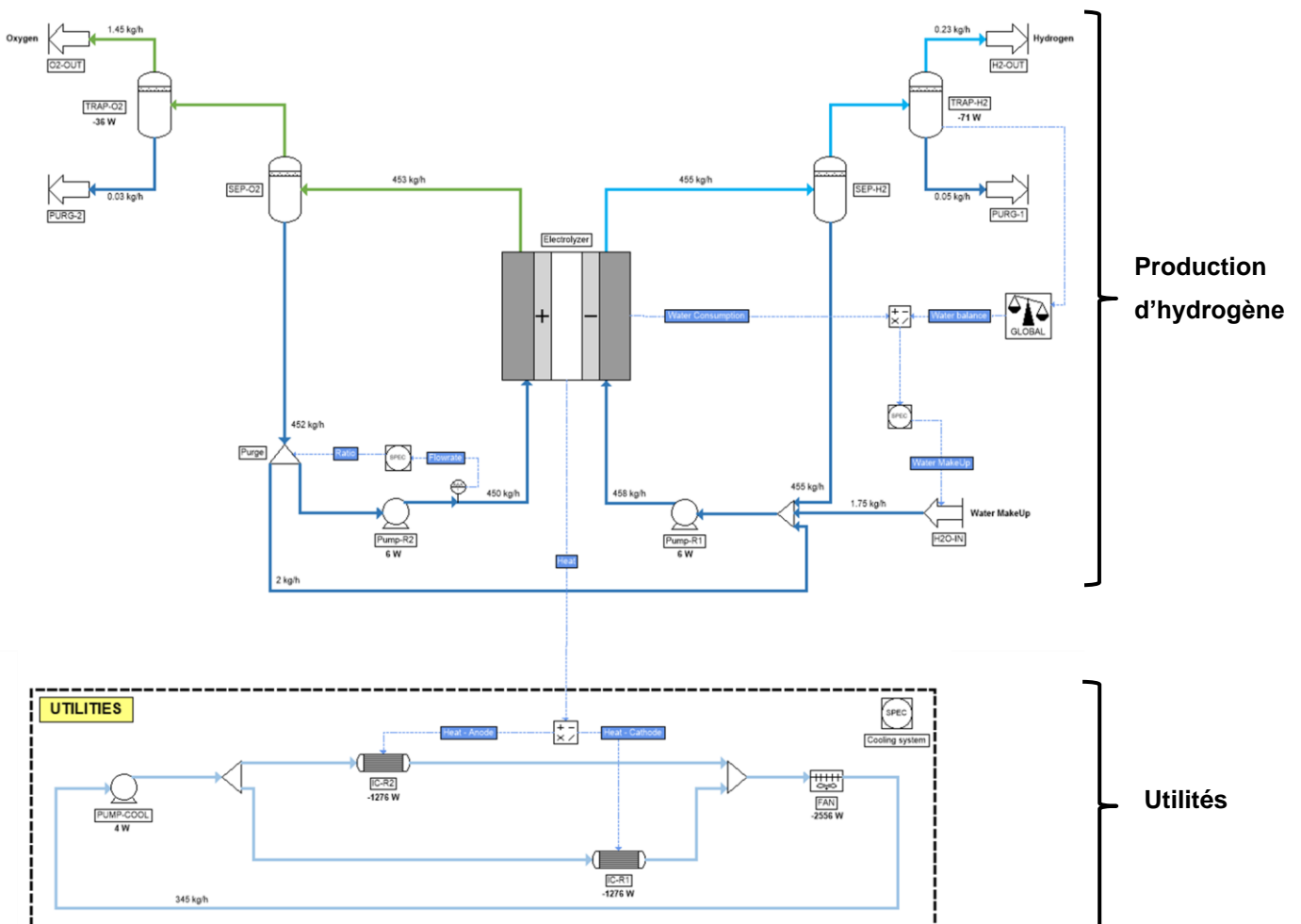
Le schéma de simulation est présenté ci-dessous. Il est composé de deux sections :

1. Production d'hydrogène :

L'élément central de cette section est le module d'électrolyse (« Electrolyzer »), permettant la production des flux liquide-vapeur « H2-STACK » (composé essentiellement d'hydrogène et d'eau) et « O2-STACK » (composé essentiellement d'oxygène et d'eau). Ces flux, en sortie des électrodes, sont envoyés dans des ballons de séparation (« SEP-O2 » et « SEP-H2 »). La solution électrolytique est recyclée en entrée de l'électrolyseur à l'aide de pompes (un appoint est nécessaire coté cathode, tandis qu'une purge est nécessaire côté anode). Les flux gazeux en sortie des ballons de séparation sont amenés à pression atmosphérique et à une température de 25°C afin de réduire la teneur en eau.

2. Utilités :

Cette section permet de représenter les utilités servant au refroidissement de l'électrolyseur. La quantité totale de chaleur nécessaire est calculée par le module « Electrolyzer ». Une moitié de cette chaleur, correspondant à l'anode, est envoyée dans l'échangeur « IC-R2 » tandis que l'autre moitié, correspondant à la cathode, est envoyée dans l'échangeur « IC-R1 ». Le fluide utilité consiste en de l'eau pure circulant en boucle fermée et refroidie par un aérateur (« FAN »).



1.3. Constituants

Les constituants pris en compte dans la simulation ainsi que leurs formules chimiques et leurs numéros CAS¹ sont présentés dans le tableau ci-après. Les propriétés de corps purs sont extraites de la base de données standard des logiciels ProSim [ROW22]. La solution électrolytique est assimilée à de l'eau dans cet exemple.

Constituant	Formule chimique	Numéro CAS ⁽¹⁾
Water	H ₂ O	7732-18-5
Hydrogen	H ₂	1333-74-0
Oxygen	O ₂	7782-44-7

1.4. Modèle thermodynamique

Deux « calculators » thermodynamiques sont définis dans cet exemple :

- « Process » : ce calculator, est composé de tous les constituants définis précédemment, et est utilisé dans la section « Production d'hydrogène ». Le profil thermodynamique retenu est le profil « PSRK ».
- « Cooling water » : ce calculator est utilisé dans la section « Utilités » pour la modélisation du système de refroidissement de l'électrolyseur. Le modèle thermodynamique retenu est le modèle spécifique « eau pure ».

¹ CAS Registry Numbers® are the intellectual property of the American Chemical Society and are used by ProSim SA with the express permission of ACS. CAS Registry Numbers® have not been verified by ACS and may be inaccurate.

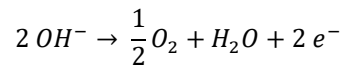
1.5. Conditions opératoires

1.5.1. Section « Production d'hydrogène »

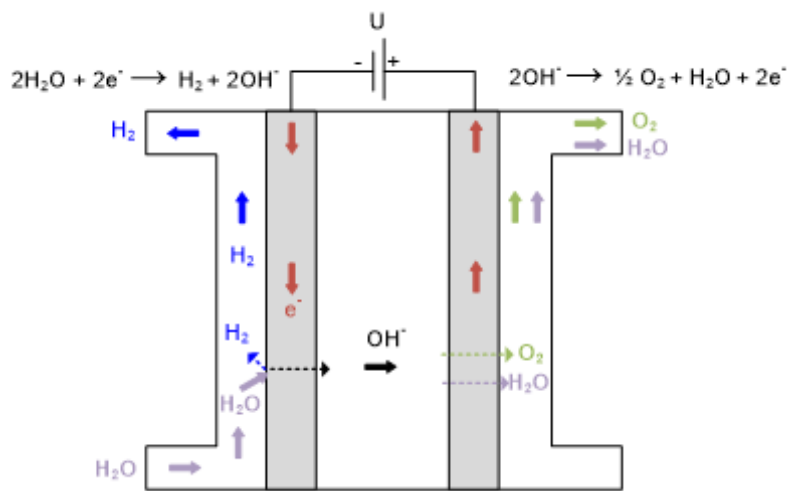
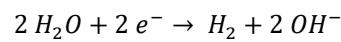
✓ Module d'électrolyse « Electrolyzer » :

Le module d'électrolyse, de type « alcalin », est composé de 12 cellules associées en série. Les réactions considérées aux électrodes sont les suivantes :

- A l'anode : formation d'oxygène



- A la cathode : formation d'hydrogène



Les conditions opératoires sont présentées dans le tableau suivant :

Configuration de l'électrolyseur	Technologie	Alcaline
	Configuration de l'empilement	Série
	Nombre de cellules	12
	Surface active par cellule	0,1 m ²
Conditions opératoires	Puissance électrique	10 kW
	Pertes thermiques	266 W
	Température	75°C
	Pression à l'anode	Egale à l'alimentation
	Pression à la cathode	Egale à l'alimentation

La puissance électrique étant fournie, la tension de cellule doit être déterminée afin de déduire l'intensité de courant, et ainsi calculer l'ensemble des caractéristiques électriques du module et des cellules d'électrolyse. La tension de cellule peut être définie de trois façons différentes : elle peut être fournie, calculée par une corrélation ou définie par script (modèle utilisateur). Dans cet exemple, elle est calculée par une corrélation, à partir des différentes contributions suivantes :

$$V_{cell} = V_{rev} + V_{ohm} + V_{act} + V_{con}$$

Avec :

V_{cell} : la tension de cellule (V)

V_{rev} : la tension réversible (V)

V_{ohm} : la surtension ohmique (V)

V_{act} : la surtension d'activation (V)

V_{con} : la surtension de concentration (V)

Les conditions de calcul de ces termes sont présentées dans le tableau suivant :

Terme	Mode de calcul	Corrélation	Paramètres
V_{rev}	Calculé par une corrélation	$V_{rev} = \frac{\Delta G_r(T, P)}{z \cdot F}$	-
V_{ohm}	Calculé par une corrélation	$V_{ohm} = (A + B \cdot T) \cdot J_{cell}$	A = 4,26336.10 ⁻⁵ B = 6,88874.10 ⁻⁹
V_{act}	Calculé par une corrélation	$V_{act} = A \log \left[\left(B + \frac{C}{T + E} + \frac{D}{(T + E)^2} \right) \cdot J_{cell} + 1 \right]$	A = 0,33824 B = -0,01539 C = 2,00181 D = 15,24178 E = -273,15
V_{con}	Négligé	$V_{con} = 0$	-

L'onglet « Efficacités » permet de renseigner les grandeurs suivantes :

- Les taux de transfert d'hydrogène et d'oxygène à travers la membrane, définis comme suit :

$$\text{Transfert d'hydrogène} = \frac{(\text{Débit d'hydrogène})_{\text{anode}}}{(\text{Débit d'hydrogène})_{\text{produit}}}$$

$$\text{Transfert d'oxygène} = \frac{(\text{Débit d'oxygène})_{\text{cathode}}}{(\text{Débit d'oxygène})_{\text{produit}}}$$

- L'efficacité de Faraday, celle-ci pouvant être renseignée de trois façons différentes : elle peut être fournie, calculée par une corrélation ou définie par script (modèle utilisateur).

Les conditions de calcul de ces termes sont présentées dans le tableau suivant :

Transfert à travers la membrane	Transfert d'hydrogène	0,8 %
	Transfert d'oxygène	0 %
Efficacité Faraday	Mode de calcul	Calculée par une corrélation
	Corrélation	$\eta_F = \frac{J_{cell}^2}{A + B.T + J_{cell}^2} (C + D.T)$
	Paramètres	A = 1285298,66 B = -2953,15 C = 132,368 D = -0,104

Enfin, dans les options, l'impression des courbes « tension – densité de courant » est activée.

- ✓ Ballons de séparation :

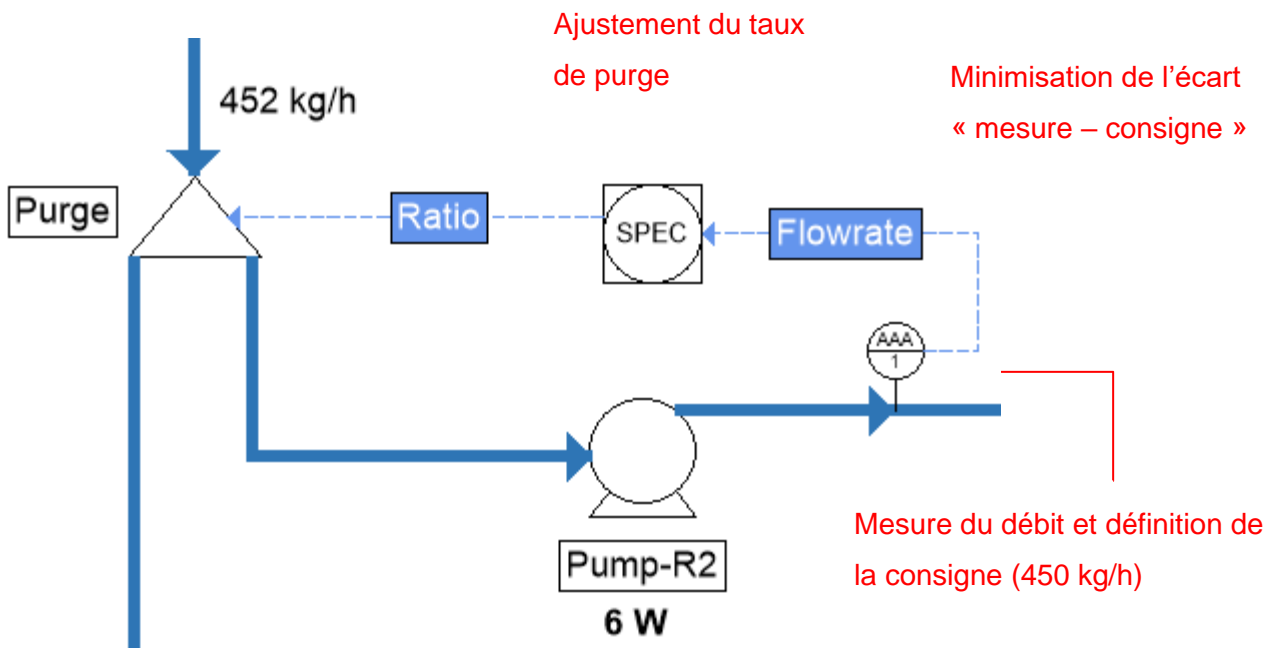
Nom	Type	Conditions opératoires
SEP-O2	Pression et quantité de chaleur données	Pertes de charge = 0,3 bar Quantité de chaleur = adiabatique
SEP-H2	Pression et quantité de chaleur données	Pertes de charge = 0,3 bar Quantité de chaleur = adiabatique
TRAP-O2	Température et pression données	T = 25°C P = 1 bar
TRAP-H2	Température et pression données	T = 25°C P = 1 bar

✓ Pompes :

Nom	Pression de refoulement	Efficacités
Pump-R1	7 bar	Valeurs par défaut
Pump-R2	7 bar	Valeurs par défaut

✓ Purge :

Une purge est nécessaire, côté anode, afin d'éliminer l'excédent d'eau. Dans la mesure où l'eau est recyclée en amont de l'électrolyseur, le débit d'eau qui « tourne en rond » est déterminé automatiquement par le logiciel afin que le bilan de matière soit équilibré. Ce débit d'eau dépend du taux de purge défini. Une spécification est ajoutée afin que le logiciel calcule automatiquement le taux de purge conduisant à un débit souhaité de 450 kg/h en entrée de l'électrolyseur. Cette spécification est constituée des éléments ci-dessous.



La configuration par défaut est utilisée pour le module « SPEC » permettant la gestion des contraintes et des recyclages.

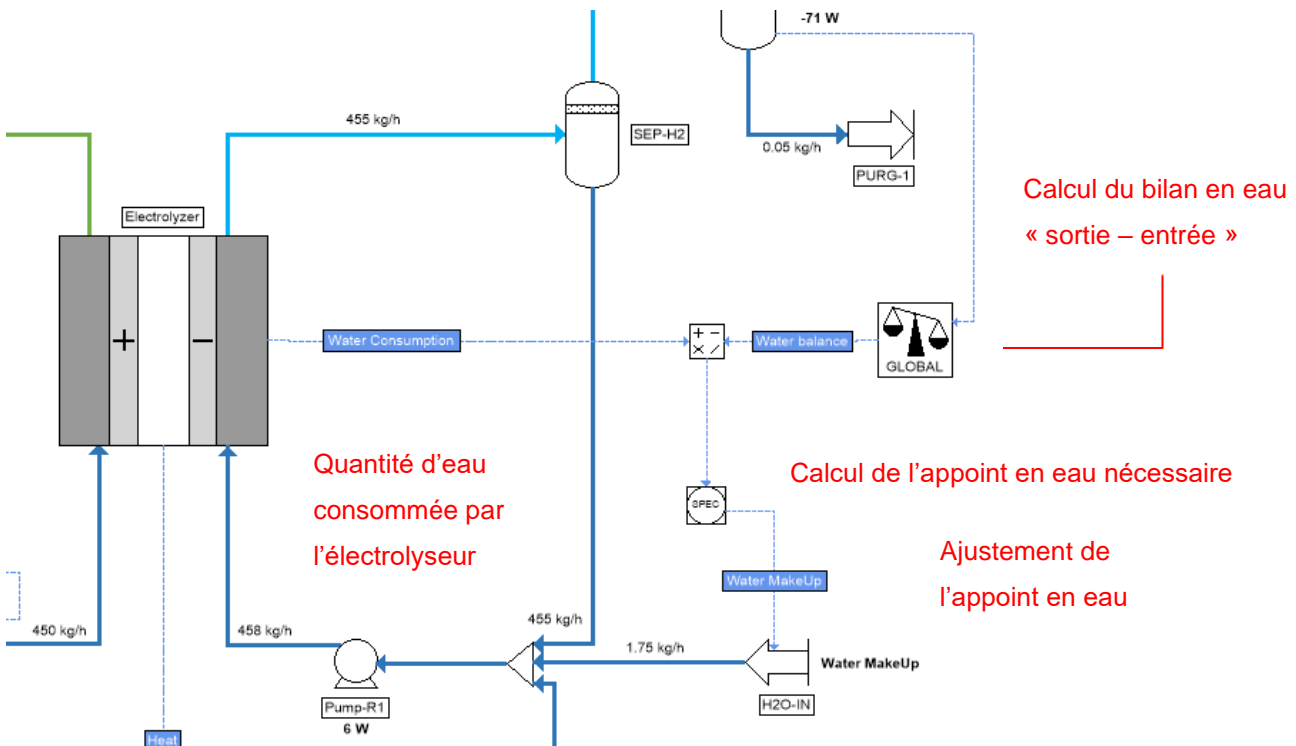
Les courants d'information sont définis de la façon suivante (avec les fenêtres de configuration du courant « débit » à gauche et « ratio » à droite) :

The screenshot shows the configuration window for an information current named 'Débit'. It includes fields for 'Nom' (Débit) and 'Desc'. Under 'Nature de l'information à émettre', the 'Ecart entre la valeur mesurée et la consigne' option is selected. Below this, it states that the segment to be emitted will be determined automatically based on the 'Mesure' module parameters, with 'Début' and 'Fin' both set to 0. Under 'Nature de l'information à récupérer', the 'Automatique' option is selected, stating the segment to be received will be determined automatically based on the 'Gestion des contraintes et des recyclages' module parameters, also with 'Début' and 'Fin' both set to 0. 'OK' and 'Annuler' buttons are at the bottom.

The screenshot shows the configuration window for an information current named 'Ratio'. It includes fields for 'Nom' (Ratio) and 'Desc'. Under 'Nature de l'information à émettre', the 'Automatique' option is selected. Below this, it states that the segment to be emitted will be determined automatically based on the 'Gestion des contraintes et des recyclages' module parameters, with 'Début' and 'Fin' both set to 0. Under 'Nature de l'information à récupérer', the 'Taux de partage des courants sortants' option is selected. Below this, it instructs to enter the start and end positions for the segment to be received in the 'Purge' module, with 'Début' and 'Fin' both set to 2. 'OK' and 'Annuler' buttons are at the bottom.

✓ Appoint en eau :

Un appoint en eau est nécessaire, côté cathode, afin de compenser la quantité d'eau consommée dans l'électrolyseur ainsi que celle sortant au niveau des phases vapeur des ballons de séparation. Ici également, un module « SPEC » est utilisé afin d'ajuster automatiquement de débit d'eau alimenté en fonction des conditions opératoires.



Le module « Bilan généralisé » est utilisé afin de calculer le bilan en eau (« sortie – entrée »), en tenant compte de l'eau sortant du procédé au niveau des flux « O2-STACK » et « H2-STACK » sortant de l'électrolyseur et de l'eau entrant dans le procédé au niveau du flux « H2O-IN ». Le paramétrage de ce module est le suivant :

Bilan généralisé (\$BMAT)
— □ ×

Nom:

Desc:

Identification
Paramètres
Scripts
Rapport
Notes
Paramètres avancés

Configuration
Mesures
Options avancées

Nom du courant	Type ▾	De	Vers
O2-PROD	Sortie	SEP-O2	TRAP-O2
H2-PROD	Sortie	SEP-H2	TRAP-H2
H2O-IN	Entrée	H2O-IN	Mélangeur de courants
COOL-OUT_a1	Ignoré	IC-R1	MIX-COOL
COOL-IN	Ignoré	FAN	PUMP-COOL
COOL-IN_a2	Ignoré	SEP-COOL	IC-R2
COOL-OUT_a	Ignoré	MIX-COOL	FAN
COOL-IN_a	Ignoré	PUMP-COOL	SEP-COOL
H2-OUT	Ignoré	TRAP-H2	H2-OUT
COOL_OUT-a2	Ignoré	IC-R2	MIX-COOL
COOL-IN_a1	Ignoré	SEP-COOL	IC-R1
H2-STACK	Ignoré	Electrolyzer	SEP-H2
O2-STACK	Ignoré	Electrolyzer	SEP-O2
PURG-1	Ignoré	TRAP-H2	PURG-1
R-H2-KOH_a	Ignoré	SEP-H2	Mélangeur de courants
PURG-O2-KOH	Ignoré	Purge	Mélangeur de courants
R-H2-KOH	Ignoré	Pump-R1	Electrolyzer
PURG-2	Ignoré	TRAP-O2	PURG-2
R-H2-KOH_b	Ignoré	Mélangeur de co	Pump-R1
R-O2-KOH	Ignoré	Mesure	Electrolyzer
O2-OUT	Ignoré	TRAP-O2	O2-OUT
R-O2-KOH_b	Ignoré	Purge	Pump-R2
R-O2-KOH_c	Ignoré	Pump-R2	Mesure
R-O2-KOH_a	Ignoré	SEP-O2	Purge

OK
Annuler

Un « manipulateur de courant d'information » est ensuite utilisé afin de rajouter, au bilan en eau, la quantité d'eau consommée par l'électrolyseur :

$$\text{Bilan total en eau} = \underbrace{(\text{Eau sortant du procédé} - \text{Eau entrant dans le procédé})}_{\substack{\text{Calculé par le module} \\ \text{« Bilan généralisé »}}} + \underbrace{\text{Eau consommée}}_{\substack{\text{Calculé par le module} \\ \text{« Electrolyseur »}}$$

L'équation utilisée dans le « manipulateur de courant d'information » étant « Sortie = A*Entrée^P + B - C », le coefficient A est fixé à 1 et les courants d'information « Consommation d'eau » et « Bilan eau » sont configurés de la façon suivante :

The image shows two side-by-side screenshots of software configuration windows for information flows.

The left window is titled "Courant information (\$ISTR3)". It has a "Nom:" field containing "Consommation d'eau" and an empty "Desc:" field. Below are three tabs: "Identification", "Paramètres", and "Notes". Under "Identification", there are two sections:

- "Nature de l'information à émettre:" with a dropdown menu set to "Débit molaire total d'eau consommée". Below it is a text box: "Le segment d'information à émettre sera déterminé automatiquement en fonction des paramètres du module 'Electrolyzer'". At the bottom are "Début:" and "Fin:" fields, both containing "0".
- "Nature de l'information à récupérer:" with a dropdown menu set to "Valeur du facteur additif (B)". Below it is a text box: "Le segment d'information à recevoir sera déterminé automatiquement en fonction des paramètres du module 'Manipulateur de courant d'information'". At the bottom are "Début:" and "Fin:" fields, both containing "0".

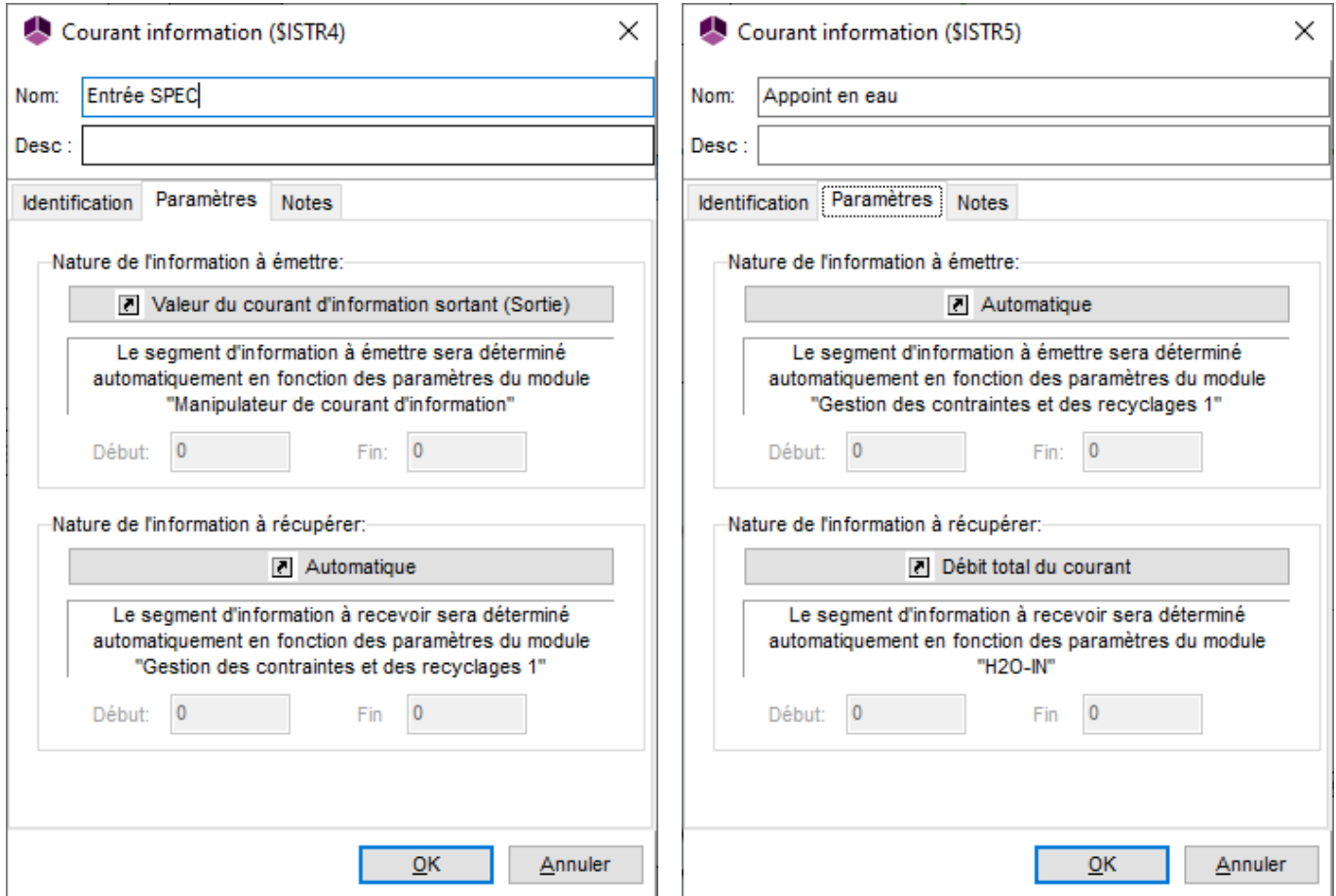
The right window is titled "Courant information (\$ISTR2)". It has a "Nom:" field containing "Bilan eau" and an empty "Desc:" field. Below are three tabs: "Identification", "Paramètres", and "Notes". Under "Identification", there are two sections:

- "Nature de l'information à émettre:" with a dropdown menu set to "Ecart Entrée-Sortie en écart absolu pour le bilan n°...". Below it is a text box: "Le segment d'information à émettre sera déterminé automatiquement en fonction des paramètres du module 'Bilan généralisé'". At the bottom are "Début:" and "Fin:" fields, both containing "0".
- "Nature de l'information à récupérer:" with a dropdown menu set to "Valeur du courant d'information entrant (Entrée)". Below it is a text box: "Le segment d'information à recevoir sera déterminé automatiquement en fonction des paramètres du module 'Manipulateur de courant d'information'". At the bottom are "Début:" and "Fin:" fields, both containing "0".

Both windows have "OK" and "Annuler" buttons at the bottom.

Le module « SPEC » permet ensuite de minimiser la valeur du bilan total en eau en jouant sur le débit d'eau défini dans l'alimentation « H2O-IN ». La méthode numérique « Newton – Raphson » est utilisée (avec les paramètres numériques par défaut).

Les courants d'information en entrée et sortie du module « SPEC » sont définis comme suit :



Remarque : un courant d'information est également défini entre le module « TRAP-H2 » et le module de « bilan généralisé ». Ce courant permet uniquement d'imposer la séquence de calcul des modules afin que le module « bilan généralisé » soit calculé en fin de séquence. Aucune information n'est transmise.

1.5.2. Section « Utilités »

✓ Echangeurs :

Les échangeurs « IC-R1 » et « IC-R2 », permettant de refroidir l'anode et la cathode, sont représentés par des modules « échangeur simple » (le visuel correspondant à un « échangeur tubes et calandre » est sélectionné, cette fonctionnalité étant décrite dans le [paragraphe 1.7.1](#)).

Nom	Pertes de charge	Quantité de chaleur
IC-R1	0,3 bar	0 (valeur d'initialisation)
IC-R2	0,3 bar	0 (valeur d'initialisation)

La quantité de chaleur totale nécessaire est calculée par le module d'électrolyse. Des courants d'informations, couplés à un « manipulateur de courant d'information », permettent de transférer la moitié de cette valeur aux échangeurs « IC-R1 » et « IC-R2 » (quantité de chaleur totale = quantité de chaleur à l'anode + quantité de chaleur à la cathode).

L'équation du « manipulateur de courant d'information » est alors définie par « A = 0,5 » (soit : Sortie = 0,5 * Entrée), avec la configuration suivante pour les courants d'information en entrée (à gauche) et en sortie (à droite) du module :

L'échangeur « FAN » est représenté par un module « consigneur de température » (le visuel correspondant à un « aéroréfrigérant » est sélectionné, cette fonctionnalité étant décrite dans le [paragraphe 1.7.1](#)). La température de consigne en sortie est de 35°C.

✓ Pompe :

Nom	Pression de refoulement	Efficacités
Pump-COOL	2,6 bar	Valeurs par défaut

✓ Diviseur de courants :

Le module « SEP-COOL » est défini avec un taux de partage de 0,5.

✓ Module « SPEC »

Dans la mesure où cette section comprend un recyclage, un module « SPEC » est nécessaire. La configuration par défaut est utilisée.

1.6. Initialisations

1.6.1. Section « Production d'hydrogène »

La séquence de calcul est automatiquement déterminée par ProSimPlus. Deux courants coupés sont identifiés : les courants « R-H2-KOH » et « R-O2-KOH » (les deux courants entrants de l'électrolyseur). L'initialisation suivante est utilisée :

Courant	Débit massique partiel	Température	Pression
R-O2-KOH	Eau : 450 kg/h	75 °C	7 bar
R-H2-KOH	Eau : 450 kg/h	75 °C	7 bar

1.6.2. Section « Utilités »

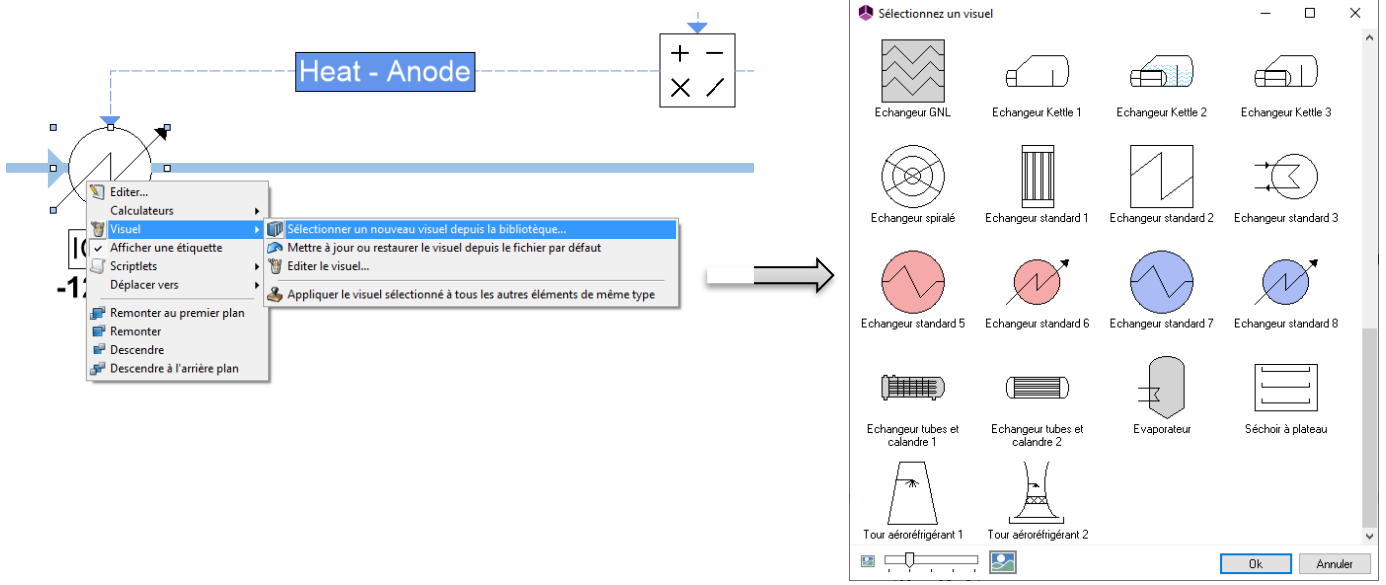
La séquence de calcul est automatiquement déterminée par ProSimPlus. Un courant coupé est identifié : le courant « COOL-IN » entre l'échangeur « FAN » et la pompe. L'initialisation suivante est utilisée :

Courant	Débit massique partiel	Température	Pression
COOL-IN	Eau : 345,37 kg/h	35 °C	2,3 bar

1.7. « Trucs et astuces »

1.7.1. Changement du visuel des modules

Un visuel par défaut est proposé pour chacun des modules disponibles dans la bibliothèque d'opérations unitaires. Il est possible de changer ce visuel et d'importer une image depuis une bibliothèque ou de fournir une image personnalisée. Afin d'importer un visuel depuis la bibliothèque, il suffit de faire un clic droit sur le module puis cliquer sur « sélectionner un nouveau visuel depuis la bibliothèque », comme illustré ci-dessous pour l'échangeur « IC-R2 » de type « tubes et calandre » :



1.7.2. Affichage de « tags » sur le flowsheet

Des « tags » sont ajoutés sur le flowsheet afin d'afficher les résultats suivants :

- Les débits massiques ;
- Les puissances nécessaires au niveau des pompes ;
- Les quantités de chaleur des échangeurs ;
- Les résultats clés.

Par exemple, la quantité de chaleur nécessaire au niveau du ballon de séparation « TRAP-O2 » est affichée en configurant le tag de la façon suivante :

The image shows a software interface for configuring a tag on a flowsheet. On the left, a portion of the flowsheet is visible, showing a separation vessel labeled 'TRAP-O2'. A tag '123' is placed on the vessel, and a red arrow points from this tag to the 'Tag' configuration dialog box on the right. The dialog box has a 'Valeur' tab and 'Mode standard' selected. Under 'Type de source de données', 'Opération unitaire' is chosen. In the 'Source' list, 'TRAP-O2' is selected. The 'Paramètre ou fonction' list on the right has 'HeatDuty' highlighted. The 'Formule' field contains 'HeatDuty'. The 'Aperçu' field shows '-36 W'. The dialog box also includes fields for 'Texte de début', 'Texte de fin', and 'Format pour valeurs numériques'.

2. RESULTATS

2.1. Productions d'hydrogène et d'oxygène

	A l'anode	A la cathode	TOTAL
Quantité d'hydrogène produit	0,02 Nm ³ /h	1,97 Nm ³ /h	1,99 Nm ³ /h
Quantité d'oxygène produit	0,99 Nm ³ /h	0 Nm ³ /h	0,99 Nm ³ /h

La composition molaire des produits finaux est donnée ci-dessous. L'hydrogène est produit avec une pureté de **96,8%**.

	Flux « H2-OUT »	Flux « O2-OUT »
Eau	3,2%	3,2%
Hydrogène	96,8%	1,5%
Oxygène	0%	95,3%

2.2. Caractéristiques de l'électrolyseur

Pour les conditions opératoires simulées, l'efficacité de Faraday obtenue est de **94,7%**. Les caractéristiques électriques sont présentées ci-dessous :

	Cellule	Module
Intensité électrique	417 A	417 A
Densité de courant	4175 A/m ²	4175 A/m ²
Tension	2 V	24 V

La tension de décomposition réversible pour une cellule, correspondant à la tension minimale nécessaire pour que la réaction d'électrolyse ait lieu, est de 1,2 V.

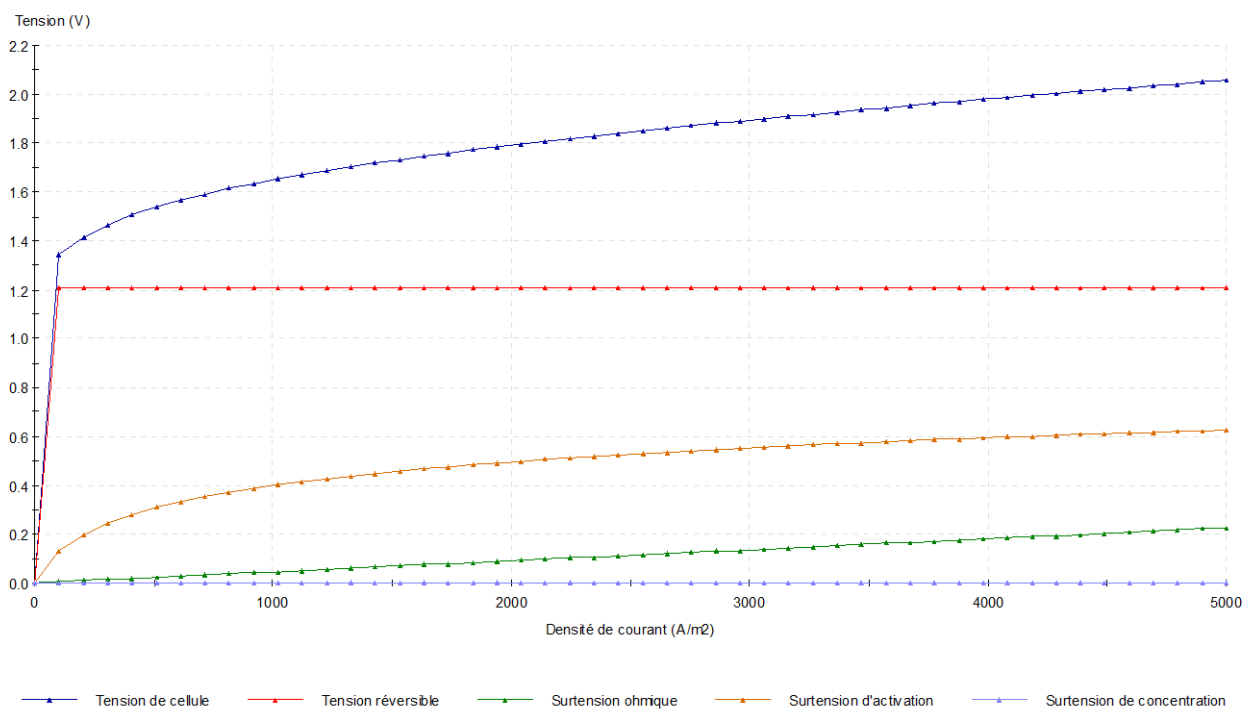
L'enthalpie de réaction, dans ces conditions opératoires, est de 282 kJ/mol. La réaction étant endothermique, il est nécessaire d'appliquer une tension de cellule supérieure à la tension de décomposition réversible afin de compenser la chaleur de réaction et maintenir l'électrolyseur à une température constante. Cela correspond à la tension thermo-neutre d'une cellule dont la valeur est de 1,46 V.

La tension de cellule appliquée en réalité est plus élevée, et vaut 2 V. Cette valeur a été calculée à partir de la somme des contributions ci-dessous ($V_{cell} = V_{rev} + V_{ohm} + V_{act} + V_{con}$) :

Tension réversible (V_{rev})	1,2 V
Surtension ohmique (V_{ohm})	0,2 V
Surtension d'activation (V_{act})	0.6 V
Surtension de concentration (V_{con})	0 V
Tension de cellule (V_{cell})	2,0 V

Il est possible d'accéder aux « courbes caractéristiques » de l'électrolyseur (correspondant à l'évolution des différents termes de tension en fonction de la densité de courant) depuis l'onglet « Profils » :

Courbes caractéristiques de l'électrolyseur



Evolution des valeurs de tension en fonction de la densité de courant

2.3. Bilan d'énergie sur l'électrolyseur

L'énergie totale nécessaire, correspondant à la somme de la chaleur de réaction et de l'énergie thermique (permettant un fonctionnement isotherme de l'électrolyseur), est égale à 7,19 kW.

Chaleur de réaction	6,94 kW
Energie thermique	0,25 kW
Energie totale nécessaire	7,19 kW

Dans la mesure où la tension de cellule appliquée est supérieure à la tension thermo-neutre, il est nécessaire de refroidir l'électrolyseur afin de le maintenir à une température constante. Le bilan d'énergie global ci-dessous permet de calculer la quantité de chaleur à extraire :

$$\text{Quantité de chaleur à extraire} = \text{Puissance électrique} - \text{Energie totale nécessaire} - \text{Pertes thermiques}$$

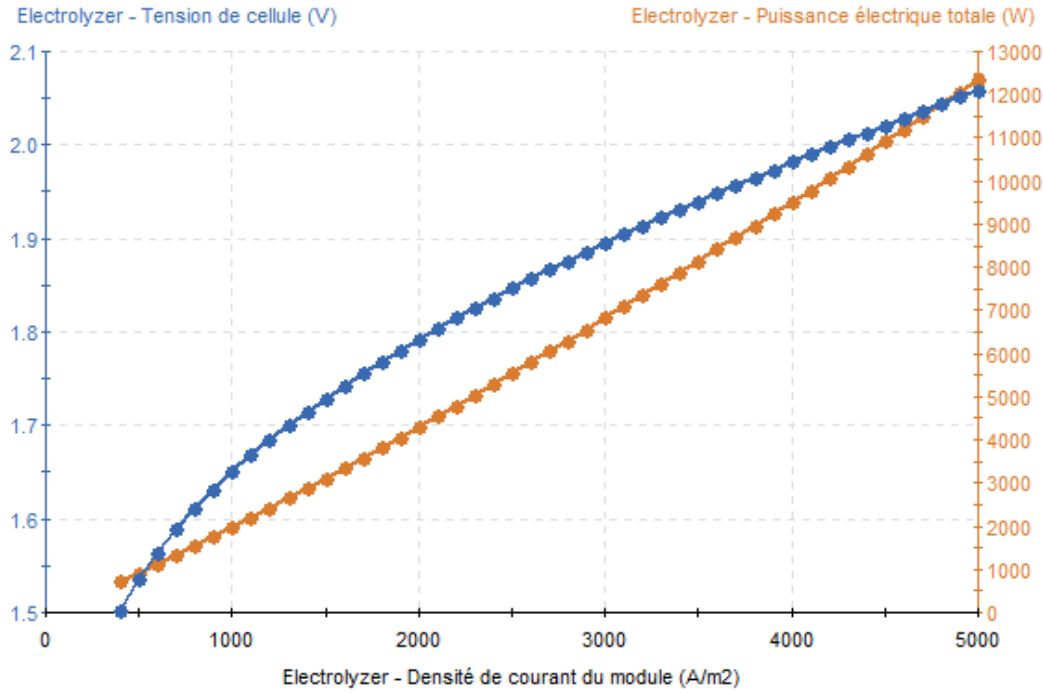
Energie totale nécessaire	7,19 kW
Puissance électrique	10 kW
Pertes thermiques	0,27 kW
Quantité de chaleur à extraire	2,56 kW

Il est nécessaire de refroidir l'électrolyseur et d'extraire une quantité de chaleur totale de 2,56 kW, soit 1,28 kW par électrode.

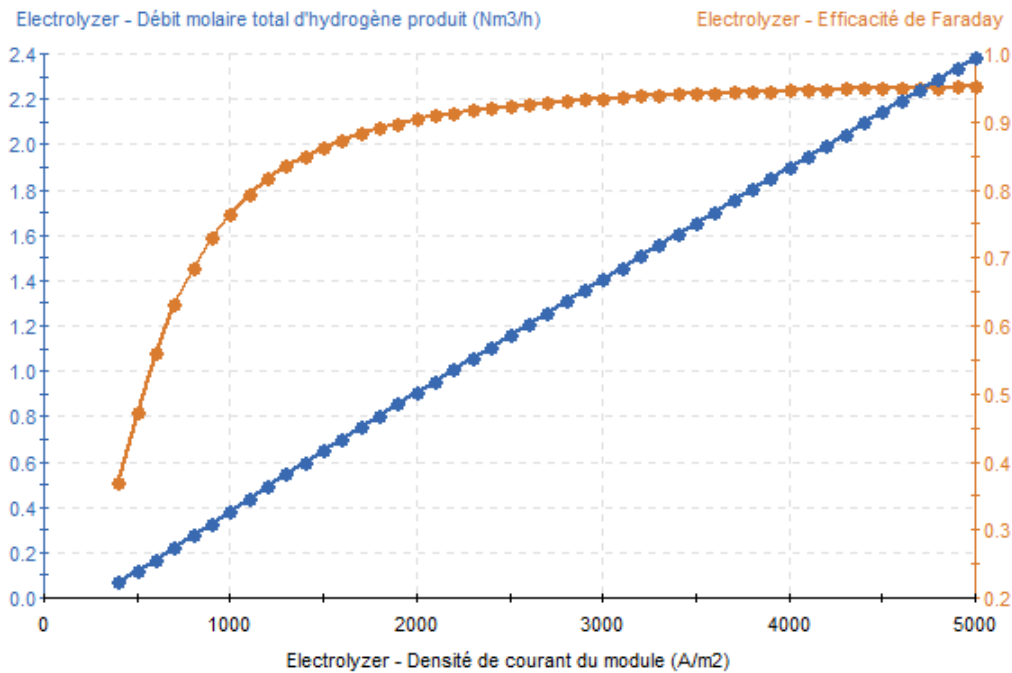
2.4. Etude de sensibilité

Une étude de sensibilité est réalisée en faisant varier la densité de courant entre 400 et 5000 A/m². Il est à noter que pour ce faire, il convient de changer la définition du courant électrique dans l'onglet « Général » et de sélectionner « Densité de courant ». La valeur minimale de la densité de courant a été sélectionnée afin de s'assurer que l'électrolyseur fonctionnait au-dessus de la tension thermo-neutre. Les résultats sont présentés ci-dessous :

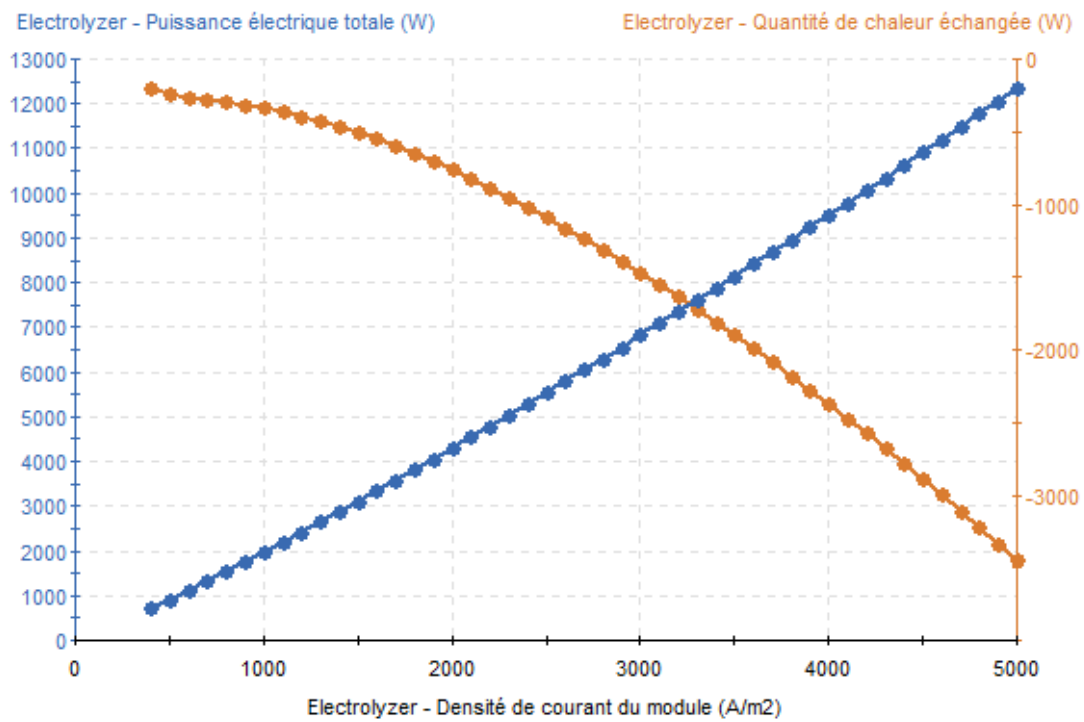
- ✓ Tension de cellule et puissance électrique totale en fonction de la densité de courant :



- ✓ Débit molaire total d'hydrogène produit et efficacité de Faraday en fonction de la densité de courant :



✓ Puissance électrique totale et quantité de chaleur échangée en fonction de la densité de courant :



3. BIBLIOGRAPHIE

- [AFH17] AFHYPAC, « Production de l'hydrogène par hydrolyse de l'eau », Mémento de l'hydrogène, fiche 3.2.1, 2017.
- [CEA12] CEA, « Les technologies de l'hydrogène au CEA », Dossier de presse, 2012.
- [DAM92] Damien A., « Hydrogène par électrolyse de l'eau », Techniques de l'ingénieur, J6 366, 1992.
- [ROW22] ROWLEY R.L., WILDING W.V., OSCARSON J.L., GILES N.F., "DIPPR® Data Compilation of Pure Chemical Properties", Design Institute for Physical Properties, AIChE, New York, NY (2022).
- [SAN18] Sanchez M., *et al.*, "Semi-empirical model and experimental validation for the performance evaluation of a 15kW alkaline water electrolyzer", International Journal of Hydrogen Energy, 2018.