



**COmité de DEveloppement du
GEnie des Procédés en Rhône-Alpes Auvergne**
Siège : Institut Pascal, Axe Gepeb Batiment Polytech
2 avenue Blaise Pascal, 63170 Aubière
Tél : 33 (0)4 73 40 53 18
Fax : 33 (0)4 73 40 18 29
E-mail : asso.codegepra@sigma-clermont.fr

Association régie par la loi de 1901



Avant-Propos / Remerciements

Chers adhérents, chers participants.

Les années se suivent et malheureusement se ressemblent pour notre journée scientifique avec pour la deuxième année consécutive des effectifs en deçà de la cinquantaine de participants sur un modèle simple et humain qui peine soit à se renouveler soit à trouver sa place à l'heure de la multiplication des congrès vers des destinations plus exotiques que les métropoles de la Région Aura. Bien que petite par la taille de l'assemblée, cette édition 2023 nous autorisera des échanges scientifiques informels toujours aussi intéressants avec la jeune garde du génie des procédés.

Comme à notre habitude, nous avons convié des acteurs locaux afin d'assurer des conférences plénières. Ainsi elles aborderont des thèmes soit d'ouverture avec la société RB Technologies qui abordera la thématique de la découverte soit en lien avec les laboratoire du site stéphanois sur les capteurs gaz.

Elément traditionnel de notre association et de sa journée scientifique, le prix de thèse 2023 (pour une thèse soutenue en 2022) sera remis à une jeune et brillante chercheuse Julie Figueras pour son travail, effectué au laboratoire DEEP et intitulé « Biométhanation du syngas, étude cinétique et mise en œuvre à l'échelle pilote ».

Je tiens à remercier l'équipe de l'Ecole des Mines de Saint Etienne, en particulier Eric Serris, pour leur organisation de la journée scientifique. Merci aussi à tous pour votre participation active à cette journée et pour votre contribution à la vie de notre association.

Fabrice GROS
Président du CODEGEPR

Table des matières

Avant-Propos / Remerciements	1
Programme prévisionnel	3
Conférences plénières	4
La découverte a créé le produit.	4
Utilisation des capteurs de gaz pour le génie des procédés	5
Prix de thèse CODEGEPRA 2023	6
Biométhanation du syngas, étude cinétique et mise en œuvre à l'échelle pilote	6
Communications des chercheurs non permanents	7
P1 - Contrôle des propriétés de supports catalytiques aluminiques via le malaxage de pâtes de boehmite	8
P2 - Mise à l'échelle de bioréacteurs structurés avec enzymes immobilisées en parois	9
P3 - Captage du CO ₂ par un procédé de carbonatation des gravats de béton.....	10
P4 - Centrifugal creaming study of Oil-in-Water emulsions	11
P5 - Intensification du procédé de synthèse de méthanol à partir de CO ₂ /H ₂ par couplage réaction-sorption de l'eau.....	12
P6 - Développement et caractérisation des formulations sèches de probiotiques	13
P7 - Transportability of a hydrate slurry in the presence of wax	14
P8 - Dénitrification des eaux souterraines saumâtres par le processus de la réduction électrochimique et l'électrocoagulation.....	15
P9 - New insights on the use of sewage sludge ashes as supplementary cementitious materials	16
P10 - Mesure des interactions grain/grain par Atomic Force Microscopy : application à la compréhension du vieillissement des poudres métalliques	17
P11 - Synthèse et formulation d'encres d'or pour l'impression jet d'encre d'électrodes de capteurs de gaz	18
P12 - The introduction of supports to augment ex-situ biomethanation in the implementation of a novel reactor	19
P13 - Numerical study of a hydrogen dilution effect on the performance of PEMFC fuel cell	20

Programme prévisionnel

9h20 : Accueil à l'EMSE

9h30 : 1^{ère} conférence plénière animée par Phillippe Helle et Mohamad Hijazi de RB

Technologies sur le thème : ***la découverte a créé le produit.***

10h00 : Communications orales des non permanents (1^{ère} session)

11h00 - 11h15 : Pause-café-poster

11h15 : Communications orales des non permanents (2^e session)

12h30 : Buffet et séance posters

14h00 : 2^e conférence plénière animée par Rouba Alrammouz et Riadh Lakhmi (LGF) sur

l'utilisation des capteurs de gaz pour le génie des procédés

14h30 : Remise du prix de thèse 2023 à Julie Figueras du DEEP pour son travail sur la

biométhanation du syngas, étude cinétique et mise en œuvre à l'échelle pilote.

15h00 – 15h30 : Pause-café-poster

15h30 : Assemblée Générale du CODEGEPRA

16h00 : Remise des prix poster/communication orale

16h15 : Fin de la journée

Utilisation des capteurs de gaz pour le génie des procédés

ALRAMMOUZ Rouba et LAKHMI Riadh, LGF

Le développement des énergies vertes induit une problématique liée à l'intermittence de ces énergies. Ceci nous amène à réfléchir à des procédés permettant de stocker l'énergie électrique excédentaire produite dans les moments de faible consommation des foyers sous une forme chimique (H_2 ou CH_4). La caractérisation de l'état d'un système dans un procédé (taux de conversion, contrôle de pureté de certains constituants) ainsi que la sécurisation de ce même procédé peuvent se faire à travers la mise en place d'une plateforme multicapteurs. En effet, en raison de la non-sélectivité des capteurs, une matrice multicapteurs est nécessaire pour la caractérisation de mélanges gazeux et a été construite dans ce travail sur la base de capteurs commerciaux ayant des principes de transduction très différents et, par conséquent, fournissant des informations plus riches. Pour traiter les données fournies par la matrice de capteurs et extraire la composition du mélange gazeux (nature et concentration), des méthodes de régression linéaire (Multi Régression linéaire multiple - moindres carrés ordinaires "MLR-OLS" et Régression Multi Linéaire - moindres carrés partiels "MLR-PLS") et non linéaires (réseaux de neurones artificiels "ANN") ont été construits. Dès la phase d'entraînement, le modèle MLR-OLS n'a pas donné satisfaction et n'a donc été considéré pour la phase de prédiction au cours de laquelle les performances des modèles MLR-PLS et ANN ont ensuite été évaluées. De bonnes capacités de prédictions de concentrations ont été obtenues dans les deux cas pour tous les analytes testés. Cependant, dans le cas du méthane, de meilleures performances de prédiction ont été obtenues avec la méthode ANN, ce qui est cohérent avec le fait que la réponse du capteur MOX au CH_4 est logarithmique alors que seules des réponses linéaires ont été obtenues pour les autres analytes.

Prix de thèse CODEGEPRA 2023

Biométhanation du syngas, étude cinétique et mise en œuvre à l'échelle pilote

FIGUERAS Julie

Docteur de l'INSA Lyon

Dans une logique d'économie circulaire, la valorisation énergétique de déchets hétérogènes et ligneux sous la forme de syngas grâce à la pyro-gazéification est une stratégie prometteuse à l'échelle territoriale. Le syngas ainsi obtenu peut ensuite être valorisé en méthane par méthanation biologique, afin de tirer parti des importantes infrastructures de transport et de stockage du gaz naturel existant en France et en Europe.

Cependant, la biométhanation du syngas est un procédé limité par la vitesse de transfert du substrat gazeux vers les micro-organismes contenus dans la phase liquide et servant de catalyseurs aux réactions de méthanation. Dans ce contexte, l'usage d'un réacteur pressurisé permet d'augmenter le transfert gaz-liquide et donc les performances du procédé (en productivité de méthane et taux de conversion du syngas), tout en permettant des installations compactes à faible empreinte au sol. Cependant, avant cette thèse, la biométhanation du syngas n'avait jamais été implémentée en pression.

Ce travail de thèse a donc proposé de répondre à une problématique académique ancrée dans le génie des procédés, à savoir le couplage entre la vitesse de transfert du substrat gazeux au milieu liquide et les cinétiques biologiques rapides. Ce questionnement a été abordé expérimentalement à travers la mise en œuvre d'un réacteur de laboratoire de 12 L fonctionnant en continu à 4 bars et à 55°C. De plus, les résultats expérimentaux ont été couplés à la modélisation du transfert de matière gaz/liquide dans le film liquide. Les travaux ont permis l'étude des cinétiques du procédé ainsi que la mise en évidence d'une accélération du transfert gaz-liquide en présence de la réaction biologique par rapport aux mesures effectuées en conditions abiotiques non réactives. D'autre part, la thèse a répondu à un enjeu opérationnel fort, celui de la faisabilité et la viabilité du procédé en continu et sous pression. Pour y répondre, des performances record ont été obtenues, avec une productivité de $1 \text{ NL}_{\text{CH}_4}/\text{L}_{\text{réacteur}}/\text{h}$ (près du triple par rapport aux performances publiées jusqu'alors) associée à des taux de conversion supérieurs à 80 %. Ceci a validé le fonctionnement en pression pour l'intensification du procédé, permettant ainsi à l'issue de la thèse à l'entreprise ENOSIS d'effectuer un changement d'échelle avec la mise en place d'un réacteur pré-industriel fonctionnant à 10 bars et sur syngas réel.

Ce travail de thèse a été valorisé sous la forme de quatre publications scientifiques dans des revues internationales, ainsi qu'une valorisation industrielle avec le dépôt d'une enveloppe Soleau et potentiellement un brevet dans les années à venir. Les travaux ont aussi été présentés lors de nombreuses conférences et journées scientifiques, dont deux journées CODEGEPRA, et récompensés deux fois par des prix de présentation.

P1 - Contrôle des propriétés de supports catalytiques aluminiques via le malaxage de pâtes de boehmite

AUXOIS Mathilde^{1,2*}, MINIRE Marine¹, BERTRAND-DRIRA Chloé¹, VERSTRATE Jan¹, DIVOUX Thibaut²,
MANNEVILLE Sébastien²

¹IFP Energies Nouvelles, Rond-point de l'échangeur de Solaize, BP 3, F-69360 Solaize, France

²ENSL, CNRS, Laboratoire de Physique, F-69342 Lyon, France

Le contrôle des propriétés mécaniques et texturales des supports de catalyseurs hétérogènes est essentiel pour la conception de matériaux catalytiques innovants et efficaces. En particulier, la microstructure poreuse du support affecte fortement le transport de masse et la résistance mécanique¹. Industriellement, la fabrication de supports en alumine est mise en œuvre par un procédé de malaxage-extrusion, qui vise à passer d'une poudre de précurseur aluminique (la boehmite) à des objets micrométriques (taille finale du support). Ce procédé permet également d'optimiser les propriétés mécaniques et texturales du support en jouant sur les conditions opératoires de chacune des opérations unitaires^{2,3}.

Notre étude expérimentale se concentre sur l'opération de malaxage et vise à quantifier les effets de cette étape de fabrication sur les propriétés de la pâte de boehmite.

Pour cela, plusieurs expériences de malaxage ont été réalisées sur un malaxeur pilote lors de la préparation de pâtes de boehmite à 40%. Les effets de la durée de malaxage (de 3 minutes à 4 heures), de la vitesse de rotation des bras (de 10 à 100 tr/min) et de la composition de la pâte (pH de 5 à 9) ont été caractérisés sur les propriétés texturales et mécaniques des pâtes. En particulier, la distribution de taille des pores, la surface spécifique et le volume poreux ont été analysés par physisorption d'azote et porosimétrie au mercure sur des échantillons secs, tandis que les propriétés mécaniques ont été caractérisées *in-situ* dans le malaxeur par des mesures de couple.

Nos résultats montrent que la composition de la pâte contrôle fortement les propriétés des échantillons. En effet, l'augmentation du pH de la pâte entraîne une augmentation du couple mesuré dans le malaxeur ainsi que de la porosité de la pâte séchée (Fig. 1). De plus, nous rapportons que la déformation cumulée, calculée comme le produit de la vitesse de rotation et du temps de malaxage, régit l'évolution temporelle du couple et des propriétés texturales. Enfin, nous montrons que la déformation cumulée multipliée par le pH de la pâte est un paramètre pertinent pour rationaliser les propriétés texturales mesurées sur une large gamme de pH, de durée de malaxage et de vitesse de rotation.

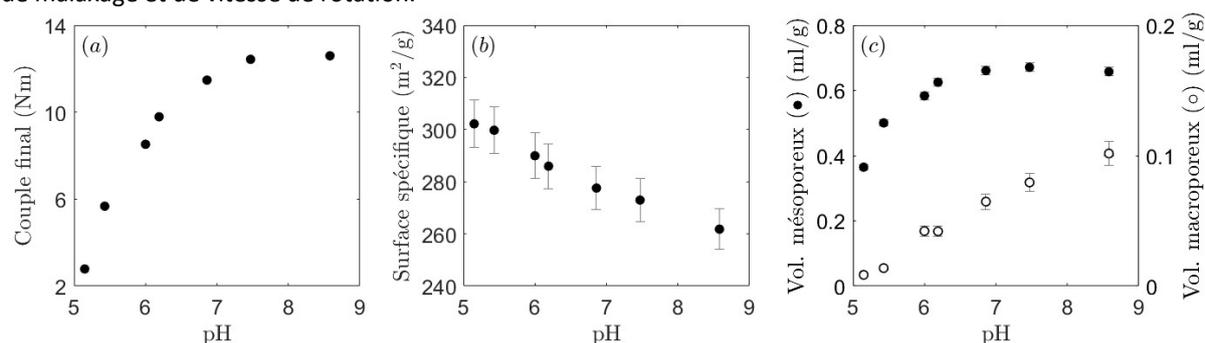


Figure 1. Influence du pH de la pâte sur (a) le couple mesuré *in-situ* après 2h40 de malaxage à 50 rpm, (b) la surface spécifique (physisorption d'azote sur pâtes séchées) et (c) les volumes poreux (intrusion de mercure sur pâtes séchées).

Références

- [1] L. Lloyd, *Fundamental and Applied Catalysis*, 2011, p. 506
- [2] J. Landers et al., *Part. Part. Syst. Charact.*, 2010, 27, 42–47
- [3] F. Karouia et al., *P. Alphonse, Powder Technology*, 2013, 237, 602–609.

P2 - Mise à l'échelle de bioréacteurs structurés avec enzymes immobilisées en parois

MICHAUD Maïté^a, VERGNE-VAXELAIRE Carine^c, DE BERARDINIS Véronique^c, ZAPARUCHA Anne^c, COSTE Pierre^a,
NONGLATON Guillaume^b et ANXIONNAZ-MINVIELLE Zoé^a

^aUniv. Grenoble Alpes, CEA, LITEN, DTCH, F-38000, Grenoble, France

^bUniv. Grenoble Alpes, CEA, LETI, DTBS, F-38000, Grenoble, France

^cGénomique Métabolique, Genoscope, Institut François Jacob, CEA, CNRS, Univ. Evry, Univ. Paris-Saclay, 91057 Evry, France

Face aux enjeux d'efficacité énergétique et d'éco-compatibilité des procédés, les synthèses biocatalytiques ont gagné en popularité au fil des années. Parmi les avantages cités, sont régulièrement mis en avant : (i) des conditions opératoires douces, (ii) une sélectivité élevée et (iii) une réduction de la consommation en solvants pétrochimiques [1]. Cependant le coût des enzymes et leur instabilité sont un frein important à leur déploiement à l'échelle industrielle. De ce fait, des stratégies d'immobilisation sont activement étudiées pour également remplacer les traditionnels bioréacteurs batch par des systèmes continus. Pour ceux avec enzymes immobilisées en parois, les études sont focalisées sur des appareils microfluidiques, d'une dimension caractéristique inférieure à 500 μm , afin (i) d'intensifier les conditions de mélange et (ii) d'augmenter le ratio surface-sur-volume « S/V » [2]. Le scale-up nécessite à la fois une multiplication des unités, et une augmentation de la taille caractéristique du réacteur [3]. Or cette deuxième option est bien souvent exclue en biocatalyse. Pour l'analyser, le choix s'est porté sur l'immobilisation covalente de la nitrilase en milli-réacteurs structurés (hauteur de chambre de 1 mm) pour la synthèse de la vitamine B3 à partir du 3-cyanopyridine. Pour contrer la baisse du ratio S/V, des billes de polyméthacrylate de méthyle (PMMA), nanoporeuses, ont été fixées en parois. L'expérience a pu être maintenue sur 10 jours consécutifs avec un turnover final à 128 $\text{g}_{\text{produit}}/\text{g}_{\text{enz}}$. Cette même expérience a servi de référence pour valider le modèle CFD. Les résultats simulés sur la variation de la hauteur de chambre ont permis de discerner deux zones caractéristiques (Figure 1). La zone n°1, l'échelle micrométrique, favorisant le coût lié à l'achat des enzymes, au détriment du coût des appareillages dont la multiplication sera nécessaire pour augmenter la productivité. La zone n°2, l'échelle millimétrique, diminuant l'investissement lié aux appareillages de par une plus grande productivité. A titre comparatif, le plus petit réacteur (0,25 mm) requière 5 fois moins d'enzymes que le plus gros (4 mm), mais 3 microréacteurs en parallèle seront nécessaires pour obtenir une productivité équivalente. Le choix de l'échelle repose donc sur un compromis coût enzyme vs. coût appareils.

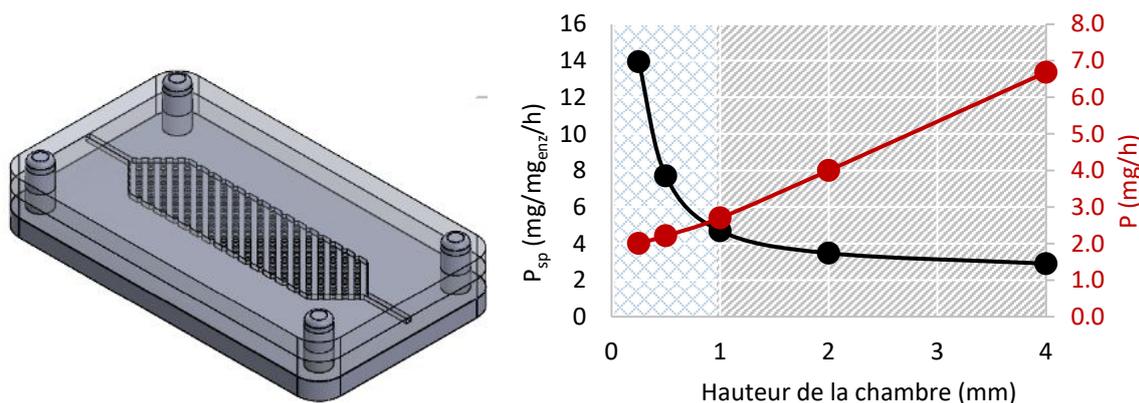


Figure 1: (Gauche) Schéma CAO du réacteur à pilier – (Droite) Productivité « P » (en rouge) et productivité spécifique « P_{sp} » (en noir) simulées par CFD, pour un taux de conversion en sortie à 90 ± 1 % ; Seule la hauteur de chambre est modifiée.

References

- [1] G. Rossino et al., 2022, Chirality, 34 (11), 1403-1418.
 [2] L. Tamborini et al., 2018, Trends Biotechnol., 36 (1), 73-88.
 [3] S. G. Newman et K. F. Jensen, 2013, Green Chem., 15 (6), 1456-1472.

P3 - Captage du CO₂ par un procédé de carbonatation des gravats de béton

TOLLET Malo^{a,b}, BOUROUINA Amine^b, GAGNIERE Émilie^b, LEBAZ Noureddine^b, CHABANON Élodie^b et EDOUARD David^{a*}

^aCP2M, UMR 5128, 43 Boulevard du 11 Novembre 1918, 69100 Villeurbanne

^bLAGEPP, UMR 5007, 43 Boulevard du 11 Novembre 1918, 69100 Villeurbanne

Le béton est actuellement le deuxième produit le plus consommé après l'eau (Petroche et Ramirez). Cependant, sa production est responsable de 8% des émissions de gaz à effet de serre, et de grandes quantités de déchets issus de la démolition sont générées chaque année (3 milliard de tonnes dans le monde en 2012 (Ho et al., 2021)). L'objectif de ce projet est de recycler ces gravats en dissolvant le calcium qu'ils contiennent, afin qu'il réagisse avec le CO₂ émis lors de la production du ciment. Le carbonate de calcium (CaCO₃) formé est l'ingrédient principal de la fabrication du ciment et pourrait être utilisé pour sa production.

Expérimentations

Les trois opérations unitaires représentées Figure 1 sont dans un premier temps découplées et étudiées séparément, en commençant par la dissolution des gravats de béton. Elle a été menée en réacteur agité fermé, en présence ou non d'acide chlorhydrique. L'influence de trois paramètres a été étudiée: la taille des gravats qui influence leur composition (Florea et Brouwers, 2013), le pH initial de la solution et la masse de solide dans le réacteur. Des études dans un réacteur continu sont également en cours. La dissolution du CO₂ en phase liquide est assurée dans un réacteur à lit élastique (Michaud et al., 2023) en cours d'étude. L'opération de précipitation du CaCO₃ sera étudiée prochainement.

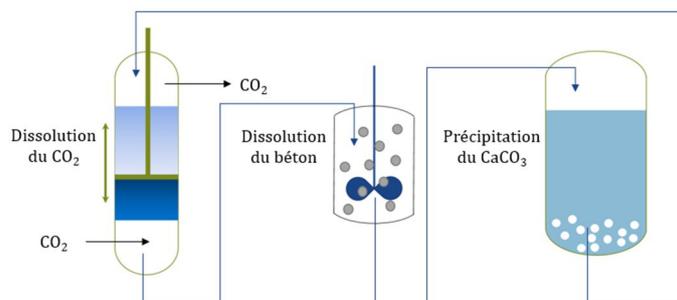


Figure 2. Enchaînement possible des trois opérations unitaires pour la carbonatation des gravats de béton

Modélisation

Le béton est un matériau complexe contenant plusieurs phases minérales. Lors de la dissolution des gravats, la première source d'ions calcium est la portlandite (Ca(OH)₂). La dissolution des autres espèces est un processus plus lent (Ho et al., 2021). Un modèle simplifié représentant la dissolution de particules de Ca(OH)₂ en réacteur ouvert, alimenté par une solution aqueuse à pH variable, a été développé au laboratoire. Il est basé sur les travaux de Bernard et al.. Les évolutions de la taille des particules et de la concentration des espèces sont simulées et discutées. La précipitation du CaCO₃ est également prise en compte à travers un bilan de population.

Références

- Bernard, L., Freche, M., Lacout J.L., Biscans, B., 2000, Chemical Engineering Science, 55, 5683-5692
 Florea, M.V.A. et Brouwers, H.J.H, 2013, Cement and Concrete Research, 52, 11-21
 Ho, H-J., Iizuka, A., Shibata, E., Tomita, H., Takano, K., Endo, T., 2021, Journal of Cleaner Production 312 127832
 Michaud, M., Bornette, F., Rautu, E., More, S.H., Mendez, M.L.M., Jierry, L., Édouard D., 2023, Chemical Engineering Journal, 452, 138604
 Petroche, D.M., Ramirez, A.D., 2022, Buildings, 12, 311

*Auteur/s à qui la correspondance devra être adressée : david.edouard@univ-lyon1.fr

P4 - Centrifugal creaming study of Oil-in-Water emulsions

TOUMA Kristy, LEBAZ Nouredine and SHEIBAT-OTHMAN Nida

University of Lyon, Claude Bernard Lyon 1, CNRS, LAGEPP UMR 5007, F-69100, Villeurbanne, France.

In this study, we investigate the creaming phenomenon in concentrated oil in water emulsions (dispersed phase fractions up to 40 %). Previous creaming studies were usually restricted to dilute emulsions as creaming due to gravity alone was slow for concentrated emulsions¹. In this project, creaming was accelerated by centrifugal forces using the apparatus LUMisizer which measures the transmission of light over the sample height with time². This enabled a relatively fast study of the creaming of highly dispersed phase fractions of emulsions. We discuss the influence of preparation parameters (dispersed phase viscosity, droplet diameter, initial concentration, relative centrifugal acceleration) on the creaming phenomenon. Droplet coalescence was found to be negligible during the experiments. Among the obtained results, it was observed that increasing the dispersed phase fraction, decreasing the droplet size, or increasing the continuous phase viscosity all contribute to better stability against creaming (Figure 1). The concentration in the packed region was higher for higher accelerations. A limit of the device was however observed due to a fast decrease of transmission when increasing the hold-up. A mathematical model was proposed to describe and predict the creaming behaviour under centrifugation forces following the convection-diffusion equation (Equation 1), combined with Stokes' law equation to describe the terminal velocity determination. The model allows the prediction of the concentration profiles over time and along the sample height. By experimental fit, we identified the diffusion coefficient D and the parameter n that corrects for the hindering effect of the concentration on the droplet creaming velocity.

$$\frac{\partial \phi_i}{\partial t} + \frac{\partial \left(u_{ti} \left(1 - \frac{\phi_i}{\phi_{\max}} \right)^n \phi_i \right)}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial z} \left(D \frac{\partial \phi_i}{\partial z} \right) \quad (1)$$

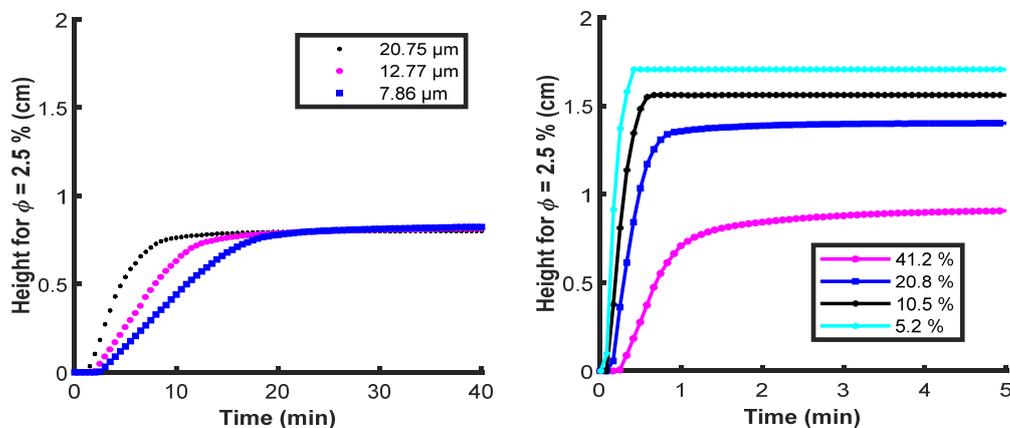


Figure 1. The height reached for a fixed dispersed fraction of 2.5 % as a function of time for different (a) mean droplet diameters and (b) initial dispersed phase fractions.

Références

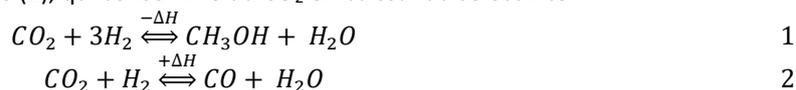
- [1] Deb, T.K. *et al.* (2022) 'Monitoring and Modeling of Creaming in Oil-in-Water Emulsions', *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 61(13), pp. 4638–4647.
- [2] Antonopoulou, E. *et al.* (2018) 'Numerical and experimental analysis of the sedimentation of spherical colloidal suspensions under centrifugal force', *Physics of Fluids*, 30(3), p. 030702.

P5 - Intensification du procédé de synthèse de méthanol à partir de CO₂/H₂ par couplage réaction-sorption de l'eau

ANTONUCCIO Enrico*, EDOUARD David, FONGARLAND Pascal

CP2M, UMR 5128 CNRS – UCBL – CPE Lyon, 43 bd 11 Novembre, 69616 Villeurbanne

Le méthanol est généralement obtenu à partir de la conversion de gaz de synthèse, mélange de CO₂ (et/ou CO) et H₂ dans un réacteur à lit fixe à pressions et température élevées (40-80 bar et 200-300 °C). Le rendement de ce procédé est limité d'un côté par l'équilibre thermodynamique de la réaction exothermique (1) et de l'autre côté par une réaction parasite, le RWGS (2), qui consomme du CO₂ en baissant sa sélectivité.



Une stratégie pour intensifier ce procédé réside dans l'emploi d'un adsorbant (zéolites ou MOF) qui puisse sélectivement adsorber l'eau, permettant de déplacer favorablement l'équilibre et d'obtenir un rendement plus élevé en méthanol. Techniquement, cela est possible grâce à des cycles réaction/adsorption et régénération/désorption. Cette technologie est connue dans la littérature comme TSA ('Temperature Swing Adsorption') et le procédé comme SERP ('Sorption Enhanced Reaction Process')¹.

L'objectif de notre projet est de mieux comprendre l'interaction entre les différentes contributions (transfert matière, chaleur, réaction catalytique et sorption) afin de pouvoir optimiser le procédé (temps et nature des cycles, intégration des opérations, scale-up...) par l'expérience et la simulation. Un premier travail a consisté à simuler ce procédé dynamique couplé à partir de l'état de l'art². Par exemple, les figures 1 et 2 montrent les résultats de simulation en lit fixe de 3 cycles successifs de production et régénération du point de vue du courant des produits (fig. 1) et de l'adsorbant (fig. 2). Le dépassement de la concentration de méthanol par rapport à la concentration à l'équilibre (fig. 1) démontre l'efficacité de l'adsorption du sous-produit (fig. 2).

Des indicateurs plus fins de performances que le seul rendement en méthanol ont été identifiés. Le modèle et l'interprétation des résultats de simulations seront objet de la présentation.

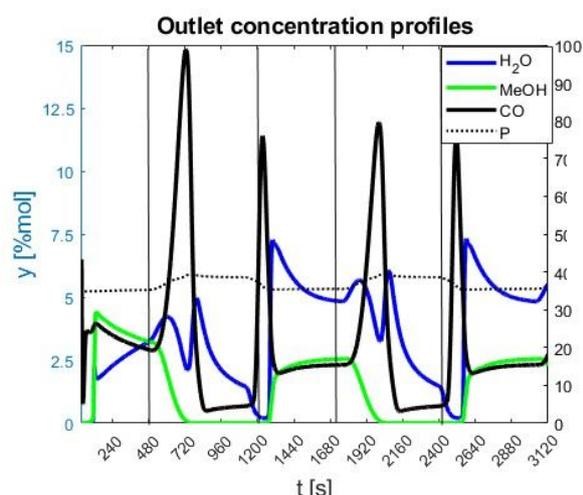


Figure 3: Courbe de percée des produits de réaction

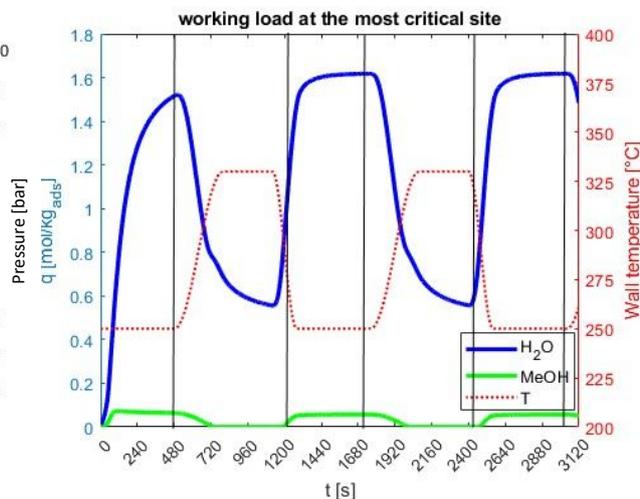


Figure 4: Profil de saturation de l'adsorbant

Références

- [1] Terreni, J.; Trottmann, M.; Franken, T.; Heel, A.; Borgschulte, A. Sorption-Enhanced Methanol Synthesis. *Energy Technology* 2019, 7 (4). <https://doi.org/10.1002/ente.201801093>.
- [2] Van Kampen, J.; Boon, J.; Vente, J.; Van Sint Annaland, M. Sorption Enhanced Dimethyl Ether Synthesis for High Efficiency Carbon Conversion: Modelling and Cycle Design. *Journal of CO₂ Utilization* 2020, 37 (January), 295–308. <https://doi.org/10.1016/j.jcou.2019.12.021>.

*Auteur/s à qui la correspondance devra être adressée : enrico.antonuccio@univ-lyon1.fr

P6 - Développement et caractérisation des formulations sèches de probiotiques

FIROOZ Mohammad Tahir^a, RESENDE DE AZEVEDO Jacqueline^a, SELMI Abdelkader^b, COGNE Claudia^a

^aLAGEPP, Université Claude Bernard Lyon 1, CNRS, UMR 5007

^bBIOFACTORY, 43 boulevard du 11 novembre 1918, F-69100, Villeurbanne, France

Les probiotiques sont des micro-organismes vivants produisant un effet bénéfique pour la santé intestinale lors d'administration en quantité suffisante (FAO/WHO (2002)). Pour garantir cet effet, il est essentiel de maintenir l'activité métabolique et la viabilité des micro-organismes pendant la formulation, le traitement et le stockage. La production de formulations probiotiques sèche offre des avantages (moins de capacité de stockage et de coûts de transport par rapport aux formes liquides) et des avantages stratégiques (meilleure stabilité de la formulation). Les processus de lyophilisation et d'atomisation sont largement utilisés dans l'industrie pour la production de formes sèches de probiotiques (Chandralekha et al., 2017). Cependant, chacun a ses avantages et ses inconvénients. La lyophilisation est la méthode la plus couramment utilisée pour sa capacité à préserver la viabilité des bactéries, mais elle est très longue, énergétiquement coûteuse et nécessite une optimisation significative pour chaque formulation. En ce qui concerne l'atomisation, elle est une alternative en raison de ses coûts d'exploitation plus bas, mais elle entraîne un stress thermique, un faible rendement en poudre et des difficultés de nettoyage de la machine (Verlhac et al., 2019) (Nguyen et al., 2014). La mise en place de stratégies d'optimisation de ces processus constituerait une excellente opportunité pour l'industrie de produire des probiotiques de manière plus responsable.

L'objectif de cette thèse est de développer et de caractériser des formulations sèches contenant des *Saccharomyces cerevisiae* (SC) à l'aide de deux processus (lyophilisation et atomisation) après un prétraitement par ultrasons. La méthodologie de ce travail a été divisée en trois parties : (i) la croissance de la levure, (ii) les études préliminaires des deux processus de séchage et (iii) la caractérisation des poudres.

Pour la croissance de la levure, qui a été mesurée par absorbance, le milieu de culture spécifique de la levure (YPD), riche en dextrose et couramment utilisé en recherche, a été sélectionné. Pour l'étude séchage, des caractérisations thermiques des solutions (SC avec le milieu de culture) ont été réalisées pour mesurer la température de fusion, la température de transition vitreuse (par DSC) et la température de collapse (par cryomicroscopie). Ces données ont contribué à la sélection des paramètres opérationnels pour la lyophilisation. Les essais préliminaires de lyophilisation de SC dans leur milieu de culture ont révélé deux problèmes : des taux de survie faibles (moins de 65 %) et une poudre lyophilisée non uniforme. En ce qui concerne l'atomisation, les résultats ont montré un taux de survie de 46 %, inférieur à celui obtenu par la lyophilisation. Pour les deux procédés, la formulation a été optimisée en ajoutant des polymères de masse différente afin de limiter les contraintes (froid/chaud, humidité, pH...) pendant le séchage. Les premiers résultats ont démontré l'importance d'une formulation optimisée à la fois en lyophilisation et en atomisation pour améliorer les taux de survie.

Références

- Chandralekha et al., (2017). Rôle of carrier Materials in encapsulation of yeast (*Saccharomyces cerevisiae*) by spray drying. *Drying Technology*, 4-5.
- FAO/WHO (2002) Report on Joint FAO/WHO Expert Consultation on evaluation of health and nutritional properties of probiotics in food including powder milk with live lactic acid bacteria. <http://www.fao.org/es/ESN/Probio/probio.htm>.
- Nguyen et al., (2014). Étude comparative expérimentale des opérations d'atomisation. These de l'Université de la Rochelle.
- Verlhac et al., 2019 Étude et optimisation des cycles de lyophilisation d'une souche probiotique modèle. *Drying technology* 4-6

P7 - Transportability of a hydrate slurry in the presence of wax

MENEGHEL LINO Luiz Henrique^a, LAVALLE Gianluca^a, SERRIS Eric^a, HERRI Jean-Michel^a, CAMEIRAO Ana^{a*},
LESAGE Nicolas^b et FIDEL-DUFOUR Annie^b

^aMines Saint-Etienne, 158 cours Fauriel, 42100 Saint-Étienne

^bTotal Energies, Avenue Larribau, 64018 Pau

During offshore oil and gas production from a typical reservoir, it is produced crude oil, natural gas and water. As the mixture flow through the production facilities, it encounters high pressure and low temperature conditions. Some flow assurance issues arise from this operational condition. In this work, the focus is on gas hydrates and wax.

In this work, it is used a flow loop apparatus to study the multiphase flow with the presence of both hydrates and wax. The experiments were carried out at constant pressure (75 bar, pressurized with natural gas) and constant temperature (approximately 4°C). It was evaluated two different flow rates (200 and 400 L/h), two different water cuts (10 and 30 %) and a blank (wax-free) system compared to a wax-containing system (2 wt %). Results at 10 % water cut suggest that the hydrate fraction is significantly lower on the presence of wax, as can be seen in Figure 1, decreasing the plugging tendency of the system. Indeed, the only experiment to plug among the 8 performed at 10 % water cut, was a wax-free experiment at the higher flow rate (400 L/h).

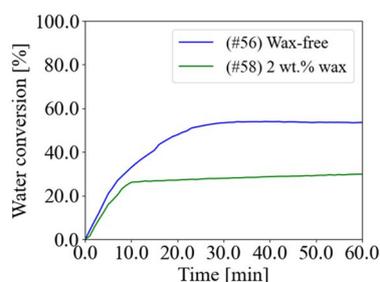


Figure 1. Water conversion over time comparison for experiments at 10 % water cut, 400 L/h with wax (#56) and without wax (#58).

On the other hand, results at 30 % water cut, both the water conversion and the plugging tendency were similar for the wax-free and the wax-containing system, which is probably related to the reduction of the water droplet surface to wax ratio.

As conclusions, the results suggest that the effect of wax, for the concentrations analyzed in the present work, is important only for the lower water cut (10 %). The main effect is the inhibition of gas hydrates, as noted reported in the literature (Zheng et al., 2017, Chen et al., 2018, Zhang et al., 2019, Wang et al., 2020). The mechanism by which wax is inhibiting is still under investigation, however.

Références

- Chen, Y., Shi, B., Liu, Y., Song, S., & Gong, J. (2018). Experimental and theoretical investigation of the interaction between hydrate formation and wax precipitation in water-in-oil emulsions. *Energy & Fuels*, 32(9), 9081-9092.
- Wang, W., Huang, Q., Zheng, H., Wang, Q., Zhang, D., Cheng, X., & Li, R. (2020). Effect of wax on hydrate formation in water-in-oil emulsions. *Journal of Dispersion Science and Technology*, 41(12), 1821-1830.
- Zhang, D., Huang, Q., Zheng, H., Wang, W., Cheng, X., Li, R., & Li, W. (2019). Effect of wax crystals on nucleation during gas hydrate formation. *Energy & Fuels*, 33(6), 5081-5090.
- Zheng, S., Khutphisit, T., & Fogler, H. S. (2017). Entrapment of water droplets in wax deposits from water-in-oil dispersion and its impact on deposit build-up. *Energy & Fuels*, 31(1), 340-350.

* Auteur/s à qui la correspondance devrait être adressée : cameirao@emse.fr

P8 - Dénitrification des eaux souterraines saumâtres par le processus de la réduction électrochimique et l'électrocoagulation

OUTALEB Hamza^{a,b}, AUDONNET Fabrice^{a*}, GOURICH Bouchaib^b et VIAL Christophe^a

^aUniversité Clermont Auvergne, CNRS, Clermont Auvergne INP, Institut Pascal, F-63000 Clermont–Ferrand, France.

^bLaboratoire d'Ingénierie des Procédés et de l'Environnement, École Supérieure de Technologie, Université Hassan II de Casablanca, Maroc.

Notre travail se concentre sur l'étude de la technique de traitement par la réduction électrochimique et l'électrocoagulation des eaux de nappe riches en nitrates, notamment des eaux saumâtres présentant une alcalinité (HCO_3^-) et une dureté (Ca^{2+} , Mg^{2+}) élevées, ainsi qu'une concentration importante en chlorures (Cl^-). Les expériences ont été réalisées dans une cellule électrolytique non divisée d'un volume de 0,25 L (et d'un volume de travail de 0,2 L) en mode batch avec deux électrodes parallèles d'anode (aluminium) et de cathode (aluminium, fer et cuivre) disposées verticalement et ayant des dimensions de 10 cm × 5 cm × 0,1 cm, ainsi qu'un agitateur magnétique IKA C-MAG MS 7. Toutes les expériences ont été réalisées avec une agitation magnétique de 200 tr/min. Les électrodes étaient connectées à une alimentation continue numérique (VOLTcraft DSP-3005V) en mode galvanostatique avec une plage de tension de 0 à 30 V et une plage d'intensité de courant de 0 à 5 A. Pour toutes les expériences, la température ambiante était de $20 \pm 1^\circ\text{C}$. Avant chaque expérience, les électrodes ont été abrasées avec du papier de verre pour éliminer les échelles, trempées dans 1N H_2SO_4 , rincées à l'eau ultrapure ($18,1 \text{ M}\Omega\cdot\text{cm}^{-1}$) pour éliminer les impuretés, puis immergées dans de l'eau traitée pendant 10 minutes avant d'être placées dans la cellule d'électrocoagulation. Une photo de l'installation expérimentale est représentée dans la Figure 1.

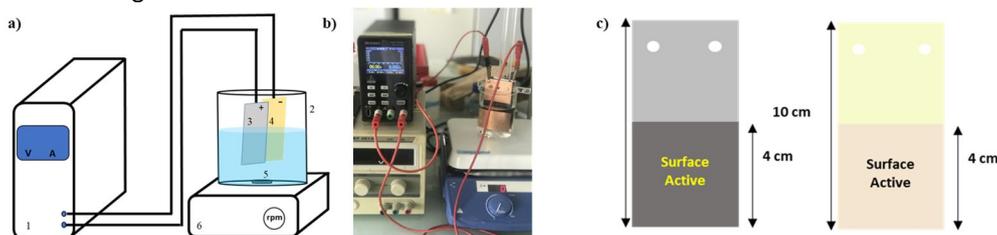


Figure 1. (a) Schéma de la cellule électrochimique utilisée pour l'élimination des nitrates, 1 : Alimentation électrique en courant continu ; 2 : Cellule électrolytique ; 3 : Plaque d'anode ; 4 : Plaque de cathode ; 5 : Barreau magnétique-agitateur ; 6 : Agitateur magnétique. (b) Configuration expérimentale pour l'élimination des nitrates, (c) Schéma de la disposition des électrodes.

Les résultats préliminaires indiquent que le rendement d'élimination dépend de matériaux utilisés comme cathode, la densité de courant appliquée, et les ions chlorures (figures 1-3). Les résultats obtenus sont prometteurs, avec un rendement atteignant 71% sur une période de 180 minutes. L'élimination des nitrates peut s'expliquer par adsorption sur l'hydroxyde métallique formé $\text{Al}(\text{OH})_3$ ou par réduction en nitrite et ammonium, avec une concentration de nitrite augmentant avant de diminuer. Des investigations supplémentaires sont en cours pour optimiser les paramètres opératoires, tenir compte d'une formation importante d'ammonium, et rendre la dénitrification par les procédés électrochimiques compétitive en termes de coût de production.

Références

- F.R. Greer, Infant Methemoglobinemia: The Role of Dietary Nitrate in Food and Water, PEDIATRICS. 116 (2005) 784–786.
 T. Biswas, S.C. Pal, I. Chowdhuri, D. Ruidas, A. Saha, A.R.Md.T. Islam, M. Shit, Effects of elevated arsenic and nitrate concentrations on groundwater resources in deltaic region of Sundarban Ramsar site, Indo-Bangladesh region, Marine Pollution Bulletin. 188 (2023) 114618

* Auteur/s à qui la correspondance devrait être adressée : Fabrice.audonnet@uca.fr

P9 - New insights on the use of sewage sludge ashes as supplementary cementitious materials

D. Shehadeh^{a*}, A. Govin^a, L. Bessette^b, H. Krour^b, G. Ziegler^c, and P. Grosseau^a

^aMines Saint-Etienne, Univ Lyon, UMR 5307 LGF, Centre SPIN, F-42023 Saint-Etienne, France

^bVICAT, 4 rue Aristide Bergès, 38080 L'Isle d'Abeau, France

^cFMI Process, 22 rue de Garat, 42152 L'Horme, France

By the year of 2050, cement demand is projected to increase to over 6Gt. In 2020, carbon dioxide (CO₂) emissions were 0.77t CO₂/t cement produced. Supplementary cementitious materials (SCM), used as a partial clinker substitution, proved a significant reduction in energy, and environmental impact. They also helped improving physical and long-term durability of concrete. Following that, SCMs demand increases, as the supply decreases. Therefore, researchers are looking to optimize resource sustainability and efficiency using waste from different industries that currently have little or no market value.

Sewage sludge ash (SSA) is a powdery inert by-product produced from a calcination process of sewage sludge, residue resulting from wastewater treatment. Nowadays SSA production is expanding globally and its reuse in various fields has become a critical challenge for researchers. Under such circumstances, this work investigates the feasibility of SSA valorization in cement-based materials, as a partial substitution of Ordinary Portland Clinker (OPC). On the other hand, an enhancement of the SSA is studied helping improve the properties of the mix. This promotes the circular economy and helps limit the consumption of natural resources. It also joins the effort of cement industries to reduce environmental impact and carbon footprint of cement production.

In this work, a chemical, mineralogical and physical characterization of SSA was realized. An evaluation of the SSA effect on cement hydration was done on 3 levels of cement replacements (0, 10, 20, and 30%) with a constant water-to-binder (w/b) ratio of 0.5. Furthermore, the strength activity index (SAI) of the prepared mixes was assessed. Moreover, chemical, mechanical, and physical treatment were proposed to improve SSA behavior on the hydration reaction.

The evaluation of the mix hydration proves a regular hydration, with a slight modification observed at early-age. During the induction period, a one-hour delay is spotted after a 30% substitution, in comparison with a 100% CEMI mix. The SAI at 28 days is determined to be 86%, proving an interesting mechanical resistance. The results highlight on the interest of SSA valorization in a cement matrix. Finally, the SSA treatment has taken an active role in enhancing the mix properties.

Références

- Chang, Z., Long, G., Zhou, J. L., & Ma, C. (2020). Valorization of sewage sludge in the fabrication of construction and building materials: A review. In *Resources, Conservation and Recycling* (Vol. 154). Elsevier B.V.
- Danish, A., & Ozbakkaloglu, T. (2022). Greener cementitious composites incorporating sewage sludge ash as cement replacement: A review of progress, potentials, and future prospects. In *Journal of Cleaner Production* (Vol. 371). Elsevier Ltd.
- Lynn, C. J., Dhir, R. K., & Ghataora, G. S. (2018). Environmental impacts of sewage sludge ash in construction: Leaching assessment. *Resources, Conservation and Recycling*, 136, 306–314.
- Lynn, C. J., Dhir, R. K., Ghataora, G. S., & West, R. P. (2015). Sewage sludge ash characteristics and potential for use in concrete. *Construction and Building Materials*, 98, 767–779.
- Oliva, M., Vargas, F., & Lopez, M. (2019). Designing the incineration process for improving the cementitious performance of sewage sludge ash in Portland and blended cement systems. *Journal of Cleaner Production*, 223, 1029–1041.

P10 - Mesure des interactions grain/grain par Atomic Force Microscopy : application à la compréhension du vieillissement des poudres métalliques

LAKROUNE Yassine^{a,*}, BARNIER Vincent^b, VIEILLE Laetitia^a, FAVERGEON Loïc^a, OLLIVIER Maelig^a

^aMines Saint-Etienne, CNRS, UMR 5307 LGF, Centre SPIN, F-42023 Saint-Etienne, France

^bMines Saint-Etienne, Univ Lyon, CNRS, UMR 5307 LGF, Centre SMS, F-42023, Saint-Etienne, France

L'un des défis majeurs actuels dans l'industrie aéronautique réside dans la nécessité de réduire les émissions polluantes des avions de nouvelle génération. Dans cette optique, les constructeurs s'efforcent constamment de réduire le poids des aéronefs en explorant le développement de matériaux innovants dotés de propriétés distinctives remarquables. Les récentes utilisations des alliages d'aluminium impliquent des composants fabriqués par forgeage ou usinage. Pour certaines pièces, une très grande partie du matériau est enlevée sous forme de copeaux. L'utilisation croissante de pièces en aluminium dans la construction aéronautique se traduit donc directement par une augmentation des opérations d'usinage des alliages d'aluminium. A ce jour, une des solutions envisageables est le recours à la fabrication additive (FA). Bien que ce procédé soit coûteux, il s'avère avantageux pour élaborer des pièces proches des côtes. Les poudres métalliques, en tant que matériaux de base essentiels du procédé de FA, se situent au cœur de cette technologie, offrant une diversité de formes de conception. Cependant, leurs utilisations doivent être optimisées en raison des coûts élevés de la matière première. Outre les paramètres du procédé, la qualité de la pièce obtenue en FA dépend également des caractéristiques intrinsèques de la poudre incluant les aspects géométriques (distribution de la taille des particules, sphéricité), la composition chimique (en volume et en surface), ainsi que leurs propriétés rhéologiques qui découlent des caractéristiques précédentes (Sun *et al.* 2017). Pour des raisons économiques la gestion des coûts associés à la matière première, avec trois considérations primordiales : la réutilisation des poudres non utilisées dans la fabrication de la pièce finale, le recyclage des poudres ayant subi des altérations pendant le procédé, et enfin, le stockage et le vieillissement des poudres métalliques sont donc indispensables au développement de la fabrication additive sur lit de poudre métallique.

Dans cette étude, nous mettrons l'accent sur le vieillissement des poudres base-Al. Des conditions de stockage de ces poudres ont été simulées en laboratoire à l'aide d'enceintes climatiques permettant le vieillissement de poudre dans des conditions de température et de pressions partielles d'oxygène et de vapeur d'eau maîtrisées. La caractérisation de poudres stockées a permis de mettre en évidence des modifications importantes de leurs propriétés chimiques et rhéologiques en raison des faibles forces d'interaction entre les particules, ce qui diminue l'intérêt économique de la fabrication additive et accroît son impact environnemental, malgré la possibilité de recyclage (Bauer *et al.* 2017). Nous souhaitons apporter des éléments de compréhension au phénomène de vieillissement des poudres à base d'aluminium en étudiant le lien entre les propriétés surfaciques des grains individuels d'une poudre vieillie et les caractéristiques d'écoulement de l'ensemble des grains. Pour cela, une méthodologie combinant *Atomic force microscopy* (AFM) et la technologie FluidFM[®] a été développée afin d'analyser les interactions grain/grain (Meister *et al.* 2009). Elle repose sur l'utilisation de cantilevers micro-fluidiques facilitant la sélection des particules et assurant une meilleure répétabilité. Cette approche apportera des éléments essentiels sur la compréhension de l'effet de la micro et nano rugosité des particules et de la formation d'oxydes et d'hydroxydes sur les forces d'adhésion. Ces avancées permettront aux industriels de mieux orienter leurs choix en matière de stockage des poudres, contribuant ainsi à atténuer l'impact économique et environnemental des technologies de FA métallique.

Références

Sun P. et al., JOM 69, no 10 (1 octobre 2017) : 1853-60.

Bauer D. M. et al., Powder Metallurgy 60, no 3 (27 mai 2017) : 175-83.

Meister A. et al., Nano Letters 9, no 6 (10 juin 2009) : 2501-7.

* Auteur/s à qui la correspondance devrait être adressée : yassine.lakroune@emse.fr

P11 - Synthèse et formulation d'encre d'or pour l'impression jet d'encre d'électrodes de capteurs de gaz

LE PORCHER Bastien*, RIEU Mathilde et VIRICELLE Jean-Paul

Mines Saint-Etienne, Univ Lyon, CNRS, UMR 5307 LGF, Centre SPIN, F-42023 Saint-Etienne, France

Ce travail s'inscrit dans la thématique de développement de capteurs chimiques de gaz sur support souple par impression jet d'encre. Le choix de cette technique de déposition présente plusieurs avantages comme la haute résolution, la versatilité (pas besoin de masques) et la faible perte de matière due à un processus additif. Le but de cette étude est alors de développer des encres stables et fonctionnelles dont la composition est connue afin d'imprimer des électrodes d'or pour la fabrication de capteur de gaz.

Les points clés permettant l'obtention de ces revêtements sont la synthèse d'une solution de nanoparticules d'or stable, la formulation de l'encre, l'optimisation des paramètres d'impression jet d'encre et de dépôt menant à la formation d'un film d'or. Afin d'obtenir des dépôts homogènes et adhésifs, deux encres ont été développées, une première faite à base de nanoparticules d'or et une deuxième à base de précurseur d'or solubilisé.

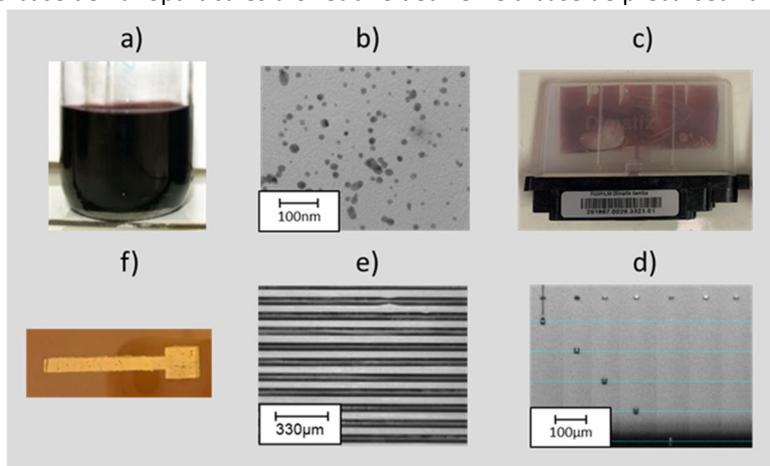


Figure 1. a) Suspension de nanoparticules d'or (AuNPs) b) micrographie TEM d'AuNPs, c) Encre d'or AuNPs dans une cartouche d'encre, d) éjection d'une goutte par jet d'encre, e) formation d'une ligne d'encre sur polyimide par déposition jet d'encre et f) revêtement d'or conducteur constitué de couches d'encres à base d'AuNPs et de précurseur.

Tout d'abord, la méthode de synthèse classique, selon Turkevich, a été modifiée en y apportant les optimisations les plus récentes afin de synthétiser des nanoparticules monodisperses de 5 nm de diamètre en milieu aqueux. Ensuite, des additifs ont été ajoutés, afin de satisfaire le cahier des charges imposé par l'imprimante en termes de viscosité et de tension de surface, tout en conservant la stabilité de la suspension. Enfin, les paramètres de l'imprimante jet d'encre ont été ajustés afin de déposer des films d'or qui seront ensuite recuits et caractérisés. Une approche similaire a été étudiée pour le développement de l'encre à base de précurseur. La combinaison entre la déposition d'une encre à base de nanoparticules et d'une encre à base de précurseur a permis l'obtention de dépôts continus, conducteurs et de haute résolution sur des feuilles de polyimide.

References

- Piella, J., Chem. Mater., 28(4), 2016, 1066-1075.
- Rieu, M., Sensors and Actuators, B.236, 2016, 1091-1097.
- Turkevich, J., Discuss. Faraday Soc., 11 1951, 55.

P12 - The introduction of supports to augment ex-situ biomethanation in the implementation of a novel reactor

KERAMATI Misagh^a, ESSID Adib^a, GUEZ Jean-Sébastien^a, FADHLAOUI Khaled^b, DUBESSAY Pascal^a, VIAL Christophe^a, FONTANILLE Pierre^a

^aUniversité Clermont Auvergne, Clermont Auvergne INP, CNRS, Institut Pascal, F-63000 Clermont–Ferrand

^bUniversité Clermont Auvergne, CNRS, LMGE, F-63000 Clermont–Ferrand, France.

In the contemporary era, there is a global focus on the significance of sustainable and renewable energy production. Over the past decade, a range of Power-to-X (PtX) technologies has been proposed to capture and convert surplus renewable energy into chemical compounds through diverse processes. Carbon dioxide (CO₂) serves as a prominent contributor to climate change, yet it is frequently disregarded as a carbon source that can be repurposed, presenting an opportunity for sustainable energy production. Within this framework, power-to-X (PtX) technologies hold the promise of transforming CO₂ into renewable fuels, thereby concomitantly reducing greenhouse gas (GHG) emissions.

Currently, there is a growing interest in a method that utilizes the CO₂ found in biogas as a viable resource, converting it into methane (CH₄). This approach is referred to as biomethanation, and it involves a process facilitated by hydrogenotrophic methanogens. These methanogens utilize hydrogen (H₂) as an electron donor to transform CO₂ into CH₄. In comparison to established physicochemical technologies, biomethanation is gaining recognition as a promising alternative due to its cost-effective operation, low energy demands, and its ability to utilize CO₂ for additional enhancement of CH₄.

In this research, a 3L bubble column reactor was employed for ex-situ methane production, involving the introduction of exogenous H₂ and CO₂ into the system. To improve mass transfer, these gases were infused through a bottom sparger. Furthermore, system optimization was achieved by circulating the enclosed liquid system in a counter-current fashion. Ultimately, colonized biochips were incorporated to augment the implementation.

This presentation will discuss the augmentation of this process and the performance obtained using this original design.

P13 - Numerical study of a hydrogen dilution effect on the performance of PEMFC fuel cell

BENHAMAD Maha, TARDY Erwan, KAMARA Konakpo Parfait; DRUART Florence

Univ. Grenoble Alpes, Univ. Savoie Mont Blanc, CNRS, Grenoble-INP, EIP- LEPMI, 38000 Grenoble, France

PEM Fuel cells systems (PEMFC) require pure hydrogen as anodic fuel for operation. In this study, the hydrogen dilution with different concentrations of inert gases, CO₂, CH₄, Ar and N₂, has been studied by a numerical simulation. A single cell with a 25 cm² electrode area and a microporous layer (MPL) and catalyst layers (CL), in which the cell temperature was fixed at 70°C and 100% relative humidity (RH).

A three-dimensional, steady-state, model for a PEMFC cell was simulated using COMSOL Multiphysics 6.1. In this work, two approaches of COMSOL interfaces have been presented. In the first study, Proton Exchange Hydrogen Fuel Cell (fc) and Free and Porous Media Flow interfaces are used. In the second study, Free and porous media flow and transport of concentrated species are the two major phenomena considered for modeling the gas flow channel, GDL and CL in the anode as well as cathode of the fuel cell.

The simulation results were validated by a comparison with an experimental study (in LEPMI Laboratory) of a PEMFC unit with the same operation conditions. The effects of hydrogen dilution on the performance of the cell were studied and discussed also compared with hydrogen pure effect.

Keywords

PEMFC, hydrogen dilution, microporous layer (MPL), catalyst layers (CL), COMSOL Multiphysics.

References

- [1] Xie, M.; Chu, T.; Wang, T.; Wan, K.; Yang, D.; Li, B.; Ming, P.; Zhang, C., 2021, Preparation, Performance and Challenges of Catalyst Layer for Proton Exchange Membrane Fuel Cell. *Membranes*, 11, 879.
- [2] Y. Bultel, K. Wiezell, F. Jaouen, P. Ozil, G., 2005, . Lindbergh, Investigation of mass transport in gas diffusion layer at the air cathode of a PEMFC, *Electrochimica Acta* 51,pp. 474–488.
- [3] Edwards, Russell L., 2018. Simplified, Alternative Formulation of Numerical Simulation of Proton Exchange Membrane Fuel Cell. Doctor of Philosophy (PhD), Dissertation, Mechanical & Aerospace Engineering, Old Dominion University.
- [4] M. Boillot, C. Bonnet, N. Jatroudakis, P. Carre, S. Didierjean, F. Lapique, 2006. Effect of Gas Dilution on PEM Fuel Cell Performance and Impedance Response. *Wiley Online Library, Fuel Cells* 6(1):31 – 37.
- [5] Sunhoe Kim, S. Shimpalee, J.W. Van Zee, 2004. The effect of reservoirs and fuel dilution on the dynamic behavior of a PEMFC. *Journal of Power Sources* 137 (2004) 43–52.
- [6] Tao Gu, W.-K. Lee, J. W. Van Zee, and M. Murthy, 2004. Effect of Reformate Components on PEMFC Performance: Dilution and Reverse Water Gas Shift Reaction. *Journal of The Electrochemical Society*, 151(12), A2100-A2105.