



HAL
open science

Impact de la dynamique de bulles sur l'efficacité de l'électrolyse de l'eau

Nicolas Cazanove, Hiba Saada, Thomas Mabit, Florian Scholkopf, Hamid Ben Ahmed, Laurent Courbin, Marie-Caroline Jullien

► **To cite this version:**

Nicolas Cazanove, Hiba Saada, Thomas Mabit, Florian Scholkopf, Hamid Ben Ahmed, et al.. Impact de la dynamique de bulles sur l'efficacité de l'électrolyse de l'eau. 26e Congrès Français de Mécanique, Laboratoire d'Etude des Microstructures et de Mécanique des Matériaux (LEM3 - UMR CNRS 7239), Aug 2025, Metz, France. <hal-05313020>

HAL Id: hal-05313020

<https://hal.science/hal-05313020v1>

Submitted on 14 Oct 2025

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



HAL Authorization

Impact de la dynamique de bulles sur l'électrolyse de l'eau

N. CAZANOVE^{a,b}, H. SAADA^a, T. MABIT^a, F. SCHOLKOPF^a, H. BENAHMED^b, L. COURBIN^a, M.-C. JULLIEN^{a,*}

a. Univ Rennes, CNRS, IPR (Institut de Physique de Rennes) - UMR 6251, F-35000 Rennes, France

b. ENS Rennes, CNRS, IETR, Campus de Ker Lann, 11 Av. Robert Schuman, 35170 Bruz, France

*. email : marie-caroline.jullien@univ-rennes.fr

Résumé :

Une difficulté dans le développement de la production de dihydrogène par électrolyse tient à la présence des bulles de H_2 et de O_2 qui interagissent, via leurs dynamiques, et affectent ainsi la pureté des gaz produits. En pratique, une membrane échangeuse d'ions est placée entre les électrodes afin d'éviter ces interactions. Bien que ces membranes soient très efficaces, elles posent souvent un problème de durabilité. Un paradigme serait de concevoir des électrolyseurs sans membrane afin de minimiser l'impact environnemental lié à sa production. Le défi posé par l'électrolyse sans membrane consiste à séparer les gaz produits sans utiliser de séparateur physique. Une solution consiste à exploiter la dynamique des fluides pour évacuer les bulles et limiter les phénomènes de contamination croisée. Nous proposons une approche numérique qui couple cycle de vie d'une bulle (nucléation, détachement, dynamique) et mesure électrochimique.

Abstract :

A difficulty in developing the production of dihydrogen by electrolysis is the presence of H_2 and O_2 bubbles which interact, via their dynamics, and thus affect the purity of the produced gases. In practice, an ion-exchange membrane is placed between the electrodes to avoid these interactions. Although these membranes are very efficient, they often pose a problem in terms of durability. A paradigm would be to design electrolyzers without membranes in order to minimise the environmental impact associated with their production. The challenge posed by membrane-free electrolysis is to separate the produced gases without using a physical separator. One solution is to exploit fluid dynamics to evacuate bubbles and limit cross-contamination phenomena. We propose a numerical approach that combines the life cycle of a bubble (nucleation, detachment, dynamics) with electrochemical measurement.

Mots clefs : Dynamique de bulles, Dynamique Stokesienne, Métamodèle, Couplage électrochimique, Microfluidique

1 Introduction

En 2018, plus de 99 % du dihydrogène mondial est produit à partir de combustibles fossiles, dont les trois quarts sont obtenus par reformage du gaz naturel [1]. Cette méthode produit un dihydrogène peu

coûteux mais très polluant [2]. Moins de 1 % du dihydrogène mondial est produit par électrolyse de l'eau (water splitting). D'autres impacts environnementaux sont à prendre en compte comme la fabrication des composants de l'électrolyseur (membrane, électrodes, etc.) [3]. Pouvoir produire du dihydrogène à partir de l'électrolyse de l'eau sans membrane est donc une piste à étudier sérieusement pour trouver des énergies qui minimisent notre impact environnemental.

L'électrolyse de l'eau implique la dissociation des molécules de H_2O en dihydrogène H_2 et en dioxygène O_2 . Les bulles formées s'écoulent alors librement dans l'espace inter-électrode. La dynamique des bulles qui en découle est très complexe et résulte d'interactions hydrodynamiques (dynamiques fortement couplées) entre les bulles voisines et entre les bulles et les parois des électrodes. Du fait de ces interactions, les bulles s'éloignent des électrodes et se mélangent, ce qui affecte la pureté des gaz produits. Le défi posé par l'électrolyse sans membrane réside dans la séparation des gaz produits par l'électrolyse sans utiliser de séparateur physique. À notre connaissance, les électrolyseurs sans membrane utilisent les propriétés associées à la dynamique des fluides (inertie, flottabilité, etc.) pour évacuer les bulles et limiter les phénomènes de contamination croisée. Les technologies d'électrolyseurs sans membrane les plus abouties sont principalement basées sur des puces microfluidiques [4]. Ces technologies utilisent généralement un écoulement dans le milieu inter-électrode pour évacuer les bulles, ce qui nécessite un apport d'énergie externe supplémentaire. Des tentatives ont été faites pour étendre ces technologies à des méthodes passives, c'est-à-dire sans écoulement, mais elles ne sont généralement pas satisfaisantes en termes d'efficacité [5, 6]. C'est cette approche qui a été choisie.

Nous avons développé un modèle numérique qui permet d'analyser l'impact de la dynamique de bulles, à bas nombre de Reynolds dans une géométrie microfluidique, sur l'efficacité électrolytique. Ce modèle prend en compte tout le cycle de vie d'une bulle (Figure 1) : nucléation à partir du dihydrogène produit aux électrodes sur des sites de nucléation prédéfinis, croissance, détachement et écoulement par flottaison. Les trois premières étapes sont très dépendantes de la configuration expérimentale (propriétés physico-chimiques, rugosité de l'électrode, effets Marangoni, ...) [7, 8]. Dans notre modélisation numérique, nous nous sommes basés sur des travaux rapportés dans la littérature et qui seront explicités durant la présentation. Nous nous concentrons ici sur la dynamique de bulles détachées et sur son couplage avec l'électrochimie. Une section de résultats est ensuite présentée, montrant l'impact de la dynamique de bulles sur les performances électrolytiques.

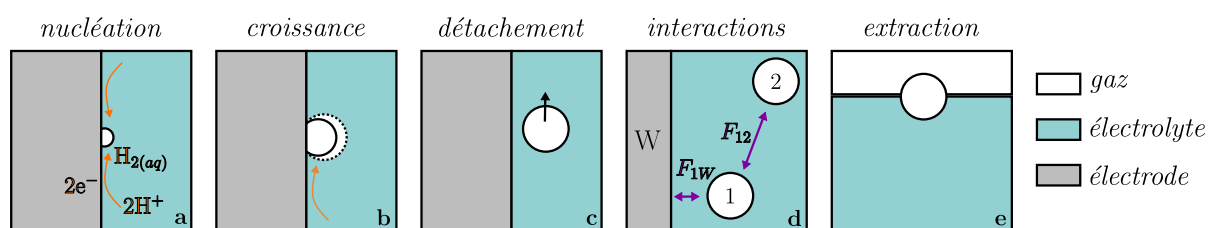


FIGURE 1 – Cycle de vie d'une bulle illustré dans le cas de dihydrogène produit en milieu acide : a) nucléation sur la cathode ; b) croissance par apport du gaz dissout au voisinage de la bulle ; c) détachement de la bulle lorsque les forces hydrodynamiques et de flottaison sont supérieures à la force capillaire ; d) écoulements des bulles en tenant compte des interactions avec les parois (F_{1W}) et des bulles voisines (F_{12}) ; e) arrivée de la bulle en zone d'extraction.

2 Approche numérique utilisée

Cette approche consiste à prendre en compte les forces hydrodynamiques et les couples générés par les bulles s'écoulant, en interaction éventuelle avec d'autres bulles et une paroi, affectant ainsi la dynamique des bulles voisines. Cette dynamique de bulles est ici modélisée en utilisant les outils de la dynamique Stokesienne, largement utilisée pour l'étude des écoulements de suspensions [9]. Les bulles sont en effet indéformables (bas nombre capillaire) et la condition limite à l'interface est de type rigide, elles peuvent donc être assimilées à des grains en inversant la direction de sédimentation. La différence avec des grains tient à ce qu'une bulle qui croît à une électrode peut être détachée, par les forces hydrodynamiques issues de bulles voisines, avant d'atteindre le rayon critique de détachement donné par l'équilibre entre capillarité et flottaison, il en résulte une dispersion en taille des bulles. Concrètement, le rayon de Fritz est le rayon de détachement défini par l'équilibre entre les forces hydrodynamiques et capillaires, il dépend de la taille ϵ du site de nucléation, de la tension de surface γ entre le liquide et le gaz et de la masse volumique ρ du gaz :

$$a_{Fritz} = \sqrt[3]{\frac{3\epsilon\gamma}{2\rho g}} \quad (1)$$

Formellement, notre approche revient à résoudre l'équation suivante :

$$\vec{\mathcal{F}} = \overline{\overline{\mathcal{R}}}\vec{\mathcal{U}} \quad (2)$$

Avec $\vec{\mathcal{F}}$, le vecteur décrivant les forces et les couples, qui contient toutes les actions extérieures autres que la traînée hydrodynamique, qui s'appliquent sur chaque bulle. Dans notre cas, il contient uniquement l'action de la pesanteur. Le vecteur cinématique $\vec{\mathcal{U}}$ concatène la vitesse de translation et la vitesse de rotation de chacune des bulles. La matrice de résistance $\overline{\overline{\mathcal{R}}}$, établie à partir des équations de la dynamique Stokesienne [9, 10], permet de faire le lien entre les deux vecteurs précédents.

Les équations permettant de construire cette matrice et notre modélisation ont été vérifiées à partir d'autres modèles dans des cas simples. La Figure 2 présente une comparaison entre notre modélisation et celle Ganatos et al. [11], définie comme référence en dynamique Stokesienne. Nous comparons ici, la vitesse à l'équilibre de deux sphères sédimentant dans une configuration géométrique stable.

Dans le cadre du régime de Stokes, la vitesse de Stokes U_S est la vitesse à l'équilibre d'une particule de rayon a , de masse volumique ρ_p , qui sédimente dans un fluide de masse volumique ρ et de viscosité dynamique μ :

$$U_S = \frac{2|\rho - \rho_p|ga^2}{9\mu} \quad (3)$$

Ainsi, le problème hydrodynamique n'est pas résolu stricto-sensu dans le sens où le champ de vitesse du liquide n'est pas résolu localement ; mais il est implicitement contenu dans les forces et couples calculés. Cette approche permet de résoudre un problème hydrodynamique en quelques minutes alors qu'une résolution complète de type éléments finis prendrait une semaine. Ce gain de temps permet d'étudier une large gamme de paramètres hydrodynamiques et électrochimiques dans un temps raisonnable.

La résolution de dynamique de bulles est couplée au problème électrochimique de production de dihydrogène [12]. Le modèle prend en compte le transfert de charge aux électrodes, décrit par la loi de Tafel

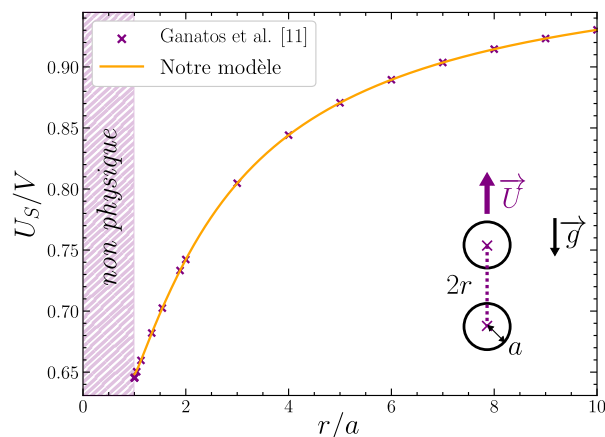


FIGURE 2 – Vitesse de Stokes U_S , définie dans le texte, normalisée par la vitesse de la particule en fonction de la distance inter-sphère normalisée par le rayon d’une sphère. Comparaison entre notre modélisation et celle de Ganatos et al. [11] pour l’écoulement de deux sphères parallèlement à la ligne verticale passant par leur centre comme illustré.

pour du platine :

$$j_{a,c} = J_{a,c}^0 \exp\left(\frac{\Delta\phi_{a,c}(x)}{A_{a,c}}\right) \quad (4)$$

Où les indices a et c se réfèrent respectivement à l’anode et à la cathode, j et $\Delta\phi$ étant la densité de courant et la différence de potentiel à l’électrode. Enfin, $A_{a,c}$ et $J_{a,c}^0$ sont les paramètres de Tafel, déterminés expérimentalement.

Cette loi est associée à un modèle électrocinétique (loi d’Ohm prenant en compte la présence de bulles aux parois et en volume) afin de calculer localement le potentiel et la densité de courant. La conductivité de l’électrolyte sans bulles est prédéfinie.

3 Résultats : couplage entre dynamique de bulles et électrochimie

3.1 À l’échelle locale

La résolution numérique de ce couplage permet d’extraire plusieurs mesures à l’échelle locale. La Figure 3 illustre par deux exemples les métriques qui peuvent typiquement être extraites : la distribution de rayon des bulles produites montre que la taille des bulles est fortement influencée par les interactions hydrodynamiques de bulles voisines (voir Figure 3.a), et les cartographies du potentiel et de la densité de courant montrent l’influence locale de la présence des bulles sur les paramètres électrochimiques (voir Figure 3.b). Il s’agit de résultats préliminaires, car la taille des bulles a été limitée à $0.3 a_{Fritz}$. La valeur de ce seuil sera discutée à l’oral.

3.2 À l’échelle globale

Nous pouvons également extraire des mesures globales qui permettent d’estimer l’efficacité de l’électrolyse. La Figure 4 illustre par un exemple l’effet de la présence des bulles sur la surtension globale de l’électrolyseur. À densité de courant plus élevée, donc pour une fréquence de bullage plus importante, il est clairement observable que la surtension augmente, associée à la présence d’une plus grande densité

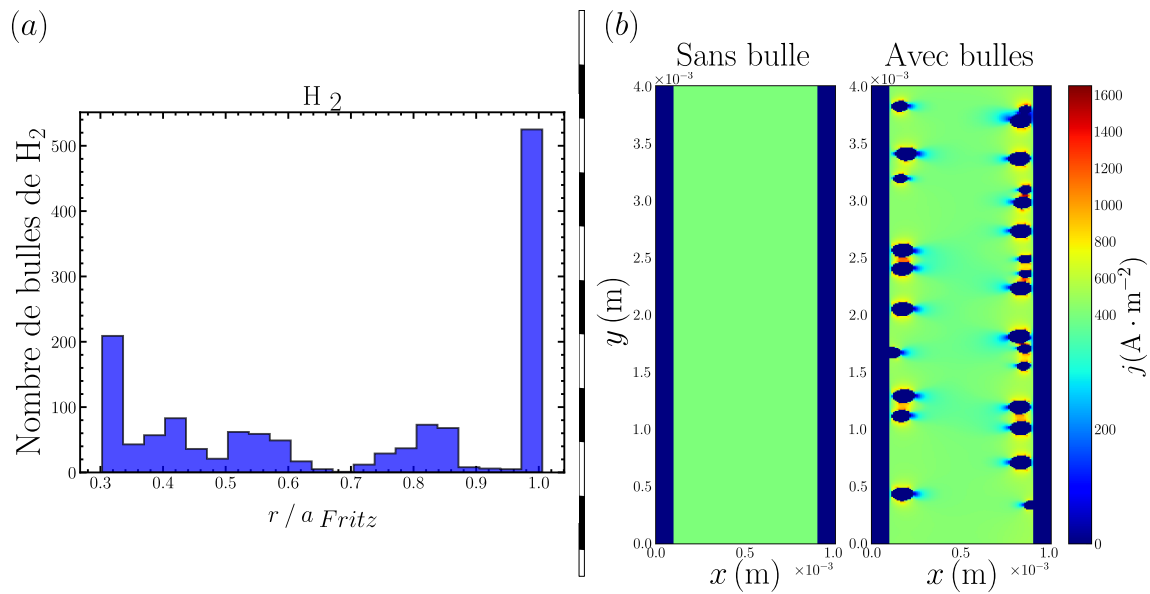


FIGURE 3 – (a) Résultats préliminaires : histogramme de rayons de bulles de H₂ normalisés par le rayon de Fritz, $a_{Fritz} = 60 \mu\text{m}$, i.e. le rayon de détachement défini dans le texte, pour différentes densités de courant comme indiqué. La durée de l'électrolyse est de 30 s et sans écoulement. La taille des bulles est limitée à $0.3 a_{Fritz}$. (b) Cartographie de la densité de courant au sein de l'électrolyseur sans bulle (à gauche) et en prenant en compte la présence de bulles (à droite) à $t = 2.0$ s. La densité de courant pour l'électrolyse est $j = 400 \text{ A} \cdot \text{m}^{-2}$.

de bulles. Les oscillations de la courbe sont la signature du cycle croissance/détachement successifs des bulles produites aux électrodes. Nous pouvons également extraire l'influence des différents paramètres que l'on peut faire varier (le courant imposé, la conductivité de l'électrolyte, le modèle de transfert de charge, les propriétés de mouillage, le nombre de sites de nucléation, le rayon de détachement...).

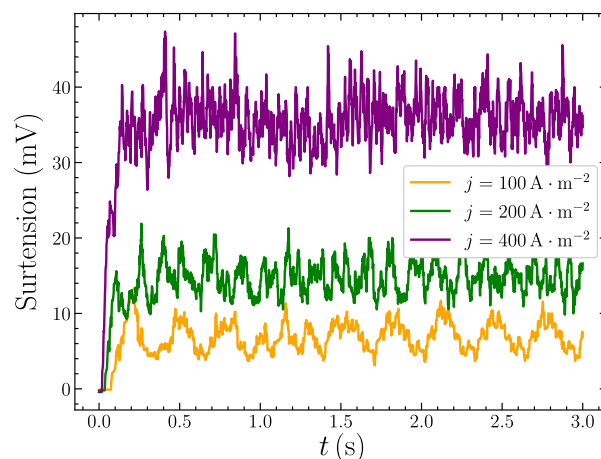


FIGURE 4 – Surtension associées à la génération de bulles entre les électrodes pour différentes densité de courant en fonction du temps t .

4 Conclusions

Dans cette étude, nous montrons l'impact de la dynamique des bulles sur l'électrolyse sans membrane, dans le cas d'un électrolyseur microfluidique. Dans ce contexte, nous avons développé un métamodèle

couplant la dynamique des bulles et l'électrochimie. Cet outil, prenant en compte l'ensemble du cycle de vie d'une bulle, permet de mesurer l'influence de nombreux paramètres physico-chimiques sur les performances de l'électrolyse. En outre de nombreuses configurations peuvent être testées, la densité de sites de nucléations, la densité de courant imposée. Nous pouvons alors mesurer des impacts aux échelles microscopiques et macroscopiques.

Finalement, nous montrons l'intérêt de coupler l'étude de la dynamique de bulles à l'électrochimie, via une méthode numérique peu coûteuse en temps de calcul, afin d'étudier les performances d'un électrolyseur en fonction des propriétés géométriques et physico-chimiques.

Références

- [1] ADEME, « Hydrogène : analyse des potentiels industriels et économiques en France, » www.ademe.fr/mediatheque, 2019.
- [2] Assemblée nationale, « Note n° 25 – les modes de production de l'hydrogène, » *Les Notes Scientifiques de l'Office*, 2021.
- [3] L. Duclos, Vers l'éco-conception des piles à combustible : développement d'un procédé de recyclage des catalyseurs des systèmes de PEMFC à base de platine. PhD thesis, 2017.
- [4] D. Esposito, « Membraneless electrolyzers for low-cost hydrogen production in a renewable energy future », *Joule*, 1, 4, pp. 651–658, 2017.
- [5] G. O'Neil, « Hydrogen production with a simple and scalable membraneless electrolyzer », *Journal of The Electrochemical Society*, vol. 163, no. 11, 2016.
- [6] J. Davis, « Floating membraneless pv-electrolyzer based on buoyancy-driven product separation », *International Journal of Hydrogen Energy*, 43, 3, pp. 1224–1238, 2018.
- [7] F. Struyven, M. Sellier et P. Mandin, « Review : Interactions between electrogenerated bubbles and microfluidic phenomena », *International Journal of Hydrogen Energy*, 48, pp. 32607-32630, 2023.
- [8] A. Angulo et al., « Influence of Bubbles on the Energy Conversion Efficiency of Electrochemical Reactors », *Joule*, 4, pp. 555-579, 2020.
- [9] S. Kim, S. J. Karrila, « Microhydrodynamics Principles and Selected Applications », 1991.
- [10] L. Durlofsky, F. Brady et G. Bossis, « Dynamic simulation of hydrodynamically interacting particles », *J. Fluid Mech.*, 180, pp. 21-49, 1987.
- [11] P. Ganatos, R. Pfeffer et S. Weinbaum, « A numerical-solution technique for three- dimensional Stokes flows, with application to the motion of strongly interacting spheres in a plane », *J. Fluid Mech.*, 84, pp. 79-111, 1978.
- [12] M. Chatenet et al., « Water electrolysis : from textbook knowledge to the latest scientific strategies and industrial developments », *Chem. Soc. Rev.*, 51, pp. 4587-4601, 2022.