AUTOREN



Sören Tinz, M. Sc. ist Wissenschaftlicher Mitarbeiter am Lehrstuhl für Thermodynamik mobiler Energiewandlungssysteme (TME) der RWTH Aachen University.



Dr.-Ing. Maximilian Wick ist Postdoktorand im Bereich Brennstoffzellentechnologie am Lehrstuh für Thermodynamik mobiler Energiewandlungssysteme (TME) der RWTH Aachen University.



Dr.-Ing. Sönke Gößling ist Gruppenleiter Simulation und Regelung am Zentrum für Brennstoffzellentechnik (ZBT) in Duisburg.



Matthias Bahr, M. Sc. ist Wissenschaftlicher Mitarbeiter am Zentrum für Brennstoffzellentechnik (ZBT) in Duisburg.

Modulare Simulationsumgebung für Brennstoffzellensysteme mit Fokus auf den Membranwasserhaushalt

Der Wasserhaushalt einer Brennstoffzelle hat entscheidenden Einfluss auf die Leistungsfähigkeit. Am Lehrstuhl für Thermodynamik Mobiler Energiewandlungssysteme (TME) der RWTH Aachen University und am Zentrum für Brennstoffzellentechnik (ZBT) in Duisburg wurde hierzu im Rahmen eines FVV-Forschungsvorhabens ein Stack-/Systemmodell für Brennstoffzellen entwickelt. Im Folgeprojekt (FVV-Nr. 1411) "Brennstoffzellen-Kaltstart" wurde dieses erweitert, um insbesondere den Einfluss von flüssigem Wasser zu beleuchten.



© RWTH | ZBT

- 1 FLÜSSIGES WASSER IN DER BRENNSTOFFZELLE
- 2 STACKMODELL
- 3 SYSTEMMODELL
- 4 ANWENDUNGSFÄLLE
- 5 ZUSAMMENFASSUNG UND AUSBLICK

1 FLÜSSIGES WASSER IN DER BRENNSTOFFZELLE

Das aus dem FVV-Vorgängerprojekt "Brennstoffzellensystemsimulation – Membranbefeuchtungsmanagement" (FVV-Nr. 1298) [1] hervorgegangene Modell kann unter anderem zur Zell-, Stack-, Komponenten- und Systemauslegung sowie zur Betriebsstrategieentwicklung eingesetzt werden. Das Stackmodell basiert auf dem am ZBT entwickelten Brennstoffzellenmodell, das neben den allgemeinen Strom- und Spannungsabhängigkeiten auch ortsaufgelöste Prozesse innerhalb einer Brennstoffzelle mit Polymer-Elektrolyt-Membran (PEM Fuel Cell, PEM-FC) abbildet [2, 3]. Ergänzend wird im FVV-Folgeprojekt die Kaltstartfähigkeit von Brennstoffzellen untersucht. Bei Betriebstemperaturen von 20 °C und weniger kann die Luft um signifikante Größenordnungen weniger Wasser in Gasform aufnehmen als bei Nennbetriebstemperatur. Deshalb ist die Berücksichtigung des flüssigen Wassers und der Wechselwirkungen mit diesem zwingend notwendig. In einem ersten Schritt wird die Menge des flüssigen Wassers und die damit verbundene Sättigung der Gasdiffusionslage (GDL) berechnet. Die verwendeten Ansätze basieren auf den Arbeiten von Ferreira [4]. Zum einen ist das flüssige Wasser – ähnlich der Fickschen Diffusion – in diesem Prozess die treibende Kraft für den Wassertransport, zum anderen bildet das flüssige Wasser selbst erst die Transportkanäle für das Wasser aus. Der Wassertransport lässt sich mit Gl. 1 beschreiben, wobei *s* die Sättigung, *N* der molare Fluss des flüssigen Wassers, ρ seine Dichte, *M* seine molare Masse, *K* die absolute Permeabilität, μ die dynamische Viskosität, σ die Oberflächenspannung, θ der Kontaktwinkel, ε die Porosität, *J* die Leverett J-Function, *dz* die Weglänge des Wassertransports und *ds* die Differenz der Sättigung zwischen der Elektrode und dem Kanal ist:

GI. 1
$$N_{H_2O, l} = \frac{\rho_{H_2O(l)}}{M_{H_2O}} \frac{Ks^3}{\sqrt{K\ell}} \frac{\sigma \cos \theta_c}{\sqrt{K\ell}} J(s) \frac{ds}{dz}$$

Da die Leitfähigkeit und die Sättigung durch Wasser über die dritte Potenz miteinander gekoppelt sind, führen geringe Mengen flüssigen Wassers zu signifikanten Sättigungen der GDL. Für den Einfluss des Wassers auf den effektiven Diffusionskoeffizienten D_{eff} können in der Literatur verschiedene Modelle gefunden werden [5, 6]. Grundsätzlich haben alle Modelle gemeinsam, dass der reduzierte freie Diffusionsraum einen überproportional großen Einfluss auf D_{eff} hat. Im Vergleich zum freien Gasraum und mit porösem Material gefüllten Raum, **BILD 1** (a und b), wird im Raum mit vom flüssigen Wasser blockierten Poren zusätzlich die durchschnittliche Länge der Diffusionswege vergrößert, **BILD 1** (c). Für die Berechnung wird GI. 2 genutzt, wobei sich D_{eff} auf den trockenen Zustand bezieht und $D_{\text{eff}.1}$ auf den mit flüssigem Wasser gefüllten Zustand:

GI. 2
$$D_{\text{eff},1}(s) = D_{\text{eff}} (1-s)^3$$

Die Diffusion innerhalb der Katalysatorschicht wird analog berechnet.

In **BILD 2** sind exemplarische Berechnungsergebnisse des erweiterten Modells dargestellt. Entlang des gesamten Kathodenkanals



BILD 1 Veränderung des Diffusionswegs durch den freien Gasraum (a), durch poröses Material (b) und durch poröses Material mit flüssigem Wasser (c) (© RWTH | ZBT)



BILD 2 Exemplarische Ergebnisse des Modells bei einer vollständig gesättigten Medienversorgung mit einer Stöchiometrie von 2, einer Zelltemperatur von 70 °C, einem absoluten Betriebsdruck von 2 bar_{abs} und einer mittleren Stromdichtebelastung von 1,7 A/cm²; berechnete Sättigung in der GDL jeweils unter dem Kanal und unter dem Steg (links), zugehörige berechnete Stromdichte (rechts) (© RWTH I ZBT)

wird eine höhere Sättigung unter dem Kanal berechnet, **BILD 2** (links), was durch den längeren Diffusionsweg von der Elektrode unter dem Steg zum Kanal begründet werden kann. Die höhere Sättigung führt zu einer höheren Stromdichte unter dem Kanal als unter dem Steg, **BILD 2** (rechts). Die höhere Sättigung am Eintritt der Kathode gegenüber dem Austritt wird durch die höhere Stromdichte in diesem Bereich verursacht, die zu einer höheren Wasserproduktion und somit zu einem erhöhten Wassertransport führt.

2 STACKMODELL

Für den Stackeinfluss werden die zwei signifikantesten Zellen betrachtet, um die relevantesten Limitierungen abzubilden: die zentrale mittlere Zelle und eine Randzelle. Die Randzelle ist an die träge thermische Masse der Endplatten gekoppelt und stellt im Aufheizprozess die kälteste Zelle und somit die Zelle mit der größten Flüssigwassermenge dar. Die zentrale Zelle kann dagegen bei besonders trockenen Bedingungen zu Limitierungen führen.



BILD 3 Beispielhafte Brennstoffzellensystemtopologie (© RWTH | ZBT)



Das Modell kann mittels verschiedener elektrochemischer und geometrischer Parameter, thermischer Massen sowie Leitwerte an individuelle Stacks angepasst werden.

3 SYSTEMMODELL

Zusätzlich zum Stack sind mehrere Nebenaggregate zum Betrieb eines Brennstoffzellensystems nötig, die Luft- und Wasserstoffversorgungssystemen oder dem Kühlkreislauf zugeordnet werden können. Ein beispielhafter Aufbau mit modellhaften Komponenten ist in **BILD 3** dargestellt. Das Zusammenspiel der Komponenten des Brennstoffzellensystems wird zum Beispiel in [7] thematisiert.

Mit dem in den Forschungsprojekten verfolgten modularen Ansatz kann in der Entwicklung auf die individuellen Anforderungen eingegangen werden. Die entwickelte Plattform kann nicht nur dazu genutzt werden, mit einem detaillierten physikalischen Modell ein grundsätzliches Verständnis der Zusammenhänge in einem Brennstoffzellensystem zu erhalten oder ein reduziertes Modell zur Reglerentwicklung zu erstellen. Mit der modularen Struktur der Systemmodellumgebung mit definierten universellen Schnittstellen kann jedes Komponentenmodell des Systems durch eine Alternative mit einem anderen Grad an Modelltreue und Komplexität ersetzt werden. Das Gesamtmodell kann also benutzerspezifisch mit unterschiedlichen Detailgraden und unterschiedlicher Komplexität erstellt werden. Der allgemeine Ansatz der Systemmodellumgebung ist in **BILD 4** visualisiert.

Zur zusätzlichen Abbildung von Kaltstartbedingungen wird das bestehende generische Brennstoffzellensystemmodell um die Simulation von flüssigem Wasser im System ergänzt. Dazu wird in jedem relevanten Komponentenmodell ein zusätzlicher Flüssigwasserpfad eingeführt, der direkt mit dem gasförmigen transportierten Wasser interagiert. Das Flüssigwasser entsteht, sobald der Partialdruck des gasförmigen Wassers den temperaturabhängigen Sättigungsdampfdruck überschreitet. Es wird dann dem Flüssigwasserpfad zugeführt. Darüber hinaus wird die Flüssigwasserphase in der Energiebilanzierung berücksichtigt.

4 ANWENDUNGSFÄLLE

Für die Simulationsumgebung wurde ein exemplarisches Modell auf Basis des Breeze-Brennstoffzellensystems [8] aufgebaut – einem Range Extender für ein Elektrofahrzeug. Die Validierung erfolgte mittels entsprechender Prüfstands- und Fahrzeugmessdaten [9]. Das System wurde im Modell um einen Membranbefeuchter erweitert, der den Wassergehalt des Kathodenabgases zur Befeuchtung der trockenen Kathodenzuluft nutzt. Außerdem wurde ein Bypass zur Umgehung des Befeuchters realisiert, um die Feuchtigkeit der Kathodenzuluft zu regeln, wie in **BILD 3** zu erkennen ist. Neben der Betriebsparameteroptimierung wurden auch die Anwendungsfälle der Systemkonzeptionierung, der Komponentendimensionierung und der Reglerentwicklung demonstriert.

Das Systemmodell kann unter anderem dazu genutzt werden, das Systemverhalten für diverse Betriebsparametervariationen zu bewerten, um so Kombinationen zu ermitteln, die zu optimalen Systemwirkungsgraden führen. Der Systemwirkungsgrad ergibt sich aus dem Wasserstoffverbrauch und der Nettosystemleistung, wobei sich letztere zusammensetzt aus der elektrischen Stackleistung abzüglich der Leistungsaufnahme des Verdichters, des Wasserstoffrezirkulationsgebläses und der Kühlmittelpumpe.

Die Ergebnisse einer beispielhaften Druckvariation sind in **BILD 5** dargestellt. Höhere Partialdrücke der Reaktanten führen zu höheren Zellwirkungsgraden. Im niedrigen Teillastbereich gleicht der höhere Zellwirkungsgrad bei höheren Drücken die zusätzliche Kompressionsleistung nicht aus, während bei höheren Lasten der höhere Stackwirkungsgrad dominiert. Für hohe Lastpunkte und Volumenströme können aufgrund der hohen Abgasgegendrücke niedrige Druckniveaus nicht gehalten werden. Deshalb



BILD 5 Stack- und Systemwirkungsgrade mittels simulierter Parametervariation zur Ermittlung des optimalen Kathodeneinlassdrucks; Randbedingungen: Kühlmitteleinlasstemperatur T = 65 °C, Kühlmitteltemperaturspreizung ΔT = 10 K, Kathodenstöchiometrie λ = 2, relative Kathodeneinlassfeuchte φ = 65 % (© RWTH I ZBT)

enden die Kurven der untersuchten und in **BILD 5** dargestellten Konfigurationen bei mittleren Lastpunkten. Die Parametervariation führt zu einem lastabhängigen optimalen Betriebsdruckprofil.

5 ZUSAMMENFASSUNG UND AUSBLICK

Als entscheidender Einflussfaktor auf die Leistung von Brennstoffzellen sollte der Wasserhaushalt auf Zell-, Stack- und Systemebene betrachtet werden. Um ein Modell für eine Vielzahl von Anwendungsfällen zu realisieren, wurde in einem ersten Projekt ein kombiniertes Stack-/Systemmodell für Brennstoffzellen entwickelt, das sich auf die Wassertransporteffekte und die daraus resultierende Membranfeuchte konzentriert. Während das Stackmodell für verschiedene Stackgeometrien und Zellkonfigurationen parametriert werden kann, ist eine Anpassung des Systemmodells durch seine universellen Schnittstellen und den modularen Aufbau an die Bedürfnisse der Entwicklerinnen und Entwickler möglich. Für eine exemplarische Systemtopologie wurde die Anwendbarkeit als

DANKE

Das Forschungsvorhaben "Brennstoffzellen-Kaltstart" (FVV-Projekt-Nr. 1411) wird am Lehrstuhl für Thermodynamik Mobiler Energiewandlungssysteme (TME) der RWTH Aachen University unter der Leitung von Prof. Dr.-Ing. Stefan Pischinger und dem Zentrum für Brennstoffzellentechnik (ZBT) in Duisburg unter der Leitung von Prof. Dr. rer. nat. Angelika Heinzel durchgeführt. Das Projekt wird mit FVV-Eigenmitteln finanziell gefördert. Es wird von einem Arbeitskreis unter der Leitung von Dr.-Ing. Stefan Kaimer (Ford-Werke) begleitet. Die Autoren bedanken sich beim Fördergeber FVV e. V. und allen Projektbeteiligten für die Unterstützung beider Vorhaben. Die Autoren danken außerdem Dr.-Ing. Helge Tielbörger (Siemens Industry Software) für die Leitung des Arbeitskreises im Vorgängerprojekt (FVV-Projekt-Nr. 1298) und Maximilian Schmitz und Julian Toussaint der RWTH Aachen University für die Mitarbeit am hier dargestellten Folgeprojekt. Werkzeug für den Systementwurf und die Komponentendimensionierung sowie für die Analyse von Betriebs- und Regelstrategien demonstriert. In einem zweiten, noch laufenden Projekt wird der zulässige Betriebsbereich des Modells auf kältere Betriebsbedingungen erweitert. Mithilfe von Simulationen basierend auf Computational Fluid Dynamics (CFD) – insbesondere für Stack und Membranbefeuchter – wird der Einfluss von flüssigem Wasser und Eis auf den Gastransport untersucht.

LITERATURHINWEISE

[1] Tinz, S. Gößling, S.; Bahr, M.: Brennstoffzellensystemsimulation – Membranbefeuchtungsmanagement. FVV-Projekt Nr. 1298, Abschlussbericht Nr. H1222, Frankfurt am Main, 2020

[2] Gößling S.: 2-D + 1-D ortsaufgelöste Modellierung von PEM-Brennstoffzellen. Duisburg-Essen, Universität, Dissertation, 2019

[3] Gößling, S.; Nickig, N.; Bahr, M.: 2-D + 1-D PEM fuel cell model for fuel cell system simulations. In: International Journal of Hydrogen Energy 70 (2021) Nr. 46, S. 34874-34882

[4] Ferreira, R. B.; Falcão, D. S.; Oliveira, V. B.; Pinto, A. M. F.: (2015), A onedimensional and two-phase flow model of a proton exchange membrane fuel cell. In: Journal of Chemical Technology & Biotechnology 90 (2015), Nr. 9, S. 1547-1551

[5] Mezedur, M. M.; Kaviany, M.; Moore, W.: Effect of pore structure, randomness and size on effective mass diffusivity. In: AIChE Journal 48 (2002), Nr. 1, S. 15-24

[6] Nam, J. H.; Kaviany, M.: Effective diffusivity and water-saturation distribution in single- and two-layer PEMFC diffusion medium. In: International Journal of Heat and Mass Transfer 46 (2003), Nr. 1, S. 4595-4611

[7] Tinz, S.; Dirkes, S.; Walters, M.; Andert, J.: Fuel Cells. In: Elvers, B.; Schütze, A. (Hrsg.): Handbook of Fuels. Weinheim, Wiley-VCH, 2022
[8] Walters, M.; Wick, M.; Tinz, S.; Ogrzewalla, J.; Sehr, A.; Pischinger, S.; Fuel Cell System Development: A Strong Influence on FCEV Performance. In: SAE International Journal of Alternative Powertrains 7 (2018), Nr. 3, S. 335-350

[9] Walters, M.: Auslegung, Entwicklung und Betrieb eines Brennstoffzellen-Range-Extenders. Aachen, RWTH Aachen University, Dissertation, 2018

READ THE ENGLISH E-MAGAZINE

Test now for 30 days free of charge: www.mtz-worldwide.com

Fundiertes Fachwissen für Ihr Team!

NEU! Direkt online bestellen und bis zu 60 % Rabatt sichern

Die digitale Unternehmenslizenz

Profitieren Sie und Ihre Mitarbeiter von dem geballten Fachwissen von MTZ. Mit einer digitalen Unternehmenslizenz erhalten Sie vollen Zugriff auf die interaktiven E-Magazine und das umfangreiche Online-Archiv. Wählen Sie Ihr individuelles Zugangsmodell für Ihre Team- bzw. Unternehmensgröße.

- ✓ Umfassend: aktuelle Ausgaben plus Fachartikelarchiv seit 1998
- ✓ Kostensparend: exklusive Rabatte für Ihr Team
- ✓ Individuell: das passende Zugangsmodell für Ihre Bedürfnisse
- Flexibel: jederzeit und überall lesen
- ✓ Interaktiv: zusätzliches Spezialwissen durch verlinkte Inhalte
- Rechtssicher: erfüllt das Urheber- und Lizenzrecht







Wir beraten Sie gern: Ramona Wendler

Tel. 0611 7878-126 | magazinlizenzen@springernature.com