

# Abschlussbericht

für das Verbundvorhaben

FC-CAT FUEL CELL CFD AND THROUGH-PLANE MODELLING

Zuwendungs-Empfänger:

**AVL Deutschland GmbH  
Peter-Sander-Straße 32  
55252 Mainz-Kastel**

Förderkennzeichen:

**03SF0579C**

Vorhabensbezeichnung:

**FC-CAT FUEL CELL CFD AND THROUGH-PLANE MODELLING**

Laufzeit des Vorhabens:

**01.07.2019 – 30.06.2024**

Berichtszeitraum:

**01.07.2019 – 30.06.2024**

**Autor:**

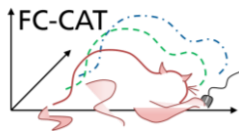
Dr.-Ing. Rainer Fiereder, M.Sc. Michael Reichl,  
M.Sc. Gabriela Vaz, M.Sc. Boyu Yang

Die Verantwortung für den Inhalt dieser Veröffentlichung liegt beim Autor.

GEFÖRDERT VOM

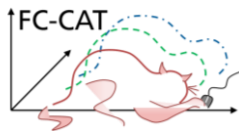


**Bundesministerium  
für Bildung  
und Forschung**



## Inhaltsverzeichnis

I.	Kurzbericht.....	3
1.	Aufgabenstellung .....	3
1.1.	Motivation.....	3
1.2.	Gesamtziel des Vorhabens .....	4
1.3.	Voraussetzungen des Vorhabens.....	4
1.4.	Planung und Ablauf des Vorhabens, Zusammenarbeit mit anderen Stellen .....	4
2.	Stand von Wissenschaft und Technik.....	5
2.1.	Stand der Wissenschaft und Technik .....	5
2.2.	Abgrenzung zu anderen laufenden Forschungsvorhaben .....	6
II.	Sachbericht .....	7
1.	Ergebnisse .....	7
1.1.	AP 8 - Entwicklung 3D-CFD-Simulation.....	7
1.1.1	AP 8.1 Theoretische Beschreibung vom PEM-BZ-Modell in AVL FIRE .....	7
1.1.2	AP 8.2 Einarbeitung in Messmethoden.....	8
1.1.3	AP 8.3 Analyse des 1D-Through-Plane Modells.....	9
1.1.4	AP 8.4 Analyse des 2D-Along-The-Channel Modells.....	10
1.1.5	AP 8.5 Schnittstelle für Modellkopplung .....	10
1.1.6	AP 8.6 Implementierung von 1D-Through-Plane Modell in AVL CRUISE M .....	10
1.1.7	AP 8.7 Implementierung 2D-Along-the-Channel Modell in AVL CRUISE M.....	11
1.1.8	AP 8.8 Validierung des verbesserten CFD-Modells in AVL FIRE .....	11
1.1.9	AP 8.9 Methodenentwicklung für das verbesserte CFD-Modell in AVL.....	23
1.1.10	AP 8.10 Erweiterung der AVL FIRE Materialdatenbank PDB .....	29
1.1.11	AP 8.11 Implementierung 3D-Modell In FIRE.....	30
1.1.12	AP 8.12 Knowledge-Transfer und Support für AVL FIRE .....	30
1.1.13	AP 8.13 Methodenentwicklung für einen kombinierten 1D-3D Workflow.....	30
2.	Schlussfolgerungen.....	32
3.	Anschlussfähigkeit .....	33
3.1.	Verwertbarkeit .....	33
3.1.1	Wissenschaftliche Verwertung .....	33
3.1.2	Nutzung und Verwertung.....	33
3.2.	Veröffentlichungen aus dem FC-CAT-Projekt.....	33
4.	Zusammenfassung.....	33
5.	Literaturverzeichnis .....	34
6.	Danksagung .....	35
A.	Verwendete Abkürzungen .....	35



AVL Deutschland GmbH

## I. Kurzbericht

### 1. Aufgabenstellung

#### 1.1. Motivation

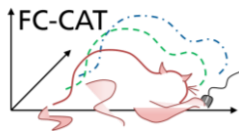
Die Mobilität befindet sich in einem sehr dynamischen Wandlungsprozess hin zu emissionsfreien, elektrischen Antrieben. Diese Transformation erfasst den Individualverkehr genauso wie den ÖPNV und den Lastverkehr. Ebenso sind alle Verkehrsträger betroffen vom Auto, Bus, LKW, Zug, Schiff und Flugzeug.

Eine zukünftig bedeutende Antriebsform wird die Brennstoffzelle darstellen. Insbesondere die Vorteile der kurzen Tankzeiten und der hohen Energiespeicherdichte in Wasserstoff-Hochdrucktanks, welche zu langen Reichweiten führen, werden sich für Langstreckenfahrzeuge, Busse, LKW etc. durchsetzen. So hat Korea 2019 eine Roadmap veröffentlicht, die 0,7 Mio. Brennstoffzellen-Fahrzeuge bis zum Jahr 2025 vorsieht und 6,2 Mio. bis zum Jahr 2040. Japan plant 20.000 Fahrzeuge bis zum Olympia-Jahr 2020 und China wird 1.000 Wasserstoff-Tankstellen bis zum Jahr 2030 bauen.

Inzwischen sind mit dem Daimler GLC, dem Toyota Mirai, Hyundai-Fahrzeugen ix35-fcell und NEXO sowie dem Honda Clarity erste Kleinserienfahrzeuge auf dem Markt. Alstom hat den ersten Brennstoffzellen-Zug in Deutschland in Betrieb gebracht. Nikola und Hyundai kündigen kurzfristig Brennstoffzellen-LKW in der Schweiz an. Daimler, Solaris, Van Hool und Wright entwickeln Brennstoffzellen-Busse



Abbildung 1: Toyota Mirai (Quelle: Toyota)



AVL Deutschland GmbH

## 1.2. Gesamtziel des Vorhabens

Die ständige Weiterentwicklung neuer Materialien und Fabrikationsprozesse für die Brennstoffzelle erhöhen sukzessive deren Leistungsdichten. Daraus resultieren neue Herausforderungen für den Betrieb der Brennstoffzellensysteme wie beispielsweise dem Wasser- und Wärmemanagement, welche mittels guter Modelle quantifiziert und abgebildet werden können. Neue Materialien, veränderte Schichtstrukturen und neuartige Designmöglichkeiten verursachen grundlegende Änderungen in den Transport- und elektrochemischen Eigenschaften der funktionalen Schichten, welche in diesem Projekt detailliert untersucht werden soll.

Daher ist das Projektziel die Analyse und quantitative Beschreibung der funktionalen Schichten mit neuen Materialien durch experimentelle ex-situ und in-situ Charakterisierung, sowie die Entwicklung neuer Modelle (1D, 2D) zur Beschreibung der dynamischen Prozesse in diesen neuen Strukturen/Schichten bzw. die Erweiterung eines bestehenden stationären 3D-Modells für eine verbesserte realitätsnahe Abbildung der stattfindenden Prozesse.

## 1.3. Voraussetzungen des Vorhabens

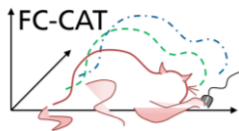
Im 7. Energieforschungsprogramm wird im Kapitel 6.1 Internationalisierungsstrategie der Forschungspolitik auf die Bedeutung der internationalen Zusammenarbeit eingegangen. Das hier beantragte Projekt steht in einer historischen Projektreihe mit den Vorhaben PEM-CaD, GECKO und DEKADE, mit denen bereits eine zehnjährige Zusammenarbeit der kanadischen Brennstoffzellen-Wissenschaft begründet wurde. Diese Zusammenarbeit und der wissenschaftliche Austausch sollen fortgesetzt werden. Insbesondere die kanadischen Wissenschaftler Marc Secanell, University of Alberta, und John Pharoa, Queens University, forschen seit vielen Jahren an der Simulation von Brennstoffzellen. Beide sind dem hier vorgestellten deutschen Konsortium seit langem bekannt und sollen regelmäßig eingebunden werden. Kanada ist eines der in Bezug auf die PEM-Brennstoffzelle führenden Länder mit dem ehemaligen Tochterunternehmen AFCC von Daimler und Ford, dem neu in Vancouver aufgebauten AVL-Standort, Ballard, Greenlight und Hydrogenics, sowie ionomr, um nur einige zu nennen.

Des Weiteren wird im 7. Energieforschungsprogramm in Kapitel 4.3 Systemintegration: Netze, Speicher, Sektorkopplung auf die Transformation unseres Energiesystems hin-gewiesen, welche eine Kopplung u.a. der Sektoren Strom mit der Mobilität und auch der Wärmeversorgung erforderlich macht. In der Sektorenkopplung wird Wasserstoff eine Schlüsselrolle einnehmen als Langzeitspeicher. Zusammen mit der großskaligen Wasserstofferzeugung wird die Brennstoffzelle vor allem in der Mobilität in die Umsetzung kommen. Das hier vorgestellte Projekt wird zur Technologieentwicklung von Brennstoffzellen wichtige Beiträge leisten

## 1.4. Planung und Ablauf des Vorhabens, Zusammenarbeit mit anderen Stellen

Die zu Beginn des Projekts initiierten Regelaustauschtermine mit den Partnern und den Hochschulen, welche alle 4 bzw. 6 Wochen per Teams-Meeting stattfinden, wurden fortgeführt. Zudem wurden verschiedene themenspezifische Termine eingerichtet, welche in kürzeren Abständen stattfinden. Darüber hinaus fand jede 2 Wochen ein kurzes Austauschmeeting mit den Projektpartnern statt. Durch diese Regelaustauschtermine und den direkten Support in der Anwendung der Simulationssoftware AVL FIRE M hat eine enge Zusammenarbeit mit den Projektpartnern stattgefunden.

Am 26.05.2025 fand das Projektabschlusstermin statt. Alle Industrie- und Hochschulpartnern haben an dem Termin teilgenommen.



Das Vorhaben ist weitestgehend nach der ursprünglich Arbeits-, Zeit- und Kostenplanung gelaufen. Ein validiertes Simulationswerkzeug mit entsprechendem Workflow und Methoden liegt vor.

## 2. Stand von Wissenschaft und Technik

### 2.1. Stand der Wissenschaft und Technik

Die Brennstoffzellentechnologie entwickelt sich stetig weiter. So gibt es Forschungsarbeiten auf unterschiedlichen Gebieten, um die Leistungsfähigkeit und Langzeitstabilität unter gleichzeitiger Kostensenkung zu verbessern. Erfolgreich konnte in den letzten 10 Jahren beispielsweise die Katalysatorbeladung halbiert, deren Aktivität mittels Legierungskatalysatoren verbessert und die protonenleitende Membran von 25  $\mu\text{m}$  auf 8  $\mu\text{m}$  reduziert werden. Als verwendetes Elektrolytmaterial kommen immer mehr sogenannte „short-side-chain“-Ionomere zum Einsatz, welche ein verändertes Wasseraufnahme-verhalten und somit veränderte Protonenleitfähigkeit aufweisen. Die Dicke der Gaskonzeptionschicht liegt nur noch bei 50-70% der Dicke von vor 10 Jahren.

Diese erfreulichen Entwicklungen von neuen Materialien für die funktionalen Schichten verbessern die Leistungsfähigkeit der Brennstoffzelle und verschieben somit die dominierenden Verlustmechanismen auf bislang nicht limitierende Prozesse, welchen bis dato keine Beachtung geschenkt wurde, bzw. deren mathematische Beschreibung und Implementierung in bestehenden Modellen neu überdacht werden muss.

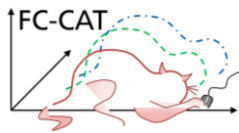
Zur Strömungssimulation in Brennstoffzellen existieren kommerzielle Produkte (AVL FIRE, StarCCM+, Fluent Ansys) sowie Open-Source Software (OpenFOAM, OpenFCST). Damit können auf Zell- und Stackebene Strömungsgeschwindigkeiten, Gaskonzentrationen und Wärmemanagement betrachtet werden. Typischerweise werden diese Programme genutzt, um neue Geometrien der Bipolarplatten zu evaluieren. Die kommerziell erhältlichen Software-Tools sind nicht dazu gedacht, eigene Modellierungsaspekte und funktionale Zusammenhänge in das Modell einzuarbeiten. Multiphysics-Programme wie COMSOL bieten die Möglichkeit, selbst entwickelte Modelle mit den konventionellen Strömungsgleichungen zu koppeln, um spezifische Brennstoffzellen-vorgänge detaillierter zu simulieren. Der Löser von COMSOL basiert allerdings - im Gegensatz zu den CFD-Programmen, welche auf dem Finite Volumen Verfahren aufbauen - auf der Finiten Elemente Methode (FEM), welche für Simulationen auf Zell- und Stackebene aufgrund der hohen Anzahl notwendiger Knotenpunkte sehr rechen- und speicherintensiv ist und somit eher ungeeignet.

Neben den kommerziellen CFD-Programmen gibt es Brennstoffzellen -Simulationstools wie OpenFCST oder FastFC, welche Open-Source angeboten werden. Der Umgang dieser Tools setzt jedoch Expertenwissen bzgl. der Brennstoffzellentechnologie, aber auch der Computertechnologie voraus. Zudem wird FastFC seit längerem nicht mehr weiterentwickelt.

Zur Analyse von elektrochemischen Impedanzspektren werden bis heute in der Regel Ersatzschaltbilder herangezogen, deren physikalische Interpretationen der einzelnen Elemente nicht möglich ist. Inhomogenitäten innerhalb der Schichtdicken und in-plane Effekte entlang des Gaskanals haben einen nicht-vernachlässigbaren Einfluss auf gemessene Spektren, können aber nur über physikalische Modellierung sinnvoll abgebildet werden.

Die ex-situ Charakterisierung von Brennstoffzellen-Komponenten ist in der Wissenschaft recht gut etabliert. Dabei hängt der Stand der Charakterisierung von dem Aufwand der jeweiligen Methode ab. So sind beispielsweise Katalysatorpartikel auf Kohlenstoffträgern im Nanometerbereich weniger gut erforscht als die Mikroskala der GDL.

Untersuchungen an Membranen [1] gestalten sich ebenfalls schwierig, aufgrund der sensiblen Eigenschaften der Polymere, der Nanoskala und der schlechten Leitfähigkeit in der Elektronenmikroskopie von Polymeren. Prinzipiell gibt es zu jeder Komponente bereits

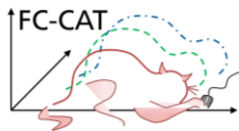


AVL Deutschland GmbH

gewisse ex-situ Charakterisierungen. Aufgrund der unterschiedlichen Größen-ordnungen werden für jede aktive Schicht der Brennstoffzelle (GDL, MPL, CL, Membran) auch unterschiedliche Charakterisierungsmethoden verwendet [2]: Für die GDL werden typischerweise Methoden mit Mikrometer-Auflösung verwendet, wie beispielsweise  $\mu$ CT, bei der MPL und CL sind aufgrund der kleineren Strukturen im Bereich von wenigen Nanometern elektronenmikroskopische Methoden nötig [3]. In der Membran ist die Phasenseparation nicht mehr mit optischen Methoden auflösbar, daher werden die Eigenschaften z.B. mit spektroskopischen oder elektrochemischen Methoden bestimmt [4]. Jedoch fehlt dabei der Übertrag in die Simulation, d.h. die Aufbereitung hin zur Schnittstelle der Simulation. So müssen sich Benutzer der Simulationssoftware zunächst im Detail mit der Theorie beschäftigen, um die Parameter zu bestimmen. Gleichzeitig fehlt auf der Simulationsseite die Information, welche Parameter erfasst werden können. Das hier geplante Zusammenspiel von Charakterisierung und Simulation ist demnach einzigartig.

## 2.2. Abgrenzung zu anderen laufenden Forschungsvorhaben

Es sind kein Vorhaben bekannt, die eine vollständig durchgängige Simulation von Brennstoffzellen MEAs und den konsequenten Ansatz von 1D und 3D-Simulation in Zusammenspiel von Charakterisierung verfolgen, wie es in dem beantragten Vorhaben geschehen ist.



## II. Sachbericht

### 1. Ergebnisse

#### 1.1. AP 8 - Entwicklung 3D-CFD-Simulation

##### 1.1.1 AP 8.1 Theoretische Beschreibung vom PEM-BZ-Modell in AVL FIRE

In den PEM-BZ Modells in AVL FIRE werden verschiedene physikalische Transportprozesse und Reaktionen berücksichtigt. Dazu gehört die Zweiphasenströmung in Strömungskanälen und porösen Schichten (GDL, MPL, CL), die auf dem Eulerschen Mehrphasenansatz basiert. Der Kapillareffekt in porösen Schichten sowie der Phasenwechsel zwischen Gas und Flüssigkeit (Verdampfung/Kondensation) spielen ebenfalls eine Rolle.

Die Impulsübertragung erfolgt zwischen den Phasen in Strömungskanälen und über das Konzept der relativen Permeabilität in porösen Schichten. Der Transport von Gasspezies findet sowohl in Strömungskanälen als auch in porösen Schichten statt und wird durch die Maxwell-Stefan-Gleichungen beschrieben. Zusätzlicher Diffusionswiderstand in porösen Schichten entsteht aufgrund von Tortuosität und der Anisotropie der Porosität.

Der Wärmetransport umfasst den Dreiphasen-Wärmetransport, wobei poröse Feststoffe als zusätzliche Phase behandelt werden. Wärmequellen resultieren aus ohmscher Erwärmung, elektrochemischen Reaktionen und Phasenwechseln. Die Wärmeübertragung erfolgt zwischen den Phasen Gas/Flüssigkeit, Gas/Feststoff und Flüssigkeit/Feststoff.

Der Transport von gelöstem Wasser in der Ionomerphase umfasst elektroosmotischen Widerstand sowie diffusive und konvektive Transportprozesse. Der Massentransport zwischen Gas und gelöster Phase in der Katalysatorschicht (CL) beinhaltet zusätzlich Desorption. Gelöste Gasspezies werden in der Ionomerphase transportiert, und alle Gaskomponenten durchqueren die Membran mittels Diffusion und Konvektion. Der Massentransfer zwischen Gas- und gelöster Phase in der Katalysatorschicht ist ebenfalls von Bedeutung.

Der elektronische Ladungstransport in der Festphase (CL, MPL, GDL, BP) ist anisotrop, ebenso wie der ionische Ladungstransport in der Ionomerphase (MEM, CL). Der Wärmetransport in Feststoffen mit ohmscher Erwärmung ist ebenfalls anisotrop. Elektrochemische Reaktionen in der Katalysatorschicht werden durch die Butler-Volmer-Gleichung und im Agglomeratmodell über das Agglomerat integriert beschrieben. Parasitäre Redoxreaktionen an der Gegenelektrode erfolgen durch Gasübergang. Der Reaktantentransport im Agglomerat (nur im Agglomeratmodell) umfasst die O<sub>2</sub>- und H<sub>2</sub>-Diffusion durch den Ionomerfilm in das Agglomerat sowie die elektrochemische Reaktion im Agglomerat, die von der lokalen Reaktantenkonzentration abhängt. Der Ionentransport erfolgt in der Ionomerphase (MEM, CL).

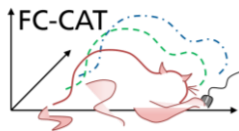
Wasser existiert in drei Phasen: gasförmig, flüssig und gelöst. Der Stoffaustausch zwischen allen drei Phasen bestimmt den Wasserhaushalt der Brennstoffzelle, der einen entscheidenden Einfluss auf die lokale Stromdichte und damit auf die Zelleistung hat.

Das Modell basiert auf mehreren Annahmen:

Erstens wird das poröse Medium durch den Volumenmittlungsansatz charakterisiert, wobei durchschnittliche Eigenschaften wie Porosität, Tortuosität und Permeabilität berücksichtigt werden.

Zweitens treten parasitäre Redoxreaktionen durch Reaktantenübertritt an der gegenüberliegenden Elektrode auf, was zu einem gemischten Potential führt. An der positiven Elektrode findet die Standard-Wasserstoffoxidaionsreaktion statt:





bei der Wasserstoff vollständig verbraucht wird. An der negativen Elektrode erfolgt die Zwei-Elektronen-Sauerstoffreduktionsreaktion:



wobei eine geringe Menge Sauerstoff in der negativen Elektrode verbleibt.

Das Agglomeratmodell beschreibt kugelförmige Agglomerate, die aus mit Platin dispergiertem Kohlenstoff bestehen und von einem dünnen Ionomerfilm bedeckt sind. Innerhalb des Agglomerats gibt es keine Änderungen der Potenziale (elektronisch, ionisch, Gleichgewicht) und der Temperatur, und es existiert keine Gasphase.

Detaillierte theoretische Beschreibung aller Transport- und Reaktionsgleichungen sowie Quellterme des PEM-BZ Modells in AVL FIRE M und der wichtigsten numerischen Aspekte (z.B. Diskretisierung, Lösungsverfahren) sind in der Softwaredokumentation [5] und in einer Vielzahl von Veröffentlichungen vorhanden, s. [6, 7, 8].

Der Projektpartner Fraunhofer ISE wurde in München im Umgang mit der CFD-Software AVL FIRE M geschult. Desweiteren wurden bei bilateralen Webkonferenzen und einem BZ-Modultraining in Graz dem Projektpartner Fraunhofer ISE ein persönlicher Austausch mit den Entwicklern des PEM-BZ-Modells von AVL FIRE M ermöglicht. Hierbei konnte offene Fragen direkt geklärt werden und ein direkter Informationsfluss etabliert werden.

### 1.1.2 AP 8.2 Einarbeitung in Messmethoden

Die Einarbeitung in die Messmethoden zur Charakterisierung von PEM-Brennstoffzellen umfasste Literaturrecherchen hinsichtlich von ex-situ und in-situ Messungen bezüglich der Charakterisierung von Materialien und elektrochemische, chemische und physikalische Messmethoden zur Bestimmung der Gesamtperformance von Brennstoffzellen. Dabei konnten auch Synergien des Forschungsprojekt genutzt werden und Literatur und Erfahrungen mit den Projektpartnern ausgetauscht werden.

Neben der Unterscheidung der Messmethoden in in-situ und ex-situ Messungen können die Messtechniken auch in elektrochemische, chemische und physikalische Methoden unterteilt werden. Weit verbreitete Anwendungen für die elektrochemische Charakterisierung von PEM-Brennstoffzellen sind die Polarisationskurve, die elektrochemische Impedanzspektroskopie und die Messung der ohmschen Verluste bei Unterbrechung des Stromflusses. Vor allem für die elektrochemische Impedanzspektroskopie existieren verschiedenste Ansätze zur Messmethodik. So kann entweder eine Spannungsschwankung aufgebracht werden und die entsprechende Änderung der Stromdichte gemessen werden oder entgegengesetzt während auch verschiedene Methoden zur Gaszufuhr existieren. Üblicherweise wird die Messung bei einem Betrieb von  $\text{H}_2/\text{O}_2$  durchgeführt, aber auch eine  $\text{H}_2/\text{H}_2$ ,  $\text{O}_2/\text{O}_2$  oder  $\text{H}_2/\text{N}_2$ -Zufuhr wird je nach zu untersuchender Fragestellung genutzt [9]. Weitere elektrochemische Methoden sind die Cyclovoltammetrie und die CO-Stripping Voltammetrie zur Bestimmung der elektrochemischen Oberfläche der Katalysatorschicht [10], die lineare Sweep-Voltammetrie zur Betrachtung von Wasserstoff Crossover über Membran und die Entladung der Kathode durch eine Unterbrechung der Reaktanzzufuhr zur Bestimmung des Widerstandes der Membran-Elektroden-Einheit und des Diffusionskoeffizienten. Alle vorhergehenden elektrochemischen Messmethoden können in-situ durchgeführt werden [11].

Während die elektrochemischen Methoden auch eingesetzt werden, um die Gesamtperformance der Zelle zu bestimmen, können mit physikalischen und chemischen Methoden einzelne Phänomene beziehungsweise Komponenten untersucht werden. Über Druckverlustmessungen kann eine Flutung oder Austrocknung der Zelle detektiert werden. Mittels Gaschromatographie ist es möglich lokal die Konzentrationen von Wasserstoff,

Sauerstoff und Wasser zu bestimmen, allerdings ist dies auf einen stationären Zustand beschränkt. Ebenfalls werden zur Bestimmung der Wasserverteilung in der Zelle bildgebende Verfahren mit Neutronen oder Magnetresonanztomographie eingesetzt. Um einen direkten optischen Zugang zu bekommen und ein besseres Verständnis für die Fluidverteilung in der Zelle zu bekommen, existieren auch Ansätze transparente Testzellen zu entwickeln. Infrarotkameras und Mikro-Temperatursensoren können benutzt werden, um die lokale Temperaturverteilung zu messen. Zur lokalen Messung der Stromdichte existieren verschiedene Ansätze, wie Teilung der Membran-Elektroden-Einheit, eine Segmentierung der kompletten Zelle oder die Nutzung einer Leiterplatte für einen segmentierten Stromabnehmer [12].

### 1.1.3 AP 8.3 Analyse des 1D-Through-Plane Modells

Das in AP 2.2 entwickelte 1D-Through-Plane Modell wird genau analysiert und mit dem vorhandenen Modell von AVL FIRE auf theoretischer Basis verglichen. Das am Fraunhofer ISE im AP2 entwickelte Modell wurde in Form eines Berichtes [13] an die AVL übergeben und anhand dieser Dokumentation in einen Webmeeting diskutiert.

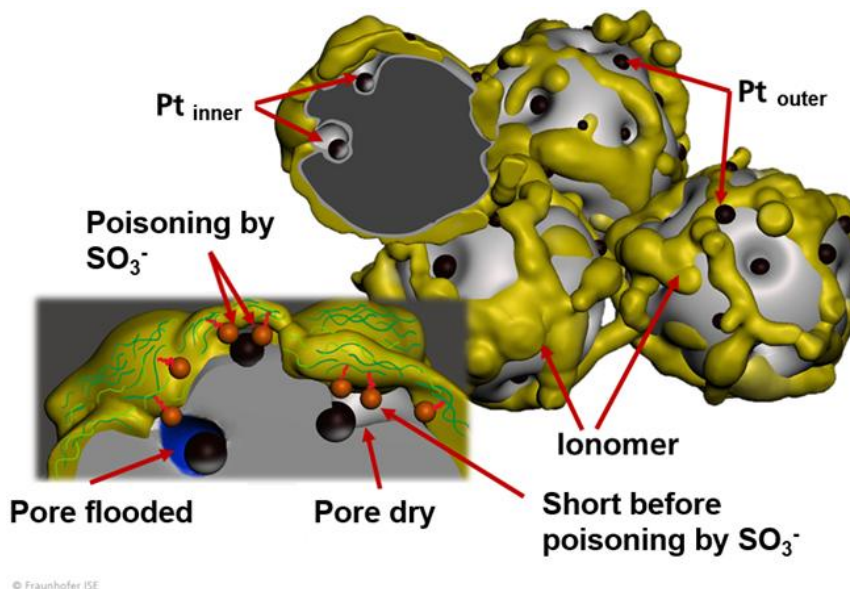
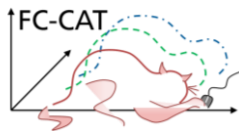


Abbildung 2: 1D-Through-Plane Modell [13]

In einen weiteren Schritt würde das in Python umgesetzte Modell in Form des Quellcode übergeben und eingehend analysiert.

Hierbei zeigte sich, dass das Fraunhofer-ISE Modell eine höhere Modellgüte als unser Standard-Agglomeratmodell aufweist.

Dieses Modell basiert auf einer Größenverteilung von Pt-Partikeln und berücksichtigt die Vergiftung des Ionomers durch SO<sub>3</sub><sup>-</sup>. Es bezieht die Position der Pt-Partikel mit ein, ob sie sich auf der Kohlenstoffoberfläche oder in einer Kohlenstoffpore befinden. Die Partikel sind in Kohlenstoffporen unterschiedlicher Größe verteilt, wobei der Überflutungszustand der Kohlenstoffporen berücksichtigt wird. Zudem umfasst das Modell die katalytische Aktivität der Pt-Partikel.



AVL Deutschland GmbH

### 1.1.4 AP 8.4 Analyse des 2D-Along-The-Channel Modells

Aufgrund von Verzögerungen im AP3.1 bei Projektpartner Fraunhofer ISE lag zum relevanten Projektmeilenstein noch kein 2D-Along-The-Channel Modell vor. Daher wurde für die weiteren Projektschritte eigene Modellierungsansätze herangezogen und umgesetzt.

### 1.1.5 AP 8.5 Schnittstelle für Modellkopplung

Die Schnittstellen zur Modellkopplung sind in AVL FIRE M über eine Userfunktion verfügbar. Diese bietet die Möglichkeit über FORTRAN 77 benutzerspezifische Modelle einzupflegen und diese zum Strömungslöser von AVL FIRE M hinzu zu Kompilieren.

Über diese Userfunktion stehen mehrere Schnittstellen zur Modellierung der Reaktionskinetik, der Wasserentstehung in der Membran, der elektrochemischen Kinetik auf Kathoden- und Anodenseite und der Wärmequellen auf Kathoden- und Anodenseite. Die im Projekt genutzte Schnittstelle zur elektrochemischen Kinetik, welche zur Implementierung des ISE 1D-Modells aus AP 8.3 genutzt wird, ersetzt die Berechnung der volumetrischen Stromdichte auf Kathodenseite.

### 1.1.6 AP 8.6 Implementierung von 1D-Through-Plane Modell in AVL CRUISE M

Das in CRUISE M implementierte Brennstoffzellen-Stackmodell ermöglicht eine detaillierte Betrachtung der thermodynamischen und elektrochemischen Prozesse in den MEA-Lagen der PEM-Brennstoffzelle. Aspekte wie die Gasströmung in der Anode und der Kathode, das Aufheizverhalten des Stacks und die elektrochemischen Prozesse bzw. Transportprozesse in der Membran, im Katalysator und in der Gasdiffusionsschicht werden anhand von Modellgleichungen beschrieben. Der Zusammenhang zwischen der Zellbeschaffenheit, dem Betriebszustand des Stacks und der anliegenden Nebenaggregate sowie der resultierenden Leistung der Zelle bzw. des Stacks kann somit auf physikalisch-chemischer Ebene untersucht werden. Größen zur Quantifizierung charakteristischer Vorgänge oder Zustände wie z.B. der Membranhydratation, der Flüssigwasserbildung in der Katalysatorschicht, der Konzentration der Reaktanden im Gasstrom und der Stickstoff-Crossdiffusion können sowohl zeitlich und eindimensional räumlich aufgelöst werden.

Das Modellverhalten wurde anhand sowohl in der „Stack only“-Konfiguration als auch im Verbund mit Nebenaggregaten im „Balance-of-Plant“-Modell und im Gesamtfahrzeugmodell plausibilisiert und verifiziert.

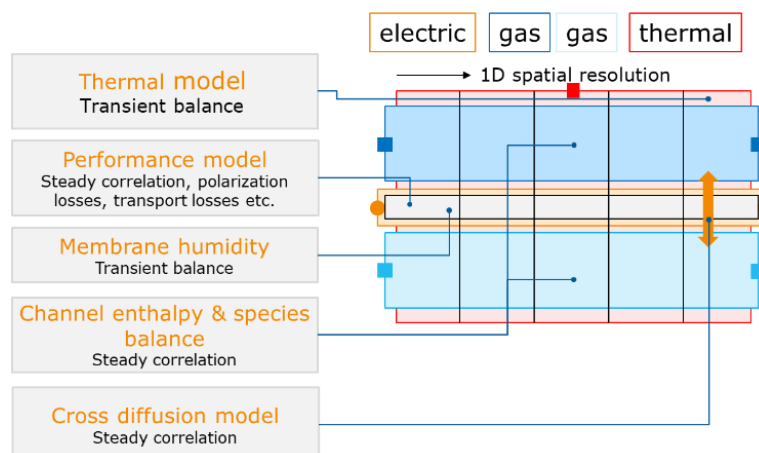
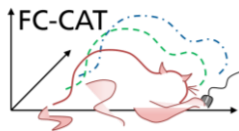


Abbildung 3: Generische Übersicht über die Submodelle



### 1.1.7 AP 8.7 Implementierung 2D-Along-the-Channel Modell in AVL CRUISE M

Das bestehende Brennstoffzellenstapelmodell wurde erweitert, um die räumliche Verteilung des Gasmediums und des Kühlmittels zu berücksichtigen, was die Berücksichtigung verschiedener Strömungsmuster und -anordnungen ermöglicht. Dadurch ist es möglich, die räumliche Verteilung über die Zelloberfläche zu visualisieren, was eine genauere Darstellung des Verhaltens des Brennstoffzellenstapels erlaubt. Dieses aktualisierte Modell kann ein umfassenderes Verständnis für das Verhalten des Brennstoffzellenstapels unter verschiedenen Betriebsbedingungen liefern. Die Möglichkeit, verschiedene Strömungsmuster und -anordnungen zu berücksichtigen, ermöglicht eine bessere Optimierung des Brennstoffzellenstapels, was zu einer verbesserten Leistung und Effizienz führt.

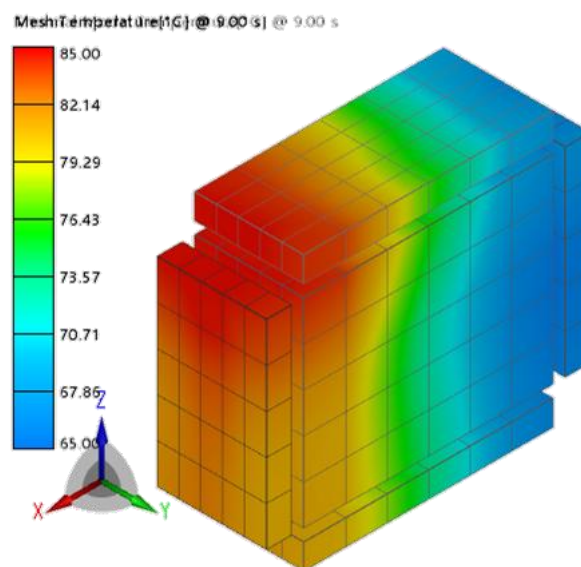
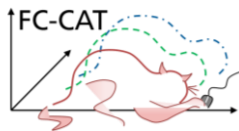


Abbildung 4: Örtliche Temperaturverteilung im Stack

### 1.1.8 AP 8.8 Validierung des verbesserten CFD-Modells in AVL FIRE

#### 1.1.8.1. Basisvalidierung „Straight Channel Cell“-Modells

Für die erste Validierung der in AP 8.11 implementierten Modellerweiterungen wurde anhand eines generischen „Straight Channel Cell“-Modells, s. Abbildung 5, durchgeführt.



AVL Deutschland GmbH

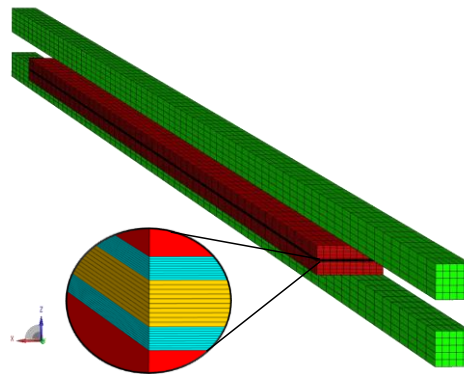


Abbildung 5: Rechennetz des „Straight Channel Cell“-Modells

Die geometrischen Parameter der untersuchten Zelle mit einer aktiven Fläche von 50 mm<sup>2</sup> sind, einer Membrandicke von 20µm, 10µm katalytische Schicht und 200µm GDL-Dicke. Die untersuchten Betriebszustände sind in Tabelle 1 aufgeführt.

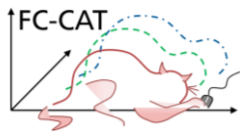
Tabelle 1: Betriebszustände

Zellspannung	0.1V-0.9V
Einlass- und Wandtemperaturen	80 °C
Relative Feuchte am Einlass Kathode/Anode	0.3 / 0.5
Stöchiometrie am Einlass Kathode/Anode	1.5/1.3
Druck am Auslass Kathode/Anode	2.3 bar/2.5 bar

Tabelle 2 zeigt die für die Validierung herangezogenen Modellparameter des Fraunhofer CL-Modells. Die Partikelgrößenverteilung, der Ladungsübertragungskoeffizient an der Kathode sowie die Gleichgewichtsspannung werden hier abweichend vom Originalmodell mit den Standardparametern von FIRE M belegt.

Tabelle 2: Modellparameter für das CL-Modell

Partikelgrößenverteilung	Normalverteilung mit $r_{\text{mean}}=2\text{nm}$ und $\sigma=0.5\text{nm}$
Anzahl Poren	6 (3, 3.5,4,4.5, 5, 5.5 nm)
Partikelverteilung	50% an der Oberfläche, Rest Gleichverteilt in den Poren
Ionomerfilmdicke	4 nm
Ionomerfilm Diffusionskoeffizient für O <sub>2</sub> an der Oberfläche	9e-13 m <sup>2</sup> /s
Reaktionsgeschwindigkeit der Sauerstoffreduktion	1e-12 m/s
Ladungsübertragungskoeffizient Kathode	0.67*
Gleichgewichtsspannung	Aus Nernst-Gleichung mit Referenzwert 1.18 V bei 80°C *



AVL Deutschland GmbH

Maximale SO <sub>3</sub> - Bedeckung von Pt-Partikeln auf der Oberfläche:	0.95
Potentialabhängigkeit der SO <sub>3</sub> -Bedeckung (Steigung)	12
Potenzial der halben SO <sub>3</sub> -Bedeckung bezogen auf max. SO <sub>3</sub> -Bedeckung	0.6 V
Öffnungsradiusverhältnis der Pore	0.9
Ionenleitfähigkeit in der Pore	1 S/m
Porentiefe	4 nm
Diffusionskoeffizient von O <sub>2</sub> in Wasser	2.04e-13 m <sup>2</sup> /s

\* aus FIRE M

In Abbildung 6 ist die Polarisationskurve für das untersuchte Modell dargestellt. Hierbei wird neben der gesamten Polarisationskurve auch der jeweilige Anteil der Partikel in den Poren (grün) und an der Oberfläche (blau) der Supportstruktur separat aufgeführt. Im Bereich der hohen Spannungen wird in dieser Darstellung der Effekt der Ionomervergiftung durch SO<sub>3</sub>- ersichtlich der zu einer starken Reduktion des Potentials für die äußeren Partikel führt.

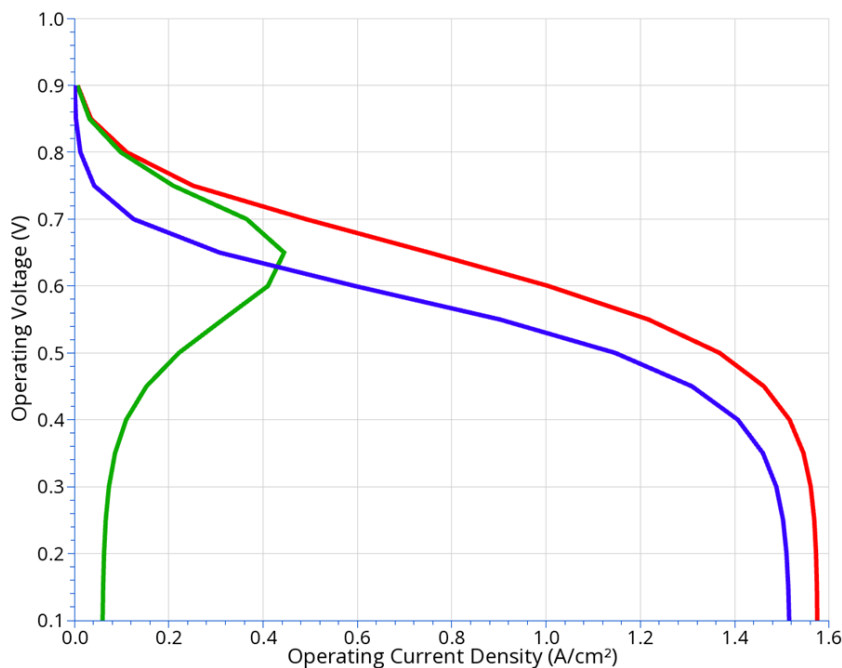
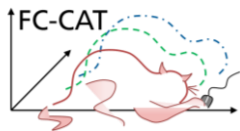


Abbildung 6: Polarisationskurven mit den Beiträgen der inneren (grün) und äußeren Partikel (blau)

Die Pt-Partikel in den Poren sind davon wesentlich weniger beeinflusst. Bei diesen zeigt sich im Bereich von 0.65 V ein ausgeprägtes Maximum des Beitrages der innenliegenden Partikel an der Stromdichte. Dieser fällt bei niedrigeren Spannungen stark ab, was auf die Begrenzung des verfügbaren Sauerstoffs innerhalb der Pore zurückzuführen ist.

Abbildung 7 zeigt ausgewählte Ergebnisse wie Spannungs-, Sauerstoff-, Feuchte- und Temperaturverteilung in der „Straight Channel Cell“. Hierbei wird jeweils ein äußerer (GDL-



AVL Deutschland GmbH

nah) und ein innerer (Membrane-nah) Schnitt durch die katalytische Schicht für verschiedene Betriebsspannungen betrachtet.

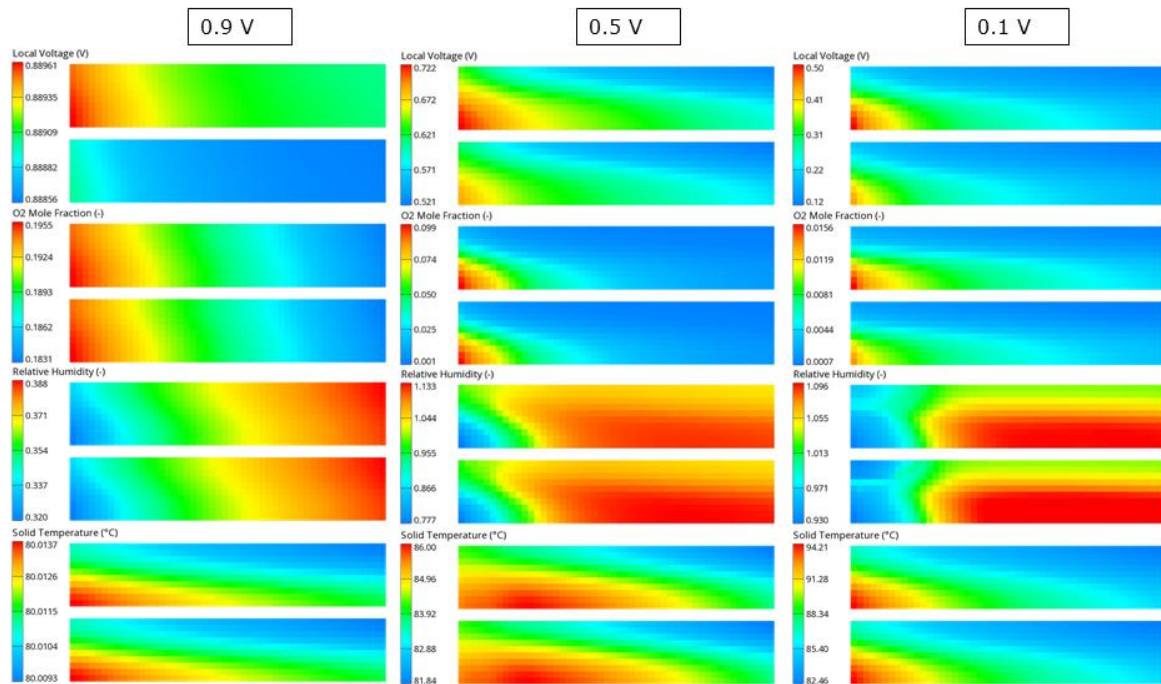


Abbildung 7: Ausgewählte Ergebnisse der Verifikation an der „Straight Channel Cell“. CL an der GDL (oben) und Membran (unten)

Die Eignung des implementierten Modells, das grundsätzliche Betriebsverhalten der Zelle wiederzugeben wird, hierbei aufgezeigt.

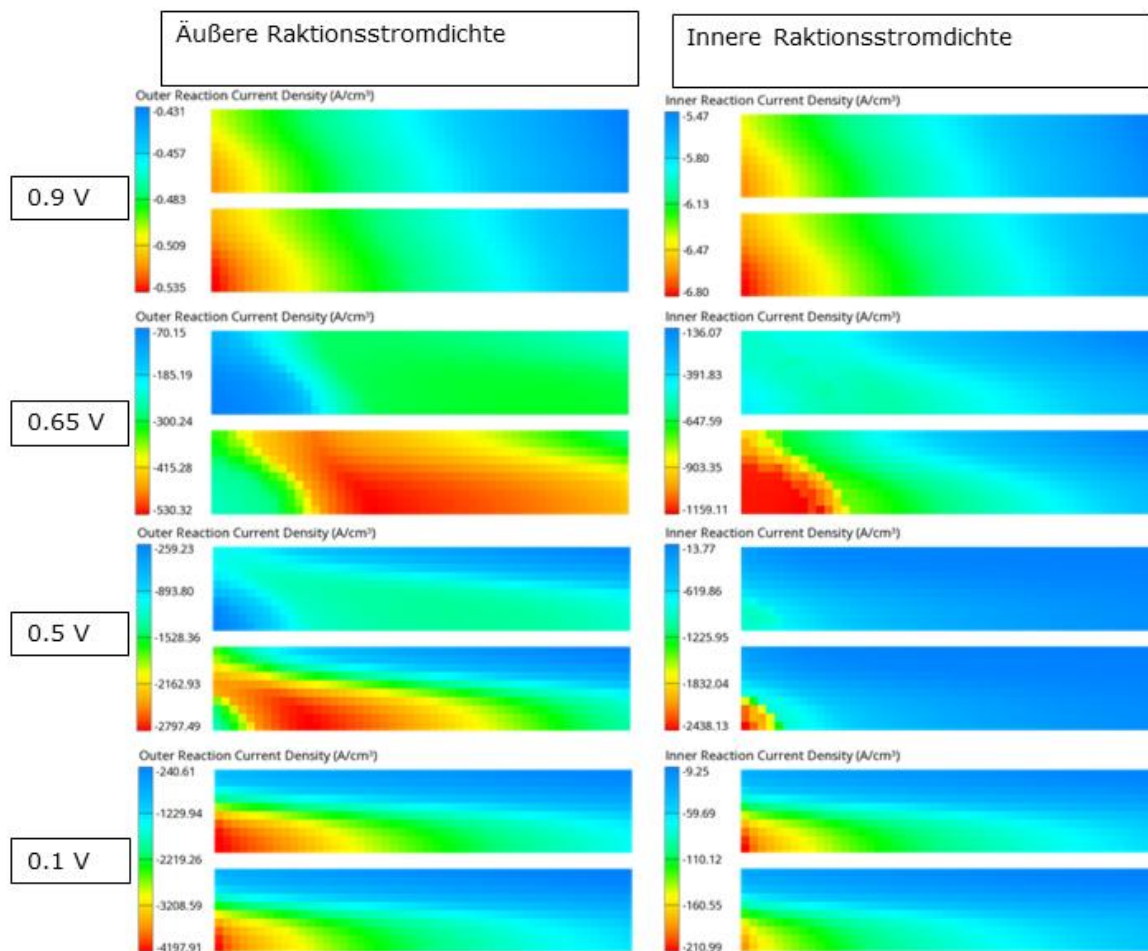


Abbildung 8: Reaktionsstromdichte der inneren- und äußeren Partikel

Im Abbildung 8 sind die lokalen Reaktionsstromdichte der inneren- und äußeren Partikel in einem GDL nahen und einem Membrannahen Schnitt durch den katalytischen Layer dargestellt. Allgemein lässt sich hier ein Abfallen der Stromdichte vom Einlass zum Auslass und vom Bereich unterhalb des Kanals bis unterhalb der Rippe beobachten. Dies ist ursächlich auf die  $O_2$ -Begrenzung zurückzuführen. Dies gilt ebenfalls für die maximale Reaktionsstromdichte, die bei höherer Spannung an der Membran und bei niedriger Spannung an der GDL vorliegt. Die maximale innere Stromdichte liegt immer am Kathodeneingang vor was ebenso auf die ausreichende Versorgung mit  $O_2$  in diesem Bereich zurückzuführen ist. Die Auswirkung der Ionomervergiftung zeigt sich für den mittleren Spannungsbereich in einer verringerten äußere Reaktionsstromdichte am Kathodeneingang und GDL-nah unterhalb des Kanals durch die dort höhere lokale Spannung.

In Abbildung 9 ist eine Gegenüberstellung der simulierten Reaktionsstromdichten des ISE – Modells mit dem in AVL FIRE standardmäßig verwendeten Agglomerationsmodells [5] dargestellt. Hierfür wurde in im ersten Schritt das Brennstoffzellenmodell mit den beiden CL-Modellen durch Anpassung der Parameter „Ionomerfilmdicke“ und „Agglomerate radius“ im Agglomerationsmodell auf vergleichbare Betriebszustände kalibriert.

Die räumliche Verteilung der Reaktionsstromdichte zeigt hierbei die stärkere Sensitivität des ISE-Modells gegenüber der Sauerstoffverteilung. Dies kann anhand der Konzentration der Reaktionsstromdichte in Einlassnähe und der Maxima in der Reaktionsstromdichte in GDL nahe bei niedrigen Spannungen geschlossen werden. Das Agglomerationsmodell wiederum eine starke Abhängigkeit von der Membranfeuchte, speziell im Bereich der mittleren Zellspannungen.

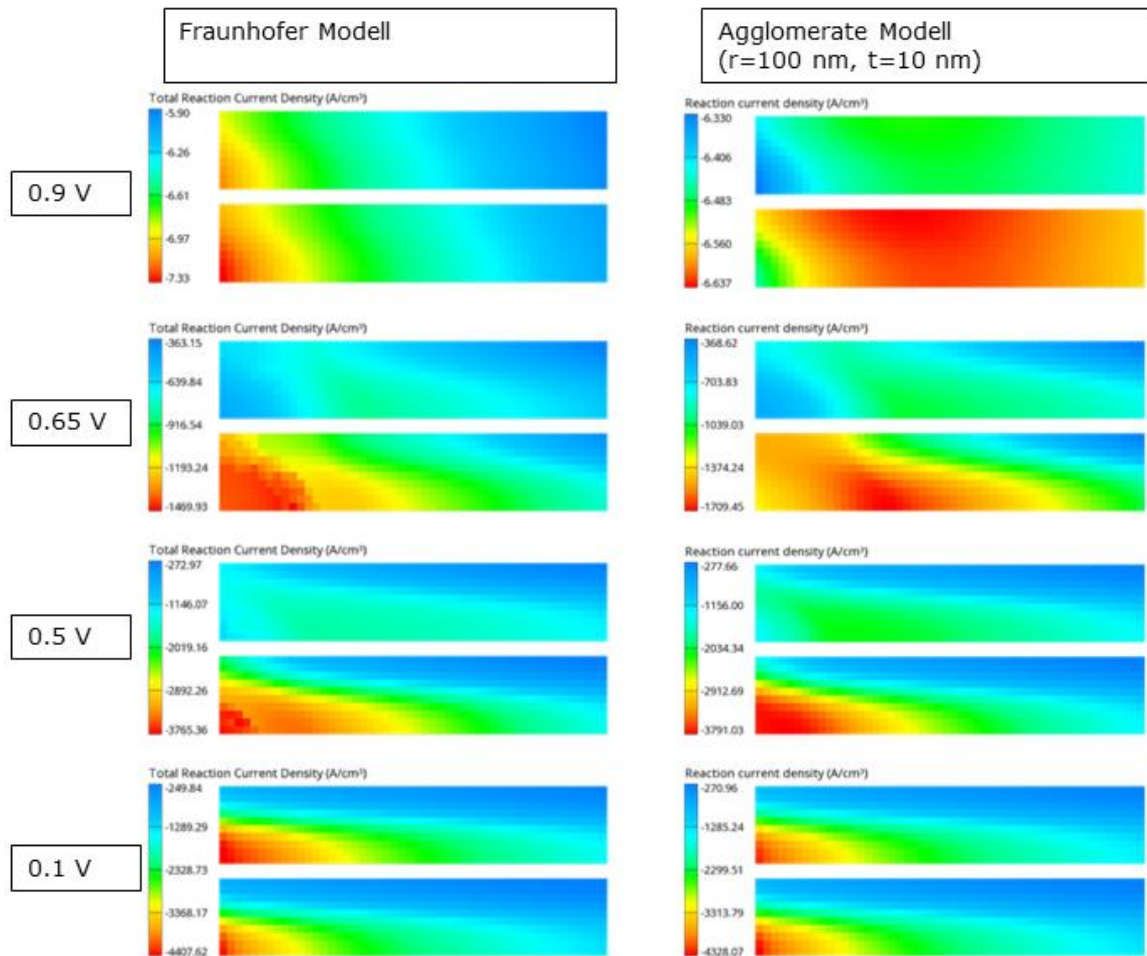
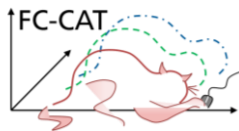


Abbildung 9: Gegenüberstellung der berechneten Reaktionsstromdichte im CL an der GDL (oben) und Membran (unten)

### 1.1.8.2. Validierung an Serpentina-Kanal-PEM

Nach dem Verständnis des individuellen Einflusses der Modellparameter, wurde das Verhalten des Fraunhofer-Modells [13] mit den experimentellen Daten einer Drei-Serpentina-Kanal-PEM-Brennstoffzelle mit einer aktiven Fläche von 25 cm<sup>2</sup> verglichen. Abbildung 10 zeigt die kommerzielle Polymerelektrolyt-Brennstoffzellen-Membranelektrode vom Typ CCM-H25-N212 von Quintech (Deutschland) mit der Zellhardware von S++ (Deutschland). Diese Brennstoffzelle wurde von Greenlight (Kanada) auf der G60-Teststation unter drei Betriebsbedingungen getestet: Referenzfall, reduzierte Feuchtigkeit und erhöhte Temperatur. In Tabelle 3 sind die Betriebsbedingungen der experimentellen Tests aufgeführt.

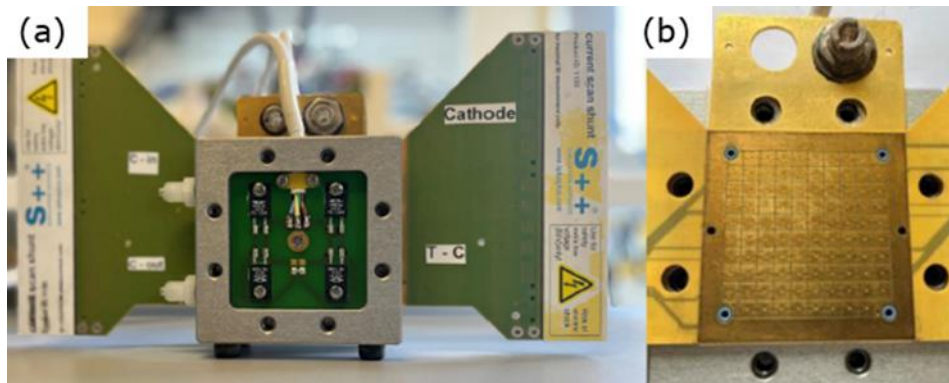


Abbildung 10: Polymerelektrolyt-Brennstoffzellen: (a) vollständiger Aufbau, (b) segmentierter Stromabnehmer

Tabelle 3: Betriebsbedingungen für die experimentellen Tests

Beschreibung		Referenzfall	erhöhte Temperatur	reduzierte Feuchtigkeit
Zelltemperatur		80 °C	90 °C	80 °C
Elektrischer Zustand	Zellspannung	0,25 V - 0,95 V	0,25 V - 0,95 V	0,25 V - 0,95 V
Kathode	Rel. Luftfeuchtigkeit	100	100	100
	Stöchiometrie	2,5	2,5	2,5
	Auslassdruck	30 kPa	30 kPa	30 kPa
Anode	Rel. Luftfeuchtigkeit	100%	100%	50%
	Stöchiometrie	1,5	1,5	1,5
	Auslassdruck	50 kPa	50 kPa	50 kPa

### 1.1.1 Aufbau der Simulation

Abbildung 11 zeigt das Berechnungsnetz für den gesamten Versuchsaufbau. Wie in Abbildung 11 dargestellt, besteht das Gebiet aus den Bipolarplatten, Kathoden- und Anodenkanälen, Gasdiffusionsschichten, Katalysatorschichten und der Membran mit etwa eine Million Elementen. Im ersten Schritt wird wieder die Modellkalibrierung basierend auf dem Referenzfall durchgeführt.

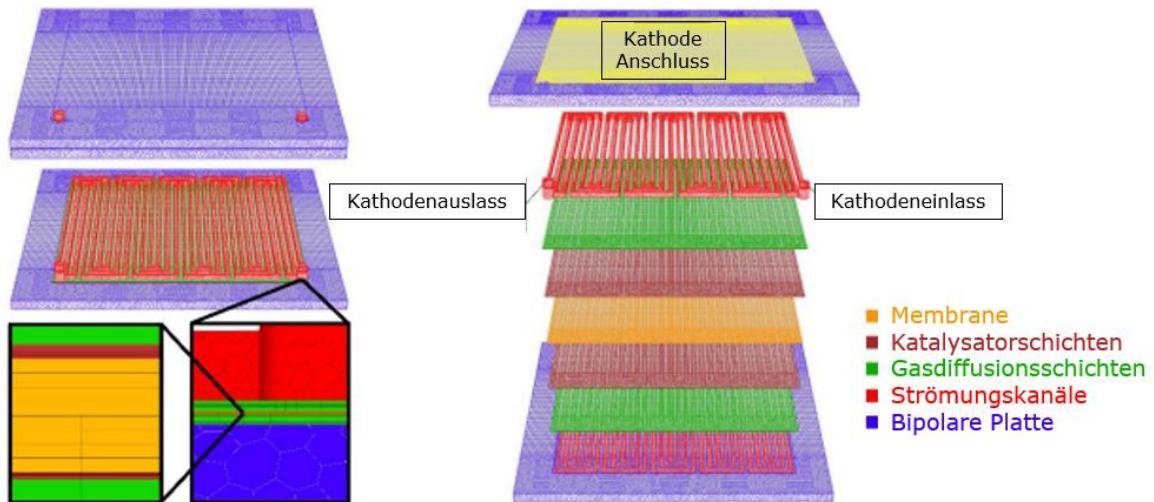


Abbildung 11: Explosionsdarstellung des Berechnungsnetzes mit den Strömungsrichtung auf Kathodenseite (Ein- und Auslass).

Ausgehend davon wurden drei verschiedene Kalibrierungsansätze durchgeführt, um die Anwendbarkeit dieses Modells zu verstehen. Diese verschiedenen Kalibrierungsansätze helfen zu bestätigen, ob die Parameter auch das gleiche Verhalten wie bei den Einzelkanal-Simulationen aufweisen.

Auf der Grundlage der Simulationen des Referenzfalls wurde einer der drei Ansätze gewählt, um das Modell unter anderen Betriebsbedingungen zu testen. Zunächst wurde die Eintrittstemperatur von 80°C auf 90°C erhöht und dann die relative Luftfeuchtigkeit von 100% auf 50% gesenkt.

### 1.1.2 Anpassungsprozess für den Referenzfall

Nach der gleichen Methodik wie für den Einzelkanal (s. Abschnitt 1.1.8.1) wurde zunächst der Ladungsübertragungskoeffizient Kathode (CTC) bestimmt. Abbildung 12 zeigt die gemessene und berechnete Polarisationskurve der CTC-Veränderung für den Referenzfall, bei dem alle Parameter des Fraunhofer-Modells konstant gehalten wurden.

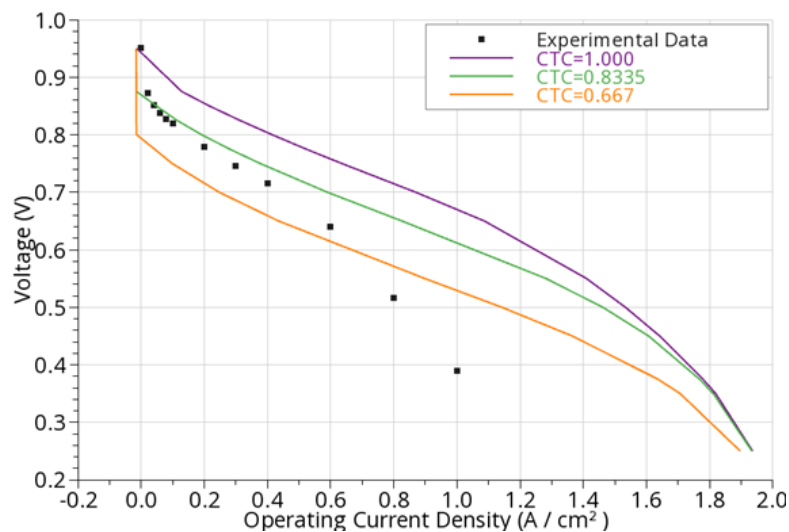
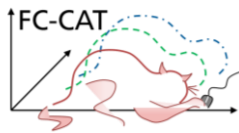


Abbildung 12: Polarisationskurve in Simulation (Linien) und Experiment (Symbole) für den Referenzfall



AVL Deutschland GmbH

Ein CTC von 0,8335 zeigt die bessere Ausgangsposition der Kurve (grüne Linie). Die grüne Kurve verdeutlicht auch die Notwendigkeit, die Aktivierungs- und Konzentrationsverluste anzupassen. Zu diesem Zweck wurden drei Parameter aus dem Fraunhofer-Modell für den Anpassungsprozess ausgewählt: Reaktionsgeschwindigkeit der Sauerstoffreduktion, Diffusionskoeffizient für O<sub>2</sub> an der Oberfläche und Partikelverteilung auf der Oberfläche. Darüber hinaus wurde der Effekt der Ionenleitfähigkeit der Membran berücksichtigt, da diese Information aus einer früheren Veröffentlichung vorlag [14].

Die Werte der Kalibrierungsparameter sind in Tabelle 4 aufgeführt. Die gemessenen und berechneten Polarisationskurven des Drei-Fit-Ansatzes für den Referenzfall sind in Abbildung 13 dargestellt. Fit I ist der einzige Fall, in dem die Information über die Membranleitfähigkeit berücksichtigt wird. In den anderen beiden Fällen (Fit II und Fit III) wird dieser Wert als Standardwert beibehalten, da diese und andere Materialeigenschaften während der numerischen Simulation meist unbekannt sind.

Tabelle 4: Werte der Kalibrierungsparameter für den Referenzfall

Parameter	Maßeinheit	Standardwert	Fit I	Fit II	Fit III
Reaktionsgeschwindigkeit der Sauerstoffreduktion	[m/s]	1,00E-12	1,00E-12	5,00E-13	1,00E-12
Diffusionskoeffizient für O <sub>2</sub> an der Oberfläche	[m <sup>2</sup> /s]	9,00E-13	2,20E-13	1,90E-13	1,20E-13
Partikelverteilung auf der Oberfläche	[%]	50,00	25,00	25,00	50,00
Ionische Leitfähigkeit der Membran (Arrhenius)					
- Gamma	[-]	1,000	1,258	1,000	1,000
- Aktivierungsenergie	[J/mol]	10542	7369	10542	10542
- Referenz-Ionenleitfähigkeit	[A/(V.m)]	0,1879	0,0439	0,1879	0,1879

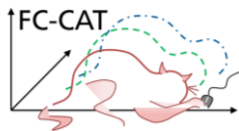
Im Fraunhofer-Modell ist die Betriebsstromdichte die Summe aus zwei Beiträgen: die äußere Stromdichte stammt von den Pt-Partikel, die sich auf der Oberfläche der Kohlenstoffpartikel befinden, und die innere Stromdichte von den Pt-Partikel, die sich im Inneren der Poren befinden.

Abbildung 13-a zeigt die Polarisationskurve (durchgezogene Linie) und die innere Stromdichte (gestrichelte Linie) und

Abbildung 13-b die gleiche Polarisationskurve (durchgezogene Linie) und die äußere Stromdichte (gepunktete Linie) für die drei Anpassungsansätze mit den experimentellen Daten.

Die drei Anpassungsansätze erzielen eine gute Übereinstimmung mit den experimentellen Daten, wie

Abbildung 13 aufzeigt. Da Fit I und Fit II die gleiche Partikelverteilung aufweisen (25% auf der Oberfläche), zeigen sie ein ähnliches Verhalten für die äußere und innere Stromdichte. Falls



AVL Deutschland GmbH

die spezifischen Werte des Ionentransportmodells von Arrhenius nicht bekannt sind, kann die Ionenleitfähigkeit der Membran durch die Anpassung der Partikelverteilung, der Reaktionsgeschwindigkeit der Sauerstoffreduktion und des Diffusionskoeffizienten für O<sub>2</sub> an der Oberfläche kompensiert werden, wie in Fit II und Fit III gezeigt.

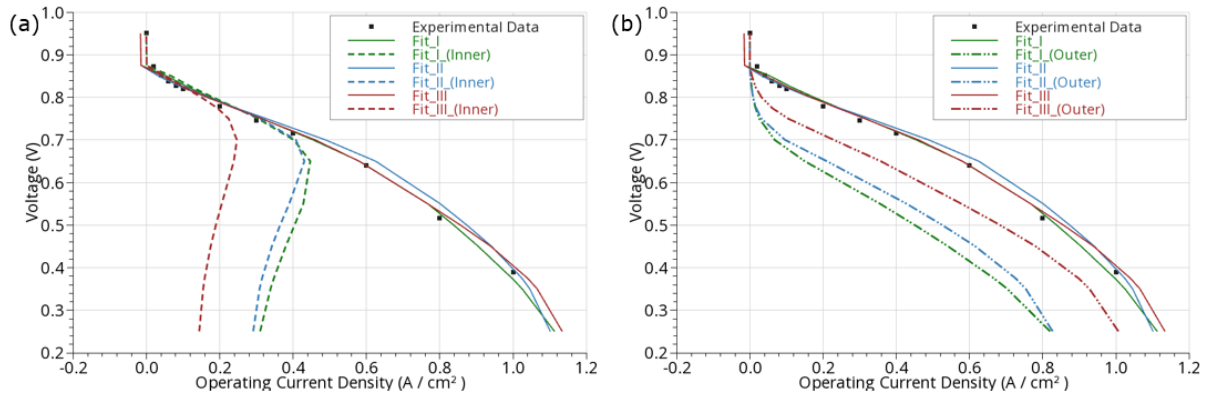


Abbildung 13: Polarisationskurve in der Simulation, im Detail der Einfluss der inneren Stromdichte (a) und der äußeren Stromdichte (b) für die drei Anpassungsansätze.

Fit III zeigt ein etwas besseres Ergebnis im ohmschen Bereich zwischen 0,6 A/cm<sup>2</sup> und 0,8 A/cm<sup>2</sup>. Bei 0,8 A/cm<sup>2</sup> hat Fit II einen höheren relativen Fehler von 6,66 % im Vergleich zu Fit III (2,01 %). Daher wird die Logik von Fit III im weiteren Verlauf des Validierungsprozesses beibehalten. Ergänzend zur Polarisationskurve wird auch die lokale Stromdichte verglichen. Abbildung 14-a zeigt die Zellorientierung und die Segmentidentifikation und Abbildung 14-b das korrespondierende Maß der Stromdichteverteilungen für die durchschnittliche Stromdichte 0,2; 0,4; 0,6 und 0,8 A/cm<sup>2</sup> für Fit III und die experimentellen Daten.

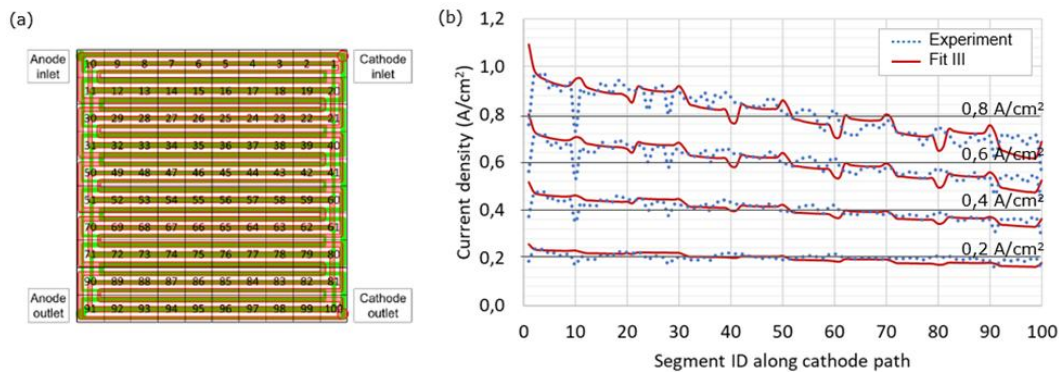


Abbildung 14: (a) Segmentnummerierung und Zellorientierung; (b) Stromdichte entlang der Kathodenkanäle für den Referenzfall in Simulation und Experiment

Die Simulations- und Versuchsergebnisse zeigen eine gute Gesamtübereinstimmung für alle Punkte, abgesehen von einigen lokalen Minima und Maxima (Abbildung 14-b). Eine mögliche Erklärung für diese punktuellen Abweichungen der lokalen Minima und Maxima könnte die Folge von Messrauschen oder unbekanntem Randbedingungen sein. Die Simulation sagt den kontinuierlichen Stromdichteabfall vom Kathodeneinlass zum Auslass gut voraus und ist in der Lage, die in diesen Regionen erwarteten, O<sub>2</sub> Beschränkungen zu reproduzieren. Die Simulation deckt auch die stärkeren Stromdichtegradienten bei größeren Stromdichten (0,6 und 0,8 A/cm<sup>2</sup>) gut ab.

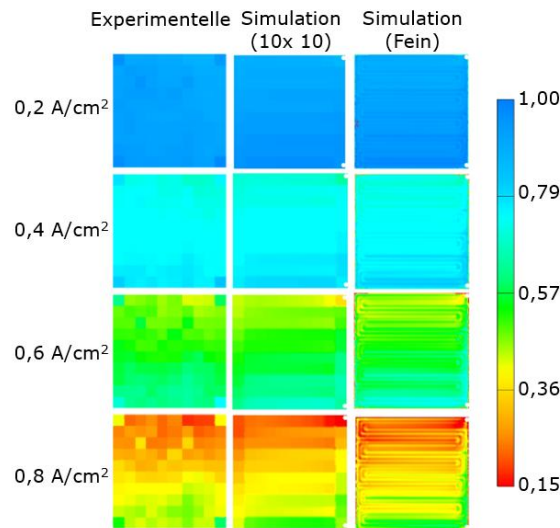
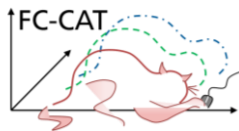


Abbildung 15: Stromdichteverteilung in Simulation und Experiment für den Referenzfall

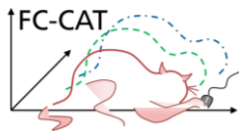
Zusätzlich sind in Abbildung 15 die farbigen Stromkarten für den Fit III dargestellt. Die Auflösung der Messplatte beträgt 10 x 10, und die numerischen Ergebnisse sind in zwei Formen dargestellt: in der gleichen Auflösung wie die experimentellen Daten (10x10) und in der ursprünglichen Auflösung des Berechnungsnetzes (Fein). Auch hier zeigen die numerischen und experimentellen Daten eine gute Übereinstimmung für die 3D-Ergebnisse.

### 1.1.3 Einfluss der Betriebsbedingungen

Mit der Änderung der Betriebsbedingungen müssen die Werte des Fraunhofer-Modells neu angepasst werden. Dieses Modell ist nicht nur bereichsabhängig, sondern auch von Randbedingungen abhängig. Es ist unmöglich, einen universellen Satz von Parameterwerten für verschiedene Betriebsbedingungen zu definieren. Da die Reaktionsgeschwindigkeit einer chemischen Reaktion von der Temperatur und den Konzentrationen der Reaktanten abhängt und die Ionendifusionsfähigkeit in wässrigen Elektrolyten von der Wasserverfügbarkeit abhängt. Diese Anpassungen sind logisch für die elektrochemischen und physikalischen Phänomene während des Betriebs der Brennstoffzelle.

Tabelle 5: Zusätzliche Kalibrierungsanpassung für die Fälle

Parameter	Maßeinheit	Standardwert	Referenzfall (Fit III)	erhöhte Temperatur	reduzierte Feuchtigkeit
Reaktionsgeschwindigkeit der Sauerstoffreduktion	[m/s]	1,00E-12	1,00E-12	5,00E-13	1,00E-12
Diffusionskoeffizient für O <sub>2</sub> an der Oberfläche	[m <sup>2</sup> /s]	9,00E-13	2,20E-13	1,90E-13	1,20E-13
Partikelverteilung auf der Oberfläche	[%]	50,00	25,00	25,00	50,00



AVL Deutschland GmbH

In Tabelle 5 sind die Werte der Kalibrierungsänderung für eine erhöhte Temperatur und reduzierte Luftfeuchtigkeit sowie die für den Referenzfall (Fit III) verwendeten Werte und die Standardwerte aufgelistet. Die Temperaturänderung von 80°C auf 90°C führt zu einer Erhöhung der Parameter Reaktionsgeschwindigkeit der Sauerstoffreduktion und Diffusionskoeffizient für O<sub>2</sub> an der Oberfläche im Vergleich zum Referenzfall. Andererseits führt die Reduktion auf die halbe Luftfeuchtigkeit zu einer Verringerung der Werte dieser Anpassungsparameter.

Die gemessenen und berechneten Polarisationskurven für die verschiedenen Betriebsbedingungen sind in Abbildung 16 dargestellt. Der Fall mit erhöhter Temperatur zeigt in allen Messpunkten eine gute Übereinstimmung mit den experimentellen Daten. Der Fall mit reduzierter Luftfeuchtigkeit zeigt jedoch eine kleine Abweichung in der ohmschen Region zwischen 0,1 und 0,5 A/cm<sup>2</sup>. Dieser Region hat eine maximale Abweichung von 6,18 % bei 0,4 A/cm<sup>2</sup>.

Dieser Bereich wird vor allem durch die Verluste aufgrund der Ionen- und Elektronenleitung beeinflusst. Der Massenunterschied zwischen den geladenen Spezies (Elektronen und Ionen) erschwert den Transport der Ionen, daher ist der ionische Beitrag tendenziell dominant. Diese Leitfähigkeit wird durch den Wassergehalt bestimmt. Ein hoher Wassergehalt führt zu einer hohen Leitfähigkeit, insbesondere der Wassergehalt in der Membran. Die Verringerung der Luftfeuchtigkeit beeinflusst diese Verluste direkt. Eine plausible Erklärung für die Unterschiede wäre die Bedeutung der Änderung der Membraneigenschaften unter sehr trockenen Bedingungen, um den Ladungstransport zu korrigieren.

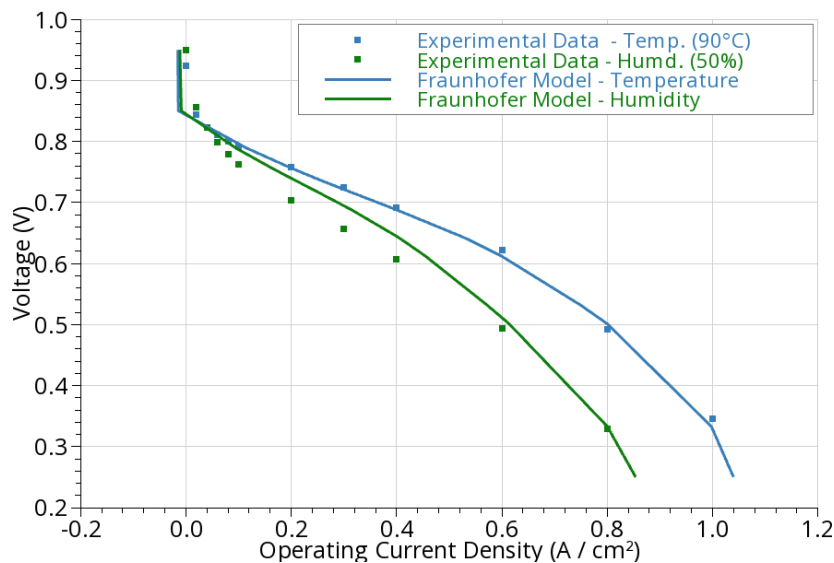
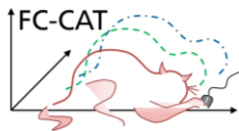


Abbildung 16: Polarisationskurve in der Simulation der Fälle mit erhöhter Temperatur und reduzierter Luftfeuchtigkeit

Abbildung 17 zeigt die Stromdichteverteilungen für die durchschnittliche Stromdichte 0,2; 0,4; 0,6 und 0,8 A/cm<sup>2</sup> bei erhöhter Temperatur und reduzierter Luftfeuchtigkeit, und Abbildung 18 illustriert die jeweilige farbige Stromkarte. Bei erhöhter Temperatur stimmen die Simulation und die experimentellen Daten sehr gut überein (Abbildung 17-a und Abbildung 18-a). Die Simulation sagt den kontinuierlichen Abfall der Stromdichte vom Kathodeneingang zum Kathodenausgang gut voraus, mit Ausnahme einiger lokaler Maxima und Minima. Diese lokalen Abweichungen waren jedoch aus den vorherigen Untersuchungen zu erwarten. Darüber hinaus sind die Abweichungen von den experimentellen Daten für den Fall reduzierter Luftfeuchtigkeit in den Stromverteilungen in Abbildung 17-b und Abbildung 18-b zu sehen. In diesem Fall ist die Stromdichte im Vergleich zu den vorherigen Fällen umgekehrt.



AVL Deutschland GmbH

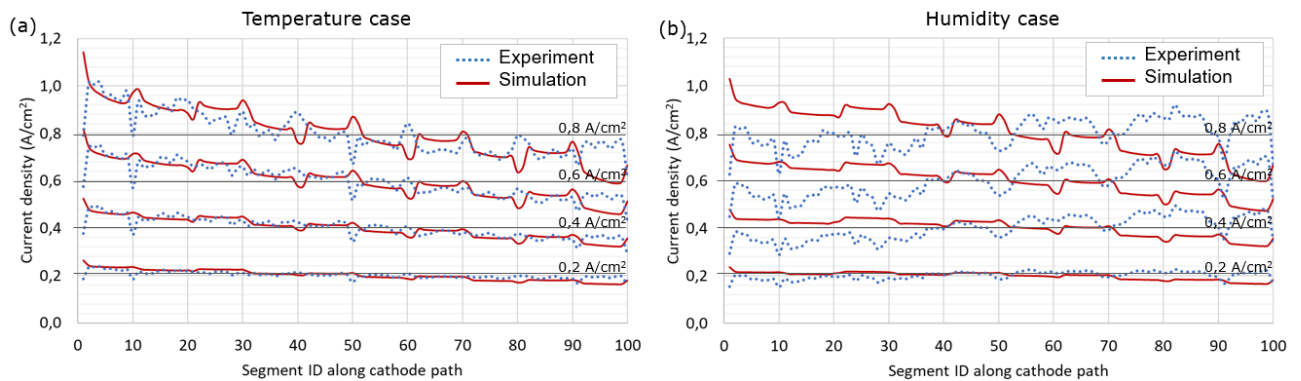


Abbildung 17: Stromdichte entlang der Kathodenbahn für die Fälle mit erhöhter Temperatur und reduzierter Luftfeuchtigkeit in Simulation und Versuch

Die Stromdichte nimmt vom Kathodeneingang zum Kathodenausgang hin zu, und die Simulation ist nicht in der Lage, diese Änderung zu modellieren. Ein Grund für dieses Verhalten sind die Selbstbefeuchtungsprozesse der Membran unter trockenen Bedingungen, die die Bereiche mit hoher Stromdichte in der Nähe des Kathodenausgangs verlagern. Dies führt zu der Schlussfolgerung, dass es unmöglich ist, dieses Phänomen korrekt zu modellieren, ohne die Eigenschaften der Membran zu verändern.

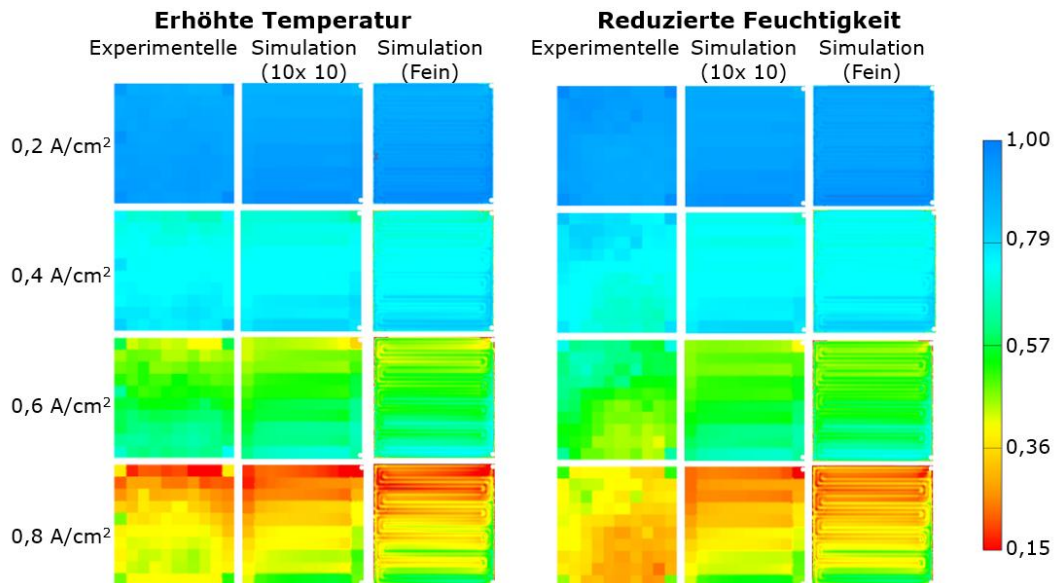


Abbildung 18: Stromdichteverteilung in Simulation und Experiment für die Fälle mit erhöhter Temperatur und reduzierter Luftfeuchtigkeit

### 1.1.9 AP 8.9 Methodenentwicklung für das verbesserte CFD-Modell in AVL

Nach einer Studie und Einarbeitung in das Fraunhofer-Modell [13] wurde dieses über einen Userfunktion in AVL FIRE™ M implementiert. In diesem Stadium waren 12 Parameter für die Modellkalibrierung verfügbar: Anzahl der Primärporen, Radius der Primärporen, Ionomerfilmdiffusionskoeffizient von  $O_2$  auf der Oberfläche, Ionomerfilmdicke, Reaktionsrate, Partikelverteilung auf der Oberfläche, Potentialabhängigkeit der  $SO_3^-$  Bedeckung (Steigung), Potential der halben  $SO_3^-$  Bedeckung in Bezug auf die maximale  $SO_3^-$  Bedeckung, Öffnungsradiusverhältnis der Pore, ionische Leitfähigkeit in der Pore, Porentiefe und Diffusionskoeffizient von  $O_2$  in Wasser.

### 1.1.9.1. Aufbau der Simulation

Um die Auswirkungen dieser Parameter zu verstehen, wurde eine Sensitivitätsanalyse für eine Zelle mit einem geraden Kanal und einer aktiven Fläche von 50 mm<sup>2</sup> durchgeführt, wie in Abbildung 19 dargestellt. Das Berechnungsnetz besteht aus Kathodenkanal, Anodenkanal, Gasdiffusionsschichten, Katalysatorschichten und der Membran. Die Lage der Kanalein- und -auslässe weist auf eine Gegenstromkonfiguration hin. Das Berechnungsnetz enthält 28.500 hexaedrische Berechnungselemente.

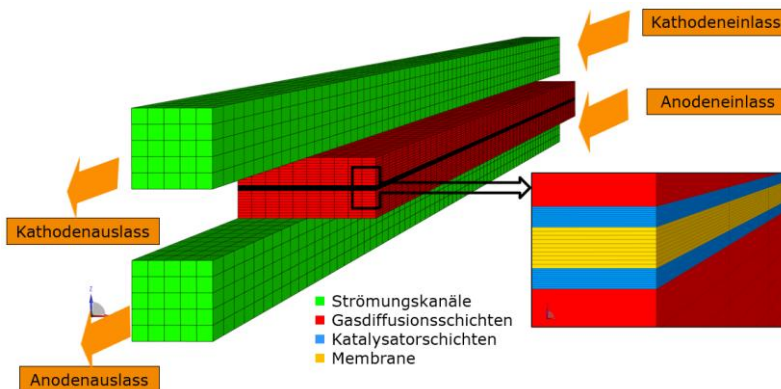


Abbildung 19: Geometrie der in der vorliegenden Arbeit verwendeten Einzelkanal-Brennstoffzelle

In Tabelle 6 sind die Randbedingungen und Betriebsbedingungen aufgeführt. Tabelle 7 enthält die in dieser Sensibilitätsstudie untersuchten Parameter. Der einzige AVL FIRE™ M-Parameter (Ladungsübertragungskoeffizient auf der Kathodenseite) wird in Kombination mit den 12 Parametern aus dem Fraunhofer-Modell analysiert. Alle Parameter sind in Tabelle 7 mit den Standardwerten, der Untergrenze und der Obergrenze aufgeführt. Die untere Grenze wurde als 50 % des Standardwerts und die obere Grenze bei 150 % definiert.

Tabelle 6: Randbedingungen und Betriebsbedingungen

Beschreibung		Wert
Zelltemperatur		80 °C
Elektrischer Zustand	Zellspannung	0,25 V - 0,95 V
Kathode	Rel. Luftfeuchtigkeit	0,3
	Stöchiometrie	1,50
	Auslassdruck	2,3 bar
Anode	Rel. Luftfeuchtigkeit	0,5
	Stöchiometrie	1,3
	Auslassdruck	2,5 bar

Die Berechnung mit den Standardwerten wurde als Referenz definiert und die folgenden Simulationen wurden unter Variation eines Parameters an der unteren und oberen Grenze durchgeführt. Insgesamt wurden 27 Fälle analysiert. Die Berechnungszeit für einen Fall beträgt etwa 3 Stunden mit 20 CPUs für 8 Lastpunkte.

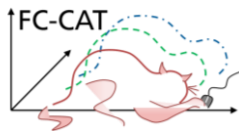
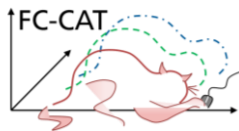


Tabelle 7: Die untersuchten Parameter der Sensibilitätsstudie

Parameter	Maßeinheit	Standardwert	Unterer Grenzwert	Oberer Grenzwert
Ladungsübertragungskoeffizient Kathode	[-]	0,667	0,334	1,00
Anzahl der Primärporen	[m]	6,00	3,00	9,00
Radius der Primärporen	[m]	3,00E-09	1,50E-09	4,50E-09
Ionomerfilm-Diffusionskoeffizient für O <sub>2</sub> an der Oberfläche	[m <sup>2</sup> /s]	9,00E-13	4,50E-13	1,35E-12
Ionomerfilmdicke	[m]	4,00E-09	2,00E-09	6,00E-09
Reaktionsgeschwindigkeit der Sauerstoffreduktion	[m/s]	1,00E-12	5,00E-13	1,50E-12
Partikelverteilung auf der Oberfläche	[%]	50,00	25,00	75,00
Potentialabhängigkeit der SO <sub>3</sub> <sup>-</sup> Bedeckung (Steigung)	[-]	12,00	6,00	18,00
Potenzial der halben SO <sub>3</sub> -Bedeckung bezogen auf max. SO <sub>3</sub> -Bedeckung	[-]	0,60	0,30	0,90
Öffnungsradiusverhältnis der Pore	[-]	0,90	0,45	1,00
Ionenleitfähigkeit in der Pore	[S/m]	1,00	0,50	1,50
Porentiefe	[m]	4,00E-09	2,00E-09	6,00E-09
Diffusionskoeffizient von O <sub>2</sub> in Wasser	[m <sup>2</sup> /s]	2,04E-13	1,02E-13	3,06E-13

### 1.1.9.2. Der Einfluss des Ladungstransferkoeffizienten an der Kathode

Der Ladungstransferkoeffizient an der Kathode ist der einzige Parameter, der im Rahmen der aktuellen Modellimplementierung in AVL FIRE™ M untersucht wird. Der Ladungstransferkoeffizient an der Kathode wird durch  $\beta$  in der Butler-Volmer-Gleichung dargestellt [5]. Der Wert  $\beta$  steht für die Änderung des elektrischen Potentials an der Grenzfläche zwischen Elektrode und Elektrolyt. Der Wert von  $\beta$  liegt immer zwischen 0 und 1 und der vorgeschlagene Standardwert ist 0,667. Abbildung 20 zeigt die Auswirkung des Ladungstransferkoeffizienten Kathode auf die Polarisationskurve. Die untere Grenze ist 0,334 (blaue Linie), die obere Grenze ist 1 (grüne Linie) und die rote Linie ist der Standardwert.



AVL Deutschland GmbH

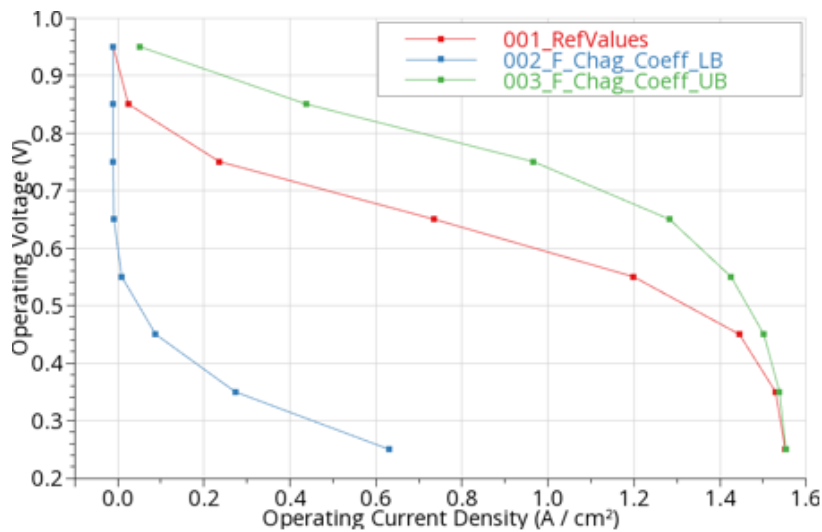


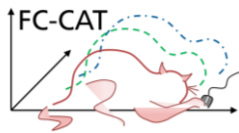
Abbildung 20: Auswirkung der Aktivierungsüberspannung auf die Leistung der Einkanal-Brennstoffzelle

Der Ladungstransferkoeffizient bewirkt den charakteristischen exponentiellen Spannungsverlust auf der Polarisationskurve der Brennstoffzelle, und dieser Wert wurde für die folgenden Einkanalberechnungen konstant gehalten ( $\beta = 0,667$ ).

### 1.1.9.3. Überprüfung des Einflusses der Parameter im ISE-Modell

Die Polarisationskurve charakterisiert die Zellspannung in Abhängigkeit von der Stromdichte. Die Form dieser Kurve gibt Aufschluss über den elektrochemischen Wirkungsgrad und ihre Hauptverluste. Der Anfangsteil der Kurve wird hauptsächlich von den Aktivierungsverlusten beeinflusst, der mittlere Teil der Kurve (linearer Teil) steht im Zusammenhang mit den ohmschen Verlusten, und das Ende der Kurve steht im Zusammenhang mit den Konzentrationsverlusten.

Abbildung 21 zeigt die Polarisationskurve der Parametervariation der Anzahl der Primärporen, des Radius der Primärporen, des Ionomerfilm-Diffusionskoeffizienten für  $O_2$  an der Oberfläche und der Ionomerfilmdicke, wobei die Standardwerte jeweils sind: 6;  $3,0 \cdot 10^{-9}$  m;  $9,0 \cdot 10^{-13}$  m<sup>2</sup>/s;  $4,0 \cdot 10^{-9}$  m. In allen Diagrammen stellen die roten Linien diese Standardwerte dar. Die blauen Linien stellen die untere Grenze der einzelnen Parameter dar, die grünen Linien die obere Grenze. Die Anzahl der Primärporen (Abbildung 21-a) hatte keinen Einfluss auf die Polarisationskurve für den untersuchten Bereich, was durch die überlappenden Linien bestätigt wird. Der Radius der Primärpore hat einen geringen Einfluss auf die Aktivierungsverluste, wie in Abbildung 21-b zu sehen ist. Die Verringerung des Radius (blaue Linie) verschiebt den Beginn des ohmschen Bereichs zu niedrigeren Stromdichten. Der Ionomerfilm-Diffusionskoeffizient für  $O_2$  an der Oberfläche (Abbildung 21-c) wirkt sich hauptsächlich auf den Massentransport aus. Die Verringerung dieses Parameters führt zu einer Verringerung der Stromdichte bei gleicher angelegter Spannung. Das gleiche Verhalten ist bei der Variation der Ionomerfilmdicke zu beobachten, wenn auch mit geringerem Einfluss.



AVL Deutschland GmbH

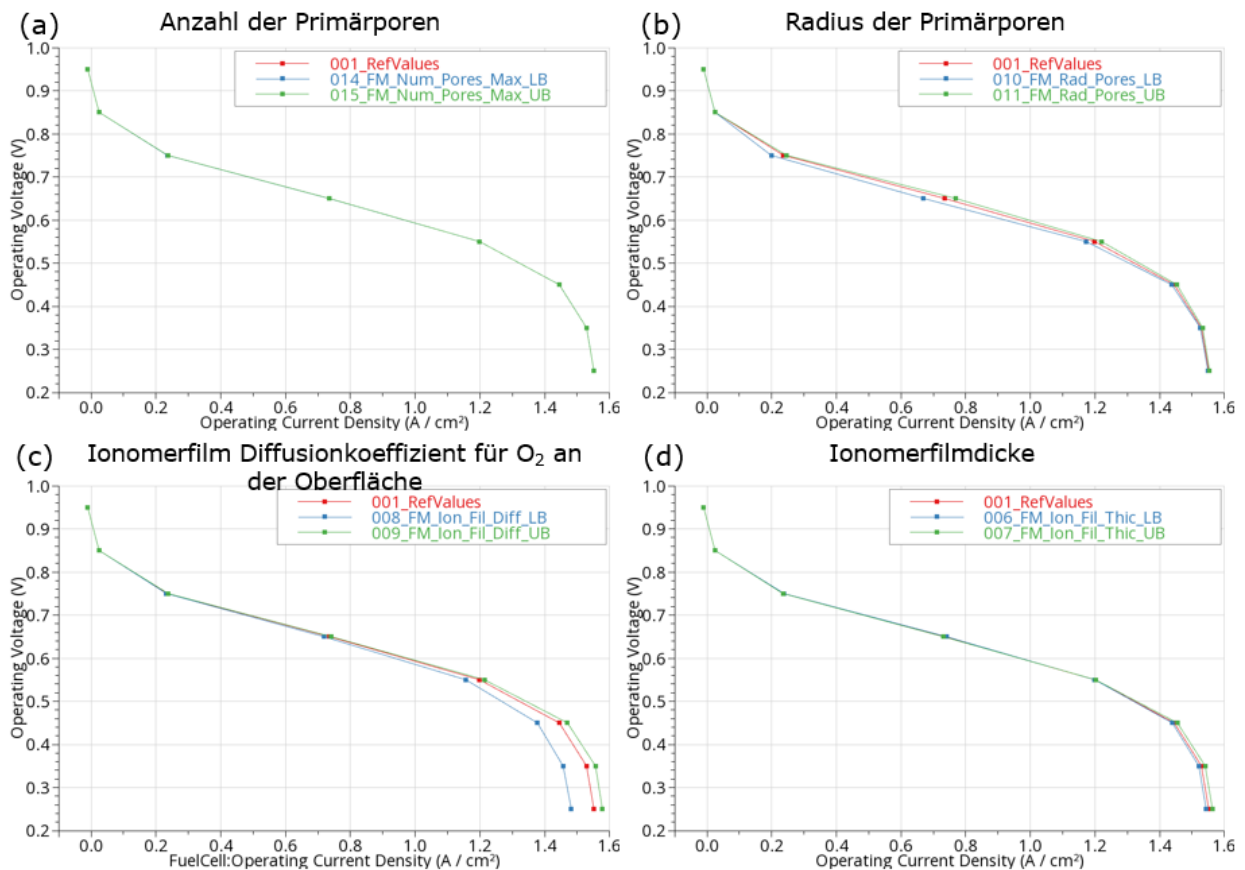


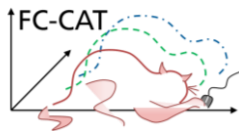
Abbildung 21: Polarisationskurve der ersten parametrischen Variationsgruppe: (a) Anzahl der Primärporen, (b) Radius der Primärporen, (c) Ionomerfilm-Diffusionskoeffizient für O<sub>2</sub> an der Oberfläche und (d) Ionomerfilmdicke

Abbildung 22 zeigt die zweite Gruppe der untersuchten Variablen: Reaktionsgeschwindigkeit der Sauerstoffreduktion, Partikelverteilung auf der Oberfläche, Potenzialabhängigkeit der SO<sub>3</sub><sup>-</sup> Bedeckung (Steigung) und Potenzial der halben SO<sub>3</sub><sup>-</sup> Bedeckung bezogen auf max. SO<sub>3</sub><sup>-</sup> Bedeckung. Die Referenzwerte für diese Variablen sind jeweils 1,0·10<sup>-12</sup> m/s; 50%; 12,00 und 0,6.

Die Reaktionsgeschwindigkeit der Sauerstoffreduktion hat Einfluss auf die Verluste im Zusammenhang mit den elektrochemischen Reaktionen. Mit anderen Worten, man könnte sie interpretieren als die Wahrscheinlichkeit, dass die reaktive Spezies im aktiven Zustand an der Reaktion teilnimmt. Dieser Parameter wirkt sich vor allem auf die Region mit niedriger Stromdichte aus (Abbildung 22-a), wo seine Verringerung zu einer Verringerung der Stromdichte bei gleicher Spannung führt, wie bei der blauen Linie zu sehen ist.

Die Partikelverteilung auf der Oberfläche (Abbildung 22-b) bezieht sich auf der Platzierung der Platinpartikel auf dem Kohlenstoffträger, wobei der Standardwert eine Gleichverteilung ist, bei der sich die Hälfte der Partikel auf der Oberfläche und die andere Hälfte innerhalb der Poren befindet. Wenn sich 25 % des Platins an der Oberfläche befinden (blaue Linie), trägt es zur Leistungssteigerung bei niedriger Stromdichte bei. Dieses Verhalten ist umgekehrt zu dem Bereich mit hoher Stromdichte, in dem der Ionentransport verlangsamt wird, da es schwieriger ist, in die Pore zu gelangen. Das gegenteilige Verhalten zeigt sich, wenn sich 75 % des Platins im Inneren der Poren befinden (grüne Linie).

Die Potenzialabhängigkeit der SO<sub>3</sub><sup>-</sup> Bedeckung (Steigung) (Abbildung 22-c) hat einen minimalen Einfluss auf die Aktivierungsverluste und die Konzentrationsverluste, wobei die Verringerung dieses Wertes die Leistung der Zelle leicht verringert. Das Potenzial der halben SO<sub>3</sub><sup>-</sup> Bedeckung bezogen auf max. SO<sub>3</sub><sup>-</sup> Bedeckung (Abbildung 22-d) ist ein nicht bekannter



AVL Deutschland GmbH

und willkürlicher Wert, der mit dem Grad der Vergiftung in Verbindung mit dem Potenzial und der relativen Luftfeuchtigkeit steht. Dieser Wert beeinflusst in hohem Maße die Zelleistung, wobei seine Erhöhung (grüne Linie) mit einer besseren Zelleistung verbunden ist.

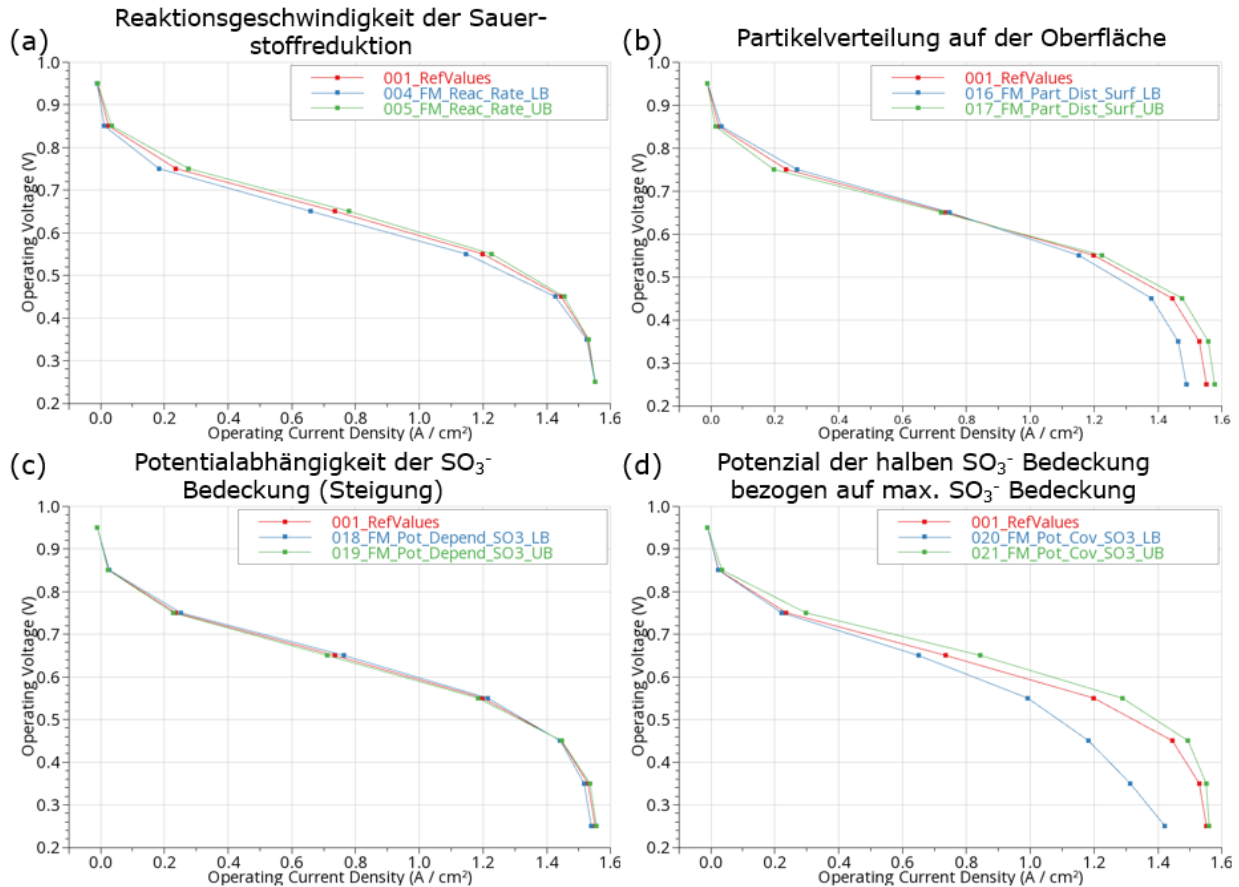
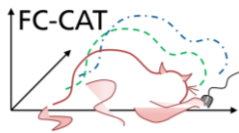


Abbildung 22: Polarisationskurve der zweiten parametrischen Variationsgruppe: (a) Reaktionsgeschwindigkeit der Sauerstoffreduktion, (b) Partikelverteilung auf der Oberfläche, (c) Potentialabhängigkeit der  $\text{SO}_3^-$  Bedeckung (Steigung) und (d) Potenzial der halben  $\text{SO}_3^-$  Bedeckung bezogen auf max.  $\text{SO}_3^-$  Bedeckung

Die letzte Gruppe von Variablen ist in Abbildung 23 dargestellt: Öffnungsradiusverhältnis der Pore, Ionenleitfähigkeit in der Pore, Porentiefe und Diffusionskoeffizient von  $\text{O}_2$  in Wasser. Die Referenzwerte für diese Variablen sind jeweils 0,90; 1,00 S/m;  $4,00 \cdot 10^{-9}$  m und  $2,04 \cdot 10^{-13}$   $\text{m}^2/\text{s}$ . Außer dem Verhältnis des offenen Porenradius haben die letzten drei Parameter keine relevanten Auswirkungen auf die Polarisationskurve in dem untersuchten Bereich, wie in Abbildung 23 dargestellt ist.



AVL Deutschland GmbH

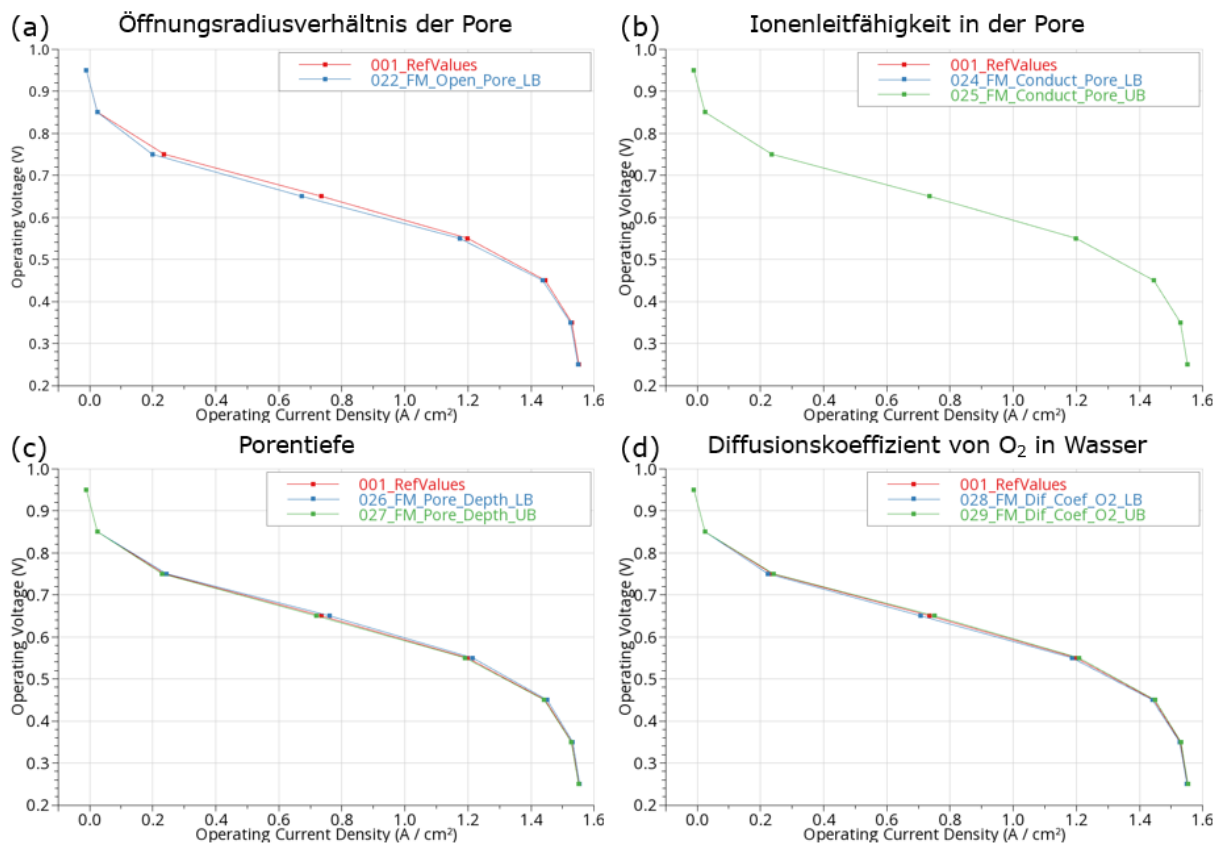


Abbildung 23: Polarisationskurve der dritten parametrischen Variationsgruppe: (a) Öffnungsradiusverhältnis der Pore, (b) Ionenleitfähigkeit in der Pore, (c) Porentiefe und (d) Diffusionskoeffizient von O<sub>2</sub> in Wasser

### 1.1.10 AP 8.10 Erweiterung der AVL FIRE Materialdatenbank PDB

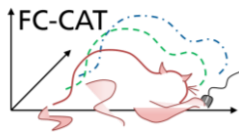
Im AVL Simulationspaket enthält die Property Database (PDB) verschiedene Daten zu den physikalischen Eigenschaften der in Brennstoffzellen verbauten und verwendeten Materialien, die für die genaue Modellierung und Simulation von Brennstoffzellensystemen unerlässlich sind.

Hierzu zählen neben den physikalischen Eigenschaften der Gasarten, wie Wasserstoff, Sauerstoff, Stickstoff und Wasserdampf, des flüssigen Wassers auch die Eigenschaften von Materialien, die in Brennstoffzellenteilen verwendet werden, wie Membranen, Katalysatorschichten und Gasdiffusionsschichten. Dazu gehören Daten zur Wärme- und Stofftransportfähigkeit, spezifischen Wärme, elektrochemische Eigenschaften und anderen relevanten physikalischen Eigenschaften, s. a. Abschnitt 1.1.1.

Speziell für die Modellierung der Membran einer Brennstoffzelle sind im folgenden die benötigten Daten, um deren Eigenschaften und Verhalten genau zu beschreiben, aufgelistet: Materialtyp, Dicke, Ionenleitfähigkeit, Wassergehalt und -sorption, Elektroosmotischer Widerstandskoeffizient, Wasserdiffusionskoeffizient, Äquivalentgewicht und hydraulische Permeabilität

Diese Eigenschaften sind entscheidend für die Simulation der Rolle der Membran in der Brennstoffzelle, einschließlich ihres Einflusses auf Effizienz, Leistungsabgabe und Gesamtssystemverhalten.

Für einige relevante Membranmaterialien sind diese Daten in der Property Database bereits hinterlegt. Durch den templatebasierten Ansatz der PDB können davon ausgehend eigene Membranmaterialien angelegt werden und über die Exportfunktion mit anderen Nutzern geteilt werden.



Für die in Abschnitt 1.1.11 beschriebene Implementierung in FIRE M wurde die PDB um die neuen erforderlichen Stoffgrößen erweitert.

### **1.1.11 AP 8.11 Implementierung 3D-Modell In FIRE**

Das ISE 1D-Modell [13] wurde zur Berechnung der generierten Stromdichte aufgrund der Platinpartikel auf dem Kohlenstoffsupport in die in AP8.5 erstellten Schnittstellen in FIRE M implementiert. Hierbei wurde das ISE-Modell in das CL-Modell in FIRE M integriert und dafür in einigen Punkten für die Anforderungen der 3D-PEM BZ Simulation erweitert.

Die Unterschiede zur ISE-Implementierung sind die 3D Auflösung der Katalysatorschicht und die Kopplung zu den Erhaltungsgleichungen für Energie, ionische und elektronische Ladung, Gasspeziesmasse, Impuls, Gasmasse.

Für die Größenverteilung der Platinpartikel wird auf die Property Data Base (PDB) von FIRE M zurückgegriffen.

Der Ladungsübertragungskoeffizient wird ebenfalls analog zur Standardformulierung in FIRE M verwendet.

Die Nernst Spannung wird abweichend von der ISE 1D Implementierung mit konstantem Wert, in FIRE M konzentrations- und temperaturabhängig formuliert.

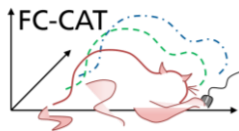
### **1.1.12 AP 8.12 Knowledge-Transfer und Support für AVL FIRE**

Nach der FIRE M Basisschulung und der fortgeschrittenen Fuel Cell Modul Schulung wurden regelmäßige Treffen mit dem Fraunhofer ISE organisiert, um kontinuierlichen Support und Austausch zu gewährleisten. Anfangs lag der Fokus auf der Erstellung von Gittern für ein Segment der Along-the-channel Zelle, wobei ein hybrides Rechengitter entwickelt wurde. Seit Oktober 2020 wird ein neuer Mitarbeiter des Fraunhofer ISE in AVL FIRE M eingearbeitet, was zu häufigeren Supportmeetings führte. Nachdem die Gittergeometrie erarbeitet war, konzentrierten sich die Treffen zunehmend auf Modellierungsmöglichkeiten und die Verwendung selbstentwerfener Formeln.

Im Laufe des Projektzeitraums fanden regelmäßige Treffen statt, um kontinuierlichen Support zu gewährleisten. Der Fokus verlagerte sich auf Modellierungsmöglichkeiten und die Verbesserung der Brennstoffzellenmodellierung in FIRE M. Die Mitarbeiter des Fraunhofer ISE wurden darin geschult, selbstständig blockstrukturierte Rechengitter zu erzeugen. Mit wachsender Erfahrung waren regelmäßige Supporttermine nicht mehr notwendig, und bei Bedarf wurden bilaterale Treffen organisiert, um Probleme und Ideen zu diskutieren. Dies beinhaltete den Austausch zur Materialparametermodellierung und transienten Simulationen der Brennstoffzelle sowie Unterstützung bei der Einrichtung von Lizenzservern und der Nutzung der Software auf dem Rechencluster. Ein weiteres Thema war die Erstellung blockstrukturierter Rechengitter und deren Verwendung in Simulationen mit homogenisierten Flow Channels, um größere Brennstoffzellen zeiteffizient zu berechnen.

### **1.1.13 AP 8.13 Methodenentwicklung für einen kombinierten 1D-3D Workflow**

Für die in AP 8.6, AP 8.7 und AP 8.11 implementierten Modelle wurde ein kombinierter, durchgängiger Workflow entwickelt. Dieser soll den Anwendern eine einheitliche Betrachtung von PEM-BZ auf unterschiedlichen Zeitskalen und Detaillierungsgraden ermöglichen. Hierfür wurde ein Parametrierungsworkflow entwickelt, der die Transformation von 3D-PEM-BZ Simulationsmodellen zu 1D-CRUISE M Modellen erleichtert. Die so gewonnenen Modelle können um weitere Peripheriekomponenten erweitert werden und für Simulationen von Lastzyklen über lange Zeiträume und kompletter Betriebszyklen verwendet werden.



AVL Deutschland GmbH

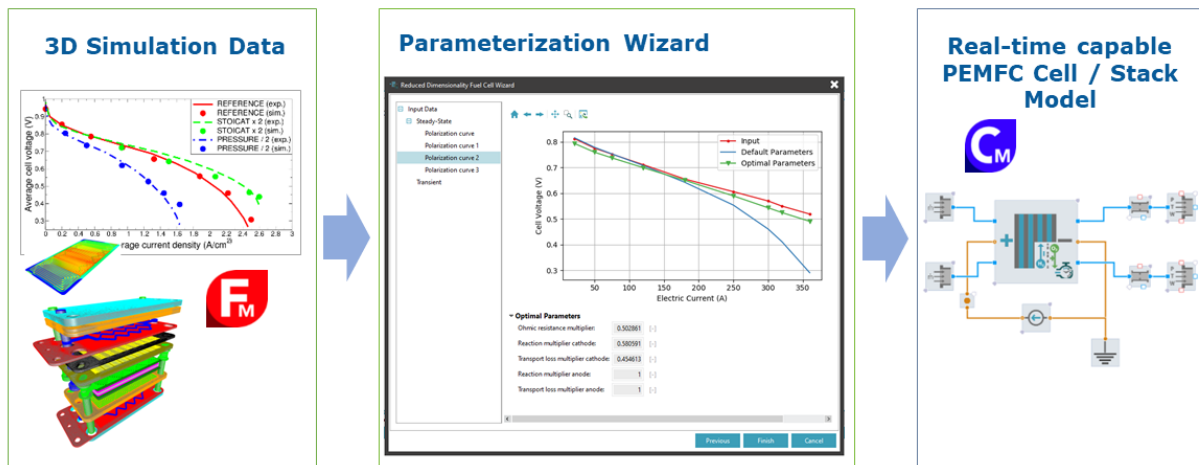


Abbildung 24: Übersicht über den entwickelten Workflow zur Parametrierung von 1D Modellen aus vorgelagerten 3D-Simulationen

Der Parametrierungsworkflow ist auf die Leistungsparametrisierung von PEM-Brennstoffzellen zugeschnitten. Es basiert auf dem RDFC-Stapelmodell (Reduced Dimensionality Fuel Cell) [15]. Hierfür dienen aus den klassischen Stack-Charakterisierungen (d. h. Polarisationskurven) und/oder transienten Simulations- bzw. Messdaten und die generellen Zell-/ Stackparameter als Eingabe.

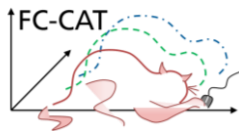
Hauptschritt des Workflows ist die Bedienung des Parametrierungswizards, welcher automatisiert einen Optimierungsprozess mit dem Ziel der Fehlerminimierung zwischen Referenzdatensatz (3D-Simulationsergebnisse) und den Simulationsergebnissen des resultierenden 1D Stackmodells durchführt. Begrenzt wird das Optimierungsproblem durch Auswahl von bis zu zwölf Designparametern, die als Modellparameter sich auf die Ohmsche Verluste, Reaktions- und Transportverluste auswirken. Unter Variierung der Designparameterwerte wird die quadratische Differenz zwischen den Zielwerten  $y_i$  und dem simulierten Ergebnis  $\hat{y}_i$  iterativ minimiert:

$$R_r = \frac{1}{n_p} \sum_{i=1}^{n_p} (y_i - \hat{y}_i)^2 \quad (3)$$

Wenn mehrere Antwortkurven definiert sind, wird die Gesamtantwort R als gemittelte Summe aller Kurven berechnet:

$$R = \frac{1}{n_R} \sum_{r=1}^{n_R} R_r \quad (4)$$

Im nächsten Schritt wird die Ergebnisqualität vor und nach der Parameteroptimierung analysiert. Wenn die Ergebnisse akzeptiert werden, generiert der Assistent ein Brennstoffzellenmodell, das alle für den Betrieb des Modells erforderlichen Komponenten enthält. Die für die Modellparametrierung verwendeten Referenzdaten werden als Eingabe für das Modell verwendet. Die Brennstoffzellen-Stack-Komponente enthält außerdem bereits die in der Optimierung ermittelten Modellparameterwerte. Aufgrund der Nutzung der gleichen Materialdatenbank und Basismodellierung zur Beschreibung von Zell-/Stackverhalten in FIRE<sup>®</sup> M und CRUISE<sup>®</sup> M können gute Übereinstimmungen zwischen den Modellen erzielt werden.



AVL Deutschland GmbH

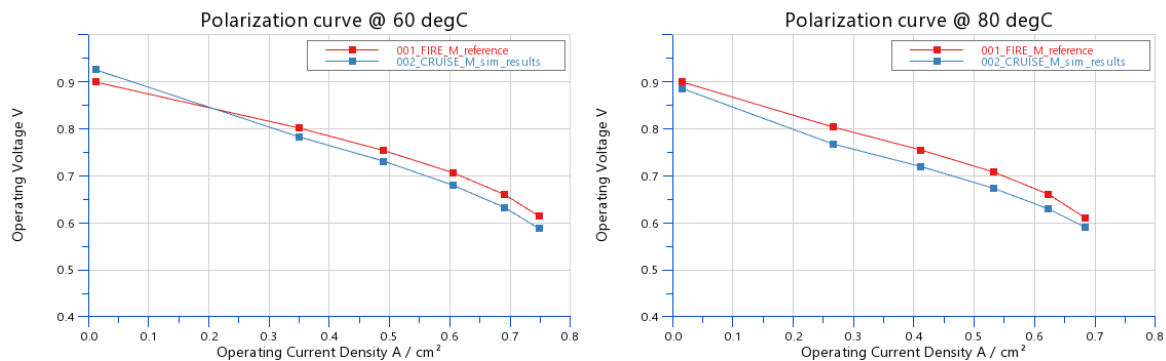


Abbildung 25: Vergleich zwischen Referenzergebnissen aus 3D-Simulation und Rechenergebnissen aus 1D-Simulationen für die Polarisationskurven unter Verwendung des mit dem Workflow parametrisierten 1D-Stapelmodells

In der konkreten Fallstudie wurde das Referenz-FIRE<sup>®</sup> M-Modell bei sechs verschiedenen Betriebsspannungen (0,6, 0,65, 0,7, 0,75, 0,8 und 0,9 V) simuliert. Zusätzlich wurden zwei Temperaturen für die Randbedingungen (60 °C und 80 °C) berücksichtigt. Die resultierenden Polarisationskurven dienen als Benchmark-Daten.

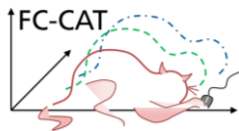
Die physikalischen Abmessungen der Brennstoffzelle und die resultierenden Polarisationskurven wurden aus dem FIRE M Modell mithilfe des Parametrierungsworkflows im CRUISE<sup>®</sup> M Brennstoffzellenmodell übernommen. Dabei wurden konsistente Materialeigenschaften für Membran, Gasdiffusionsschicht und Katalysator sichergestellt.

Abbildung 25 beinhaltet für die zwei Temperaturen den Vergleich der Polarisationskurve aus dem CRUISE<sup>®</sup> M-Brennstoffzellenmodell mit der Referenzkurve aus FIRE<sup>®</sup> M. Mithilfe von drei (von insgesamt zwölf möglichen) aktivierten Designparametern im Optimierungsvorgang und bei Vorhandensein von nur sechs Betriebspunkten pro Kurve kann bereits eine Übereinstimmung mit einer maximalen Abweichung von 6% erreicht werden.

## 2. Schlussfolgerungen

Das Ziel des Vorhabens war die Analyse und quantitative Beschreibung der funktionalen Schichten mit neuen Materialien durch experimentelle ex-situ und in-situ Charakterisierung, sowie die Entwicklung neuer Modelle (1D, 2D) zur Beschreibung der dynamischen Prozesse in diesen neuen Strukturen/Schichten bzw. die Erweiterung eines bestehenden stationären 3D-Modells für eine verbesserte realitätsnahe Abbildung der stattfindenden Prozesse.

Teilaufgabe der AVL Deutschland GmbH war hierbei die Entwicklung und Erprobung der industriell einsetzbaren Membranmodellen und damit die Verbesserung und Ertüchtigung der Simulationsmethoden zur Brennstoffzellenentwicklung, basierend auf dem Simulationswerkzeugen AVL FIRE M und CRUISE M. Durch die signifikanten Erweiterungen des Modells zur Berechnung der generierten Stromdichte aufgrund der Platinpartikel auf dem Kohlenstoffsupport (Katalytische Schicht) konnte die Genauigkeit der Simulationsmethode entscheidend verbessert werden. Dies wurde auch durch die im Projekt durchgeführten Validierungsrechnungen anhand experimenteller Untersuchungen der Projektpartner bestätigt.



### 3. Anschlussfähigkeit

#### 3.1. Verwertbarkeit

##### 3.1.1 Wissenschaftliche Verwertung

Die Analyse der und quantitative Beschreibung der funktionalen Schichten mit neuen Materialien hat bereits zu Projektlaufzeit zu einer wissenschaftlichen Verwertung geführt.

Neben zahlreichen Veröffentlichungen des IMTEK zur Charakterisierung der Leistung in Abhängigkeit von Materialeigenschaften und Betriebsbedingungen konnten auch bereits erste Ergebnisse des im Rahmen des FC-CAT Projekts entwickelten Simulationsmodelle und die dazugehörigen Simulationmethoden bei Fachtagungen vorgestellt werden [16, 17, 18].

##### 3.1.2 Nutzung und Verwertung

Die im Rahmen des FC-CAT Projekts entwickelten Simulationsmodelle und die dazugehörigen Simulationmethoden dienen der Erweiterung der Modellierungsqualität des CFD-Codes AVL FIRE M und AVL CRUISE M für die Entwicklung von Brennstoffzellen. Im Rahmen des Projekts wurden diese Modelle und Methoden weiterentwickelt und anhand experimenteller Daten verifiziert. Die entwickelten Modelle und Methoden können so bei der Entwicklung von PEM Brennstoffzellensystemen eingesetzt werden. Ein Teil der entwickelten Neuerungen werden mit zukünftigen Versionen von AVL FIRE M und AVL CRUISE M einsetzbar sein und können zusammen mit den AVL-Simulationswerkzeugen vermarktet werden. Ein Markterfolg dieser Entwicklungen ist demnach mittelfristig möglich. Die im Projekt gewonnenen Erfahrungen bei der Simulation der komplexen Strömungs- und chemischen Prozesse in PEM-Brennstoffzellen können von der AVL Deutschland auch bei Dienstleistungsprojekten genutzt werden. Der unmittelbare Nutzen für AVL Deutschland besteht darin, die bei der Entwicklung derartiger Technologien gewonnene Kompetenz über kommerzielle Simulationsdienstleistungen zu vermarkten.

#### 3.2. Veröffentlichungen aus dem FC-CAT-Projekt

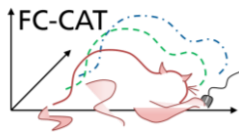
Im Rahmen des Projekts entstanden einige Veröffentlichungen:

- [16] G. Vaz, C. Fink, D. Gerteisen, "Effect of Model Parameters on the Performance of a PEM Fuel Cell Using a Pore-scale Catalyst Layer Model", ModVal 2024 – 20th Symposium on Fuel Cell and Battery Modeling and Experimental Validation, 2024
- [17] N. Raue, J. Schall, D. Gerteisen „Ortsaufgelöste 3D-CFD Modellierung einer segmentierten PEM-Brennstoffzelle: Einfluss unterschiedlicher Betriebsbedingungen auf lokale Leistungsparameter“, AVL Simulation Conference Germany, Regensburg, 2024.
- [18] G. Vaz, C. Fink, D. Gerteisen, "Effect of Model Parameters on the Performance of a PEM Fuel Cell Using a Pore-scale Catalyst Layer Model", International Hybrid Workshop "Fuel Cell MEA Design"

Für 2025 sind weitere Veröffentlichungen der Ergebnisse des Projekts geplant.

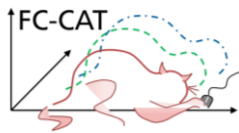
### 4. Zusammenfassung

Das FC-CAT Projekt ist weitestgehend nach der ursprünglich Arbeits-, Zeit- und Kostenplanung gelaufen. Durch die enge Zusammenarbeit zwischen Industrie-, und Hochschulpartnern hat das Projekt die meisten Projektziele erfolgreich erreicht.



## 5. Literaturverzeichnis

- [1] A. Kusoglu und A. Z. Weber, „New insights into perfluorinated sulfonic-acid ionomers.,“ *Chemical reviews*, Bd. 117, Nr. 3, pp. 987-1104, 2017.
- [2] S. Thiele, S. Vierrath, M. Klingele und R. Zengerle, „Tomographic Analysis of Polymer Electrolyte Fuel Cell Catalyst Layers: Methods, Validity and Challenges,“ *ECS Transactions*, Bd. 69, Nr. 17, pp. 409-418, 2015.
- [3] M. H. Shojaeefard, G. R. Molaeimanesh, M. Nazemian und M. R. Moqaddari, „A review on microstructure reconstruction of PEM fuel cells porous electrodes for pore scale simulation,“ *international journal of hydrogen energy*, Bd. 41, Nr. 44, pp. 20276-20293, 2016.
- [4] T. Böhm, R. Moroni, M. Breitwieser, S. Thiele und S. Vierrath, „Spatially Resolved Quantification of Ionomer Degradation in Fuel Cells by Confocal Raman Microscopy,“ *Journal of The Electrochemical Society*, Bd. 166, Nr. 7, pp. F3044-F3051, 2019.
- [5] AVL List GmbH, FIRE M User Manual - Fuel Cell, Graz, 2022.
- [6] C. Fink, S. Gössling und L. Karpenko-Jereb, „CFD Simulation of Industrial PEM Fuel Cells with Local Degradation Effects,“ in *EFCF 2019: Low-Temp. FUEL CELLS, ELECTROLYSERS & H2 Processing*, Luzern, 2019.
- [7] C. Fink und N. Fouquet, „Three-dimensional simulation of polymer electrolyte membrane fuel cells with experimental validation,“ *Electrochimica Acta*, Bd. 56, pp. 10820-10831, 2011.
- [8] L. Karpenko-Jereb, P. Innerwinkler und et. al., „A novel membrane transport model for polymer electrolyte fuel cell simulations,“ *International Journal of Hydrogen Energy*, Bd. 39, pp. 7077-7088, 2014.
- [9] X. Yuan, H. Wang, J. C. Sun und J. Zhang, „AC impedance technique in PEM fuel cell diagnosis—A review,“ *International Journal of Hydrogen Energy*, Bd. 32, Nr. 17, pp. 4365-4380, 2007.
- [10] Z. Nada, „The catalyst layer and its dimensionality – A look into its ingredients and how to characterize their effects,“ *Journal of Power Sources*, Nr. 309, pp. 141-159, 2016.
- [11] J. Wu, X. Z. Yuan, H. Wang, M. Blanco, J. J. Martin und J. Zhang, „Diagnostic tools in PEM fuel cell research: Part I Electrochemical techniques,“ *International Journal of Hydrogen Energy*, Bd. 33, Nr. 6, pp. 1735-1746, 2008.
- [12] J. Wu, X. Z. Yuan, H. Wang, M. Blanco, J. J. Martin und J. Zhang, „Diagnostic tools in PEM fuel cell research: Part II Physical/chemical methods,“ *International Journal of Hydrogen Energy*, Bd. 33, Nr. 6, p. 1747 – 1757, 2008.
- [13] D. Gerteisen, „NUMERICAL ANALYSIS OF THE IMPACT OF PT PARTICLE POSITION RESPECTIVE CARBON SUPPORT STRUCTURE ON PEMFC PERFORMANCE,“ Intern, Freiburg, 2020.
- [14] F. Fink, J. M. Edjokola, M. Talenta und M. Bodner, „Modeling of Catalyst Degradation in PEM Fuel Cells Applied to 3D Simulation,“ in *EFCF*, Luzern, 2023.
- [15] AVL List GmbH, AVL CRUISE™ M User Manual, Graz, 2023.
- [16] M. G. J. Vaz, C. Fink und D. Gerteisen, „Effect of Model Parameters on the Performance of a PEM Fuel Cell Using a Pore-scale Catalyst Layer Model,“ in *20th Symposium on Modeling and Experimental Validation of Electrochemical Energy Technologies. ModVal 2024*, Baden, Switzerland, 2024.
- [17] N. Raue, J. Schall und D. Gerteisen, „Ortsaufgelöste 3D-CFD-Modellierung einer segmentierten PEM-Brennstoffzelle: Einfluss unterschiedlicher Betriebsbedingungen auf lokale Leistungsparameter,“ in *AVL Simulation Konferenz Germany*, Regensburg, 2024.



AVL Deutschland GmbH

- [18] M. G. J. Vaz, C. Fink und D. Gerteisen, „Effect of Model Parameters on the Performance of a PEM Fuel Cell Using a Pore-scale Catalyst Layer Model,“ in *International Hybrid Workshop "Fuel Cell MEA Design"*, Freiburg, 2024.
- [19] AVL List GmbH, FIRE Electrification/Hybridization Manual, Graz, 2019.

## 6. Danksagung

Das Forschungsprojekt wurde mit Mitteln des Bundesministeriums für Wirtschaft und Technologie gefördert. Besonderer Dank gilt der Unterstützung und der konstruktiven Begleitung durch den Projektträger Forschungszentrum Jülich GmbH.

### A. Verwendete Abkürzungen

BZ	Brennstoffzelle
BMWi	Bundesministeriums für Wirtschaft und Technologie
CFD	Computational Fluid Dynamics = Strömungssimulation
CFL	Courant-Friedrichs-Lewy-Zahl
CL	Catalytic Layer
GDL	Gas Diffusion Layer
MEA	Membrane Electrode Assembly
MPL	Micro Porous Layer
PEM	Polymerelektrolyt-Membrane