Leitprojekt H_2Giga

Hannover, 30.03.2026

Verbundvorhaben H2Giga_TP_SEGIWA: Serienproduktion von Elektrolyseuren im Gigawatt-Bereich

Teilvorhaben: FleetTwin-LUH

Sachbericht zum Verwendungsnachweis - Teil II: Eingehende Darstellung

Stand:	30.03.2026
Einreichungsdatum TIB (Teil I+II):	30.03.2026
Partnerin/Partner:	Leibniz Universität Hannover – Institut für Elektrische Energiesysteme
Autorinnen/Autoren:	Richard Hanke-Rauschenbach, Christoph Eckert, Janis Woelke, Boris Bensmann
Fördertitel:	H2Giga_TP_SEGIWA; FleetTwin-LUH
Laufzeit:	01.05.2021 bis 31.12.2025
Förderkennzeichen:	03HY121G
Disclaimer:	Die Verantwortung für den Inhalt dieser Veröffentlichung liegt bei den Autoren.

Gefördert durch:

Bundesministerium für Forschung, Technologie und Raumfahrt

Finanziert von der Europäischen Union NextGenerationEU

Teil II. Eingehende Darstellung

1. Eingehende Darstellung der durchgeführten Arbeiten und Ergebnisse

Die Arbeiten der LUH im Teilvorhaben „FleetTwin-LUH“ im Rahmen von AP 4 „De-Risking durch Digitale Integration der Wertschöpfungskette“ zielten auf die Entwicklung einer skalierbaren digitalen Zustandsmodellierung für PEM-Elektrolysesysteme ab. Der methodische Ansatz wurde bewusst vom Einzelsystem ausgehend aufgebaut und systematisch zu einer übertragbaren, universell einsetzbaren Architektur weiterentwickelt. Dabei standen zwei übergeordnete Funktionalitäten im Zentrum:

- „Diagnose von Einzelsystemen als Teil einer Flotte“
- Nutzung dieser Zustandsinformation und ihre Einflussfaktoren als „Schnittstelle zwischen Feldbetrieb und Entwicklung“

Beide Funktionalitäten wurden schrittweise entlang der Arbeitspakete AP 4.1 bis AP 4.3 realisiert.

AP 4.1 – Entwickeln des Grund-Modells des FleetTwin

Im ersten Arbeitsschritt wurde ein mit den Projektpartnern abgestimmtes Anforderungsprofil für die Funktionalität „Diagnose Einzelsysteme als Teil der Flotte“ erarbeitet. Dieses umfasst die Definition geeigneter Zustandsgrößen zur Beschreibung des Gesundheitszustands (engl. *State-of-Health*, SoH), die Anforderungen an Datenverfügbarkeit und -qualität, die Einbindung typischer Betriebsprofile sowie die Festlegung einer normierten SoH-Metrik zur systemübergreifenden Vergleichbarkeit. Auf dieser Basis wurde ein konsistentes Umsetzungskonzept entwickelt, das die methodische Architektur, die Validierungsstrategie sowie die Integration in eine übergeordnete FleetTwin-Struktur beschreibt. Darüber hinaus wurde ein funktionsfähiges Modell beziehungsweise Funktionsmuster der Funktionalität „Diagnose Einzelsysteme als Teil der Flotte“ zur datenbasierten Zustandsdiagnose implementiert.

Ausgangspunkt war die industrielle Randbedingung, dass im Feldbetrieb typischerweise keine vollständigen Charakterisierungsmessungen vorliegen, sondern lediglich diskrete Betriebspunkte mit Spannungs-, Strom- und Zeitinformationen. Als Validierungsgrundlage diente ein 1400-stündiger Schnellalterungstest (engl. *Accelerated Stress Test*, AST) einer PEM-Elektrolyse-Einzelzelle mit zyklischem Lastprofil. Die Betriebsphasen (Phase 1) bildeten die Trainingsbasis; Kennlinienmessungen aus direkt anschließenden Charakterisierungsphasen (Phase 2) dienten als unbekannte Testdaten.

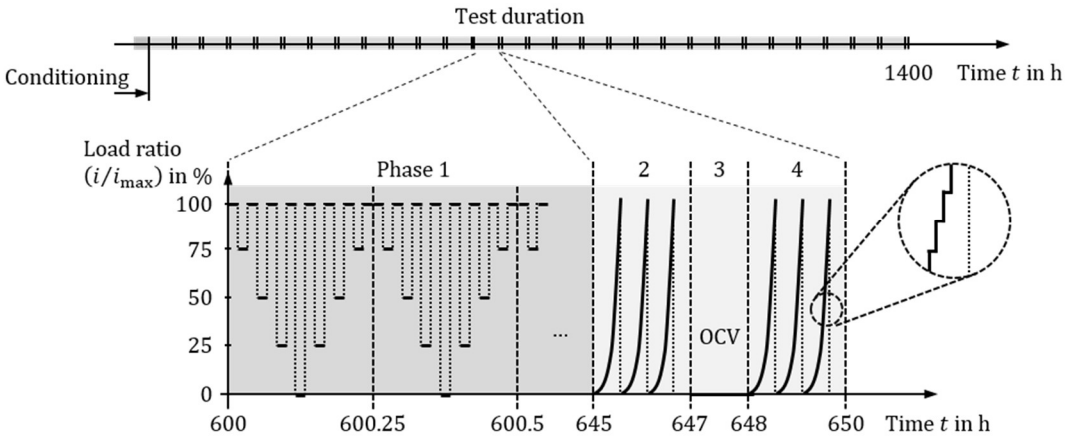

Abbildung 1: Schematische Darstellung des AST-Testprotokolls mit vier wiederkehrenden Phasen; Phase 1: Belastungsphase mit zyklischem AST-Profil, Phase 3: Belastungsphase unter OCV-Bedingungen und Phase 2/4: Charakterisierungsphasen

Es wurde eine vollständige Modellierungsinfrastruktur aufgebaut, bestehend aus:

- systematischer Datenaufbereitung (Entfernung von Ausreißern, Feature und Label Engineering, Datenglättung und –sampling etc.),
- zeitreihenspezifischer (expanding hold-out) Cross-Validation zur Vermeidung von Informationsleckagen,
- skalierbarer Feed-Forward-Netzwerkarchitektur,
- automatisierter Hyperparameter-Optimierung inkl. Model Retraining,
- residualbasierter Fehleranalyse

Diese Machine Learning-Pipeline stellt ein wesentliches Projektergebnis dar, da sie reproduzierbare Trainingsprozesse für unterschiedliche Datensätze ermöglicht und die Grundlage für eine passende Modellarchitektur bildet.

Die Ergebnisse zeigen:

- Degradationstrends können aus Betriebsdaten extrahiert und in nutzbare Trainingsdaten umgewandelt werden.
- Die zeitliche Spannungsentwicklung einzelner diskreter Betriebspunkte ist prognostizierbar.
- Die Vorhersageabweichung bleibt im niedrigen einstelligen Prozentbereich.
- Die Modellleistung ist stabil gegenüber unterschiedlichen Trainings-/Test-Splits.

Damit wurde nachgewiesen, dass eine belastbare Zustandsdiagnose eines Einzelsystems auf Basis realer Betriebsdaten möglich ist.

Entscheidend ist, dass die Modellstruktur nicht systemspezifisch formuliert wurde, sondern generisch. Die Parametrisierung erfolgt systemindividuell, während die grundlegende Architektur identisch bleibt. Damit ist bereits in AP 4.1 die strukturelle Voraussetzung geschaffen, Einzelsysteme konsistent innerhalb einer Flotte zu bewerten.

Ein wesentliches Ergebnis von AP 4.1 war die Auswahl und Implementierung des Modelltyps für die weitere Entwicklung. Auf Basis einer systematischen Bewertung hinsichtlich Datenanforderungen, Flexibilität zur Erweiterung, Robustheit gegenüber begrenzter Trainingsabdeckung sowie Eignung für fluktuierende Betriebszustände wurde ein Ansatz auf Basis künstlicher neuronaler Netze (engl. *Artificial Neural Network*, ANN) als Kernarchitektur gewählt. Dieser Modelltyp erlaubt eine lokale Approximation des Systemverhaltens durch Vergleich mit ähnlichen historischen Betriebszuständen und ist damit besonders geeignet für reale Felddaten mit begrenzter und ungleich verteilter Informationsabdeckung.

Das in AP 4.1 implementierte ANN-Modell bildet die methodische Grundlage der weiteren Arbeiten und wurde in AP 4.2 und AP 4.3 nicht durch neue Modelltypen ersetzt, sondern strukturell erweitert und physikalisch stabilisiert. Die Erweiterung in AP 4.2 bestand in der Überführung der punktuellen Zustandsrekonstruktion in eine vollständige Rekonstruktion der Polarisationskennlinie. Dazu wurde die Modellarchitektur zusätzlich physikalisch abgesichert, ohne den grundlegenden datenbasierten Charakter aufzugeben. In AP 4.3 wurde die Modellarchitektur um die Fähigkeit zur parallelen Identifikation unbekannter, nicht messbarer Parameter erweitert und um eine Methode zur Erklärung modellintern gelernter Zusammenhänge ergänzt.

Am Ende von AP 4.1 lagen die definierten Ergebnisse vollständig vor. Diese demonstrieren die reproduzierbare Rekonstruktion des aktuellen Systemzustands aus realen Betriebsdaten und bilden die methodische Grundlage für die weiterführenden Arbeiten in AP 4.2 und AP 4.3.

Der Meilenstein MS 4.1 wurde erreicht.

AP 4.2 – FleetTwin Modelle optimieren & Ergänzungen aufnehmen

In AP 4.2 wurde die in AP 4.1 entwickelte ANN-basierte Zustandsmodellierung systematisch erweitert und funktional vertieft. Während in AP 4.1 die Rekonstruktion einzelner diskreter Betriebspunkte im Vordergrund stand, bestand das Ziel von AP 4.2 darin, aus realen Betriebsdaten die vollständige Polarisationskennlinie als umfassende, normierte Zustandsgröße zu rekonstruieren.

Die Polarisationskennlinie dient hierbei als integrale SoH-Metrik, da sie

- Aktivierungsverluste,
- Ohm’sche Verluste,
- und massentransportbedingte Verluste

in einer konsistenten Darstellung vereint. Sie erlaubt somit eine physikalisch interpretierbare und systemübergreifend vergleichbare Beschreibung des aktuellen Gesundheitszustands.

Die in AP 4.1 gewählte ANN-Architektur wurde dabei nicht ersetzt, sondern strukturell erweitert. Der Modellkern bleibt eine lokale Approximation auf Basis ähnlicher historischer Zustände; erweitert wurde insbesondere die Darstellung der Zielgröße. Anstelle einzelner Spannungswerte bei diskreten Stromdichten wird nun der gesamte Kennlinienverlauf rekonstruiert. Dadurch entsteht eine konsistente Zustandsrepräsentation über den vollständigen Stromdichtebereich.

Zur systematischen Analyse potentieller Informationslücken zwischen Trainingsdaten und gewünschten Zielgrößen wurde die „Data-driven Degradation Modeling Matrix“ eingeführt. Die

Matrix stellt ein methodisches Instrument zur strukturierten Darstellung möglicher Modellierungsszenarien dar und erlaubt die Klassifikation hinsichtlich des spannungsbasierten Informationsgehalts – vgl. Abbildung 2. Die entsprechenden Reihen bzw. Spalten bilden mit steigendem Informationsgehalt (von oben nach unten bzw. links nach rechts) das Polarisationsverhalten wie folgt ab:

- über die Spannung bei eine Referenzstromdichte,
- über die Spannung bei mehrere diskrete Stromdichten,
- über die gesamte Polarisationskennlinie,
- oder über die Polarisationskennlinie inklusive Aufschlüsselung der Verlustbestandteile (Voltage Loss-Breakdown).

Untersucht wurde insbesondere das Szenario ③ unterhalb der Diagonalen, welches im Vergleich zum Modelloutput auf Trainingsdaten mit geringerem Informationsgehalt basiert und somit den vermeintlich wahrscheinlichsten realen Anwendungsfall widerspiegelt:

- Training: diskrete Betriebspunkte
- Output: vollständige Polarisationskennlinie.

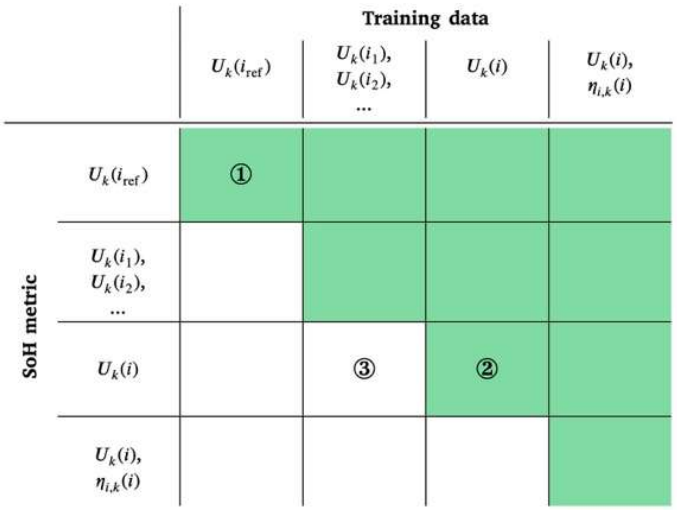

Abbildung 2: Daten-driven Degradation Modeling Matrix.

In diesem Kontext wurde das Modell um die Fähigkeit zur zeitlichen Fortschreibung der rekonstruierten Polarisationskennlinie unter definierten Lastprofilen erweitert. Damit ist die digitale Verbindung zwischen aktueller Zustandsdiagnose und zukünftiger Leistungsentwicklung strukturell angelegt.

Die Validierung von Szenario ③ auf Basis des 1400-stündigen AST-Datensatzes zeigte – vgl. Abbildung 3:

- Eine erfolgreiche Rekonstruktion bzw. Vorhersage zukünftiger Polarisationskennlinien.
- Testabweichungen im Bereich von etwa −1 % bis +2,75 % über den mittleren Stromdichtebereich.

- Abweichungen von mehr als 10% im niedrigen Stromdichtebereich, in dem zur Rekonstruktion kaum relevante Betriebsdaten vorliegen.
- Stabile zeitliche Extrapolation über den gesamten Testzeitraum.

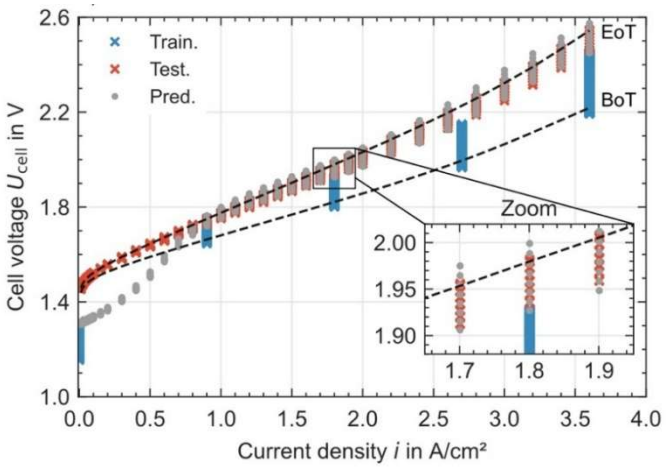

Abbildung 3: Ergebnis der ANN-Vorhersage zukünftiger Polarisationskurven auf Basis diskreter historischer Betriebspunkte. Blau: Trainingsdaten (diskrete Betriebspunkte), rot: Testdaten (zukünftige Polarisationskennlinien) und grau: Modellvorhersage.

Die Analyse der Ergebnisse macht deutlich, dass rein datengetriebene Ansätze bei signifikanten Informationslücke zu teilweise physikalisch inkonsistenten Vorhersagen und somit zu nicht plausiblen Kurvenverläufe neigen können. Für die vollständige Realisierung der Funktionalität „Diagnose Einzelsysteme als Teil der Flotte“ ist jedoch eine physikalisch konsistente Rekonstruktion und Fortbeschreibung des Gesundheitszustands zwingend erforderlich. Vorhersagen müssen auch außerhalb des unmittelbar beobachteten Betriebsbereichs stabil und interpretierbar bleiben. Zur Vervollständigung wurde die bestehende ANN-basierte Kernarchitektur daher um eine physikalische Strukturkomponente erweitert und auf diese Weise zu einem physik-informierten Ansatz ausgebaut (engl. *Physics-informed Machine Learning*). Hierzu wurde eine algebraische Gleichung zur Beschreibung der Polarisationskennlinie als feste Referenz in die Modellarchitektur integriert. Der Zustand zum Testbeginn (engl. *Begin-of-Test*, BoT) dient als physikalischer Ankerpunkt; das datengetriebene Modell lernt ausschließlich die degradationsbedingte Abweichung von dieser Referenzkennlinie – vgl. Abbildung 4.

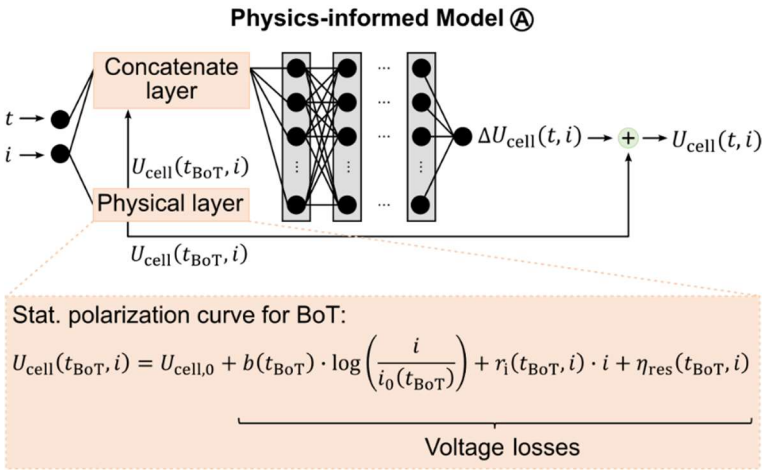

Abbildung 4: Schematische Abbildung der erweiterten physik-informierten ANN-Modellarchitektur.

Diese Erweiterung verfolgt zwei Ziele:

- Sicherstellung physikalischer Konsistenz über den gesamten Stromdichtebereich.
- Stabilisierung der Extrapolation unter eingeschränkter Trainingsabdeckung.

Die ANN-basierte Logik bleibt dabei als datengetriebener Kern erhalten. Es handelt sich somit nicht um einen Modellwechsel, sondern um eine strukturelle Erweiterung desselben Modelltyps. Die physikalische Referenz wirkt als regulierende Struktur, während die datengetriebene Komponente weiterhin lokale Zustandsinformationen aus ähnlichen historischen Betriebssituationen ableitet.

Zusätzlich wurde eine Model Ensemble-basierte Unsicherheitsquantifizierung implementiert, um das Vertrauen in die Modellvorhersagen zu erhöhen. Dazu wurden mehrere Modelle mit der identischen optimierten ANN-Architektur, jedoch unterschiedlichen zufälligen Initialisierungen, trainiert und verwendet. Die Median-Vorhersage liefert eine robuste Schätzung; 90 %-Prediction-Intervals erlauben eine quantitative Bewertung der Vorhersagesicherheit.

Die Ergebnisse zeigen – vgl. Abbildung 5:

- Eliminierung unphysikalischer Unterschreitungen der BoT-Kennlinie,
- physikalisch konsistente Kurvenform über den gesamten Stromdichtebereich,
- robuste Generalisierungsfähigkeit trotz reduzierter Informationsabdeckung der Trainingsdaten.

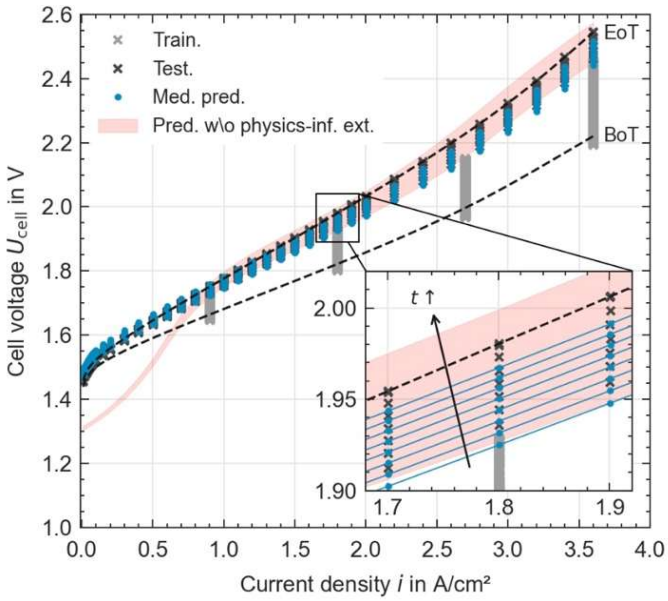

Abbildung 5: Ergebnis der physik-informierten ANN-Vorhersage zukünftiger Polarisationskurven auf Basis diskreter historischer Betriebspunkte. Hellgrau: Trainingsdaten (diskrete Betriebspunkte), dunkelgrau: Testdaten (zukünftige Polarisationskennlinien), blau: physik-informierte Medianvorhersage des Model Ensembles und rot: Modellvorhersage ohne physik-informierte Erweiterung.

Die Validierung erfolgte unter mehreren realistischen Datenszenarien zur weiteren systematischen Einschränkung der zur Verfügung stehenden Trainingsdaten, darunter:

- begrenzter Betriebsbereich der diskreten Betriebspunkte,

- spärlich und ungleichmäßig verteilte diskrete Betriebspunkte,
- Kombination aus beidem.

Damit wurde das in AP 4.1 entwickelte Modell zu einem finalen Modell/Funktionsmuster der Funktionalität „Diagnose Einzelsysteme als Teil der Flotte“ weiterentwickelt. Die Diagnose beschränkt sich nicht mehr auf punktuelle Zustandsindikatoren, sondern liefert eine normierte und vergleichbare Zustandsbeschreibung, die eine relative Einordnung mehrerer Systeme ermöglicht.

Parallel hierzu wurde das Anforderungsprofil für die Funktionalität „Schnittstelle zwischen Feld und Entwicklung“ gemeinsam mit den Projektpartnern konkretisiert und abgestimmt. Dieses beschreibt insbesondere:

- die Überführbarkeit von Felddaten in eine physikalisch interpretierbare Zustandsrepräsentation in Form der Parameter der Polarisationskennlinie,
- die Möglichkeit zur Bewertung zukünftiger Leistungsentwicklungen unter gegebenen Betriebsprofilen,
- die Vergleichbarkeit unterschiedlicher Systeme hinsichtlich Degradationsverhalten,
- die Nutzung dieser Informationen für betriebliche und konstruktive Optimierungsentscheidungen.

Auf Basis dieses Anforderungsprofils wurde ein entsprechendes Umsetzungskonzept entwickelt. Darüber hinaus wurde das Modell in Bezug auf die Funktionalität „Schnittstelle zwischen Feld und Entwicklung“ weiterentwickelt. Dieses basiert weiterhin auf der ANN-Kernarchitektur, erweitert um die Fähigkeit zur Identifikation unbekannter, nicht messbarer (latenter) Parameter und zur Erklärung der modellintern gelernten Zusammenhänge. Dazu wurde zum einen eine inverse Modellformulierung grundlegend realisiert und zum anderen ein modell-agnostischer Ansatz aus dem Bereich der erklärbaren künstlichen Intelligenz (engl. *Explainable AI*, XAI) zur Bestimmung der sogenannten Feature Importance in den bestehenden Modellierungsworkflow integriert.

Damit ist die Verbindung zwischen aktueller Zustandsdiagnose bzw. zukünftiger Leistungsentwicklung und der zusätzlichen Parameteridentifikation sowie der Erklärbarkeit der Modellvorhersagen strukturell angelegt und für die Erweiterung in AP 4.3 vorbereitet.

Der Meilenstein MS 4.2 wurde erreicht.

AP 4.3 FleetTwin zum Gesamtmodell vervollständigen und validieren

In AP 4.3 wurde der in AP 4.1 und AP 4.2 entwickelte Ansatz zum vollständigen FleetTwin-Gesamtmodell weiterentwickelt und umfassend validiert. Ziel war es, die bisher aufgebaute, physikalisch stabilisierte und unter realistischen Datenszenarien getestete Zustands- und Entwicklungsmodellierung strukturell um die Parameteridentifikation sowie die Erklärbarkeit der Modellvorhersagen zu erweitern.

Dazu wurde über eine weitere Anpassung der physik-informierten ANN-Modellarchitektur ein inverses Modellierungsproblem formuliert und so die datengetriebene Identifikation latenter Parameter der Polarisationskennlinie realisiert (b: Tafel-Steigung, i_0: Austauschstromdichte, r_i: Ohm’scher Widerstand, η_res: Residualverluste) – vgl. Abbildung 6. Dadurch können degradationsrelevante Verlustanteile indirekt quantifiziert werden. Dies erhöht die

Interpretierbarkeit des Modells erheblich und erlaubt eine differenziertere Analyse systematischer Degradationsmuster. In Bezug auf die vorgestellte „Data-driven Degradation Modeling Matrix“ (vgl. Abbildung 2) sowie das zuvor diskutierte Szenario ③ bedeutet das, dass bei gleichbleibenden Trainingsdaten ein Modelloutput mit erhöhtem Informationsgehalt realisiert wurde. Durch dieses zusätzliche Ungleichgewicht befindet sich dieses Szenario eine Reihe weiter unten in der Matrix:

- Training: diskrete Betriebspunkte
- Output: vollständige Polarisationskennlinie inklusive Aufschlüsselung der Verlustbestandteile (Voltage Loss-Breakdown).

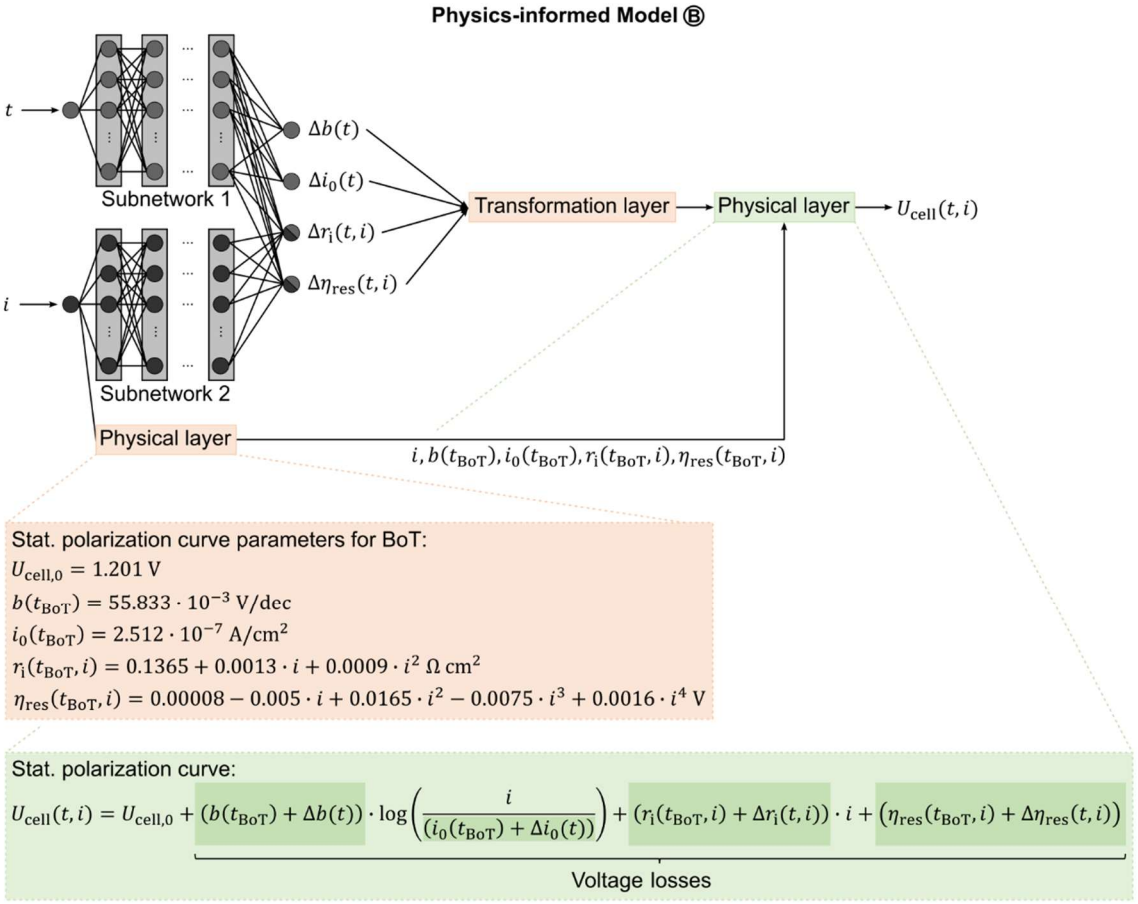

Abbildung 6: Schematische Abbildung der physik-informierten ANN-Modellarchitektur für die inverse Modellformulierung zur Identifikation latenter Parameter der Polarisationskennlinie.

Die Validierung erfolgte erneut anhand des 1400-stündigen AST-Datensatzes. Die entsprechenden Ergebnisse für den Fall, dass Informationen über die Größenordnung der Parameteränderungen vorliegen (z.B. aus der Flotte), zeigen qualitativ eine gute Übereinstimmung der Model Ensemble-Vorhersagen (blau) mit den tatsächlichen Verläufen der Parameteränderungen (schwarz), sowohl im Trainings- als auch im Testzeitraum – vgl. Abbildung 7. Dies unterstreicht in einer weiteren Variante das grundlegende Potential von physik-informierten im Vergleich zu rein datengetriebenen ANN-Modellen und verdeutlicht zudem die Fähigkeit zur datengetriebenen Parameteridentifikation anhand diskreter Betriebsdaten.

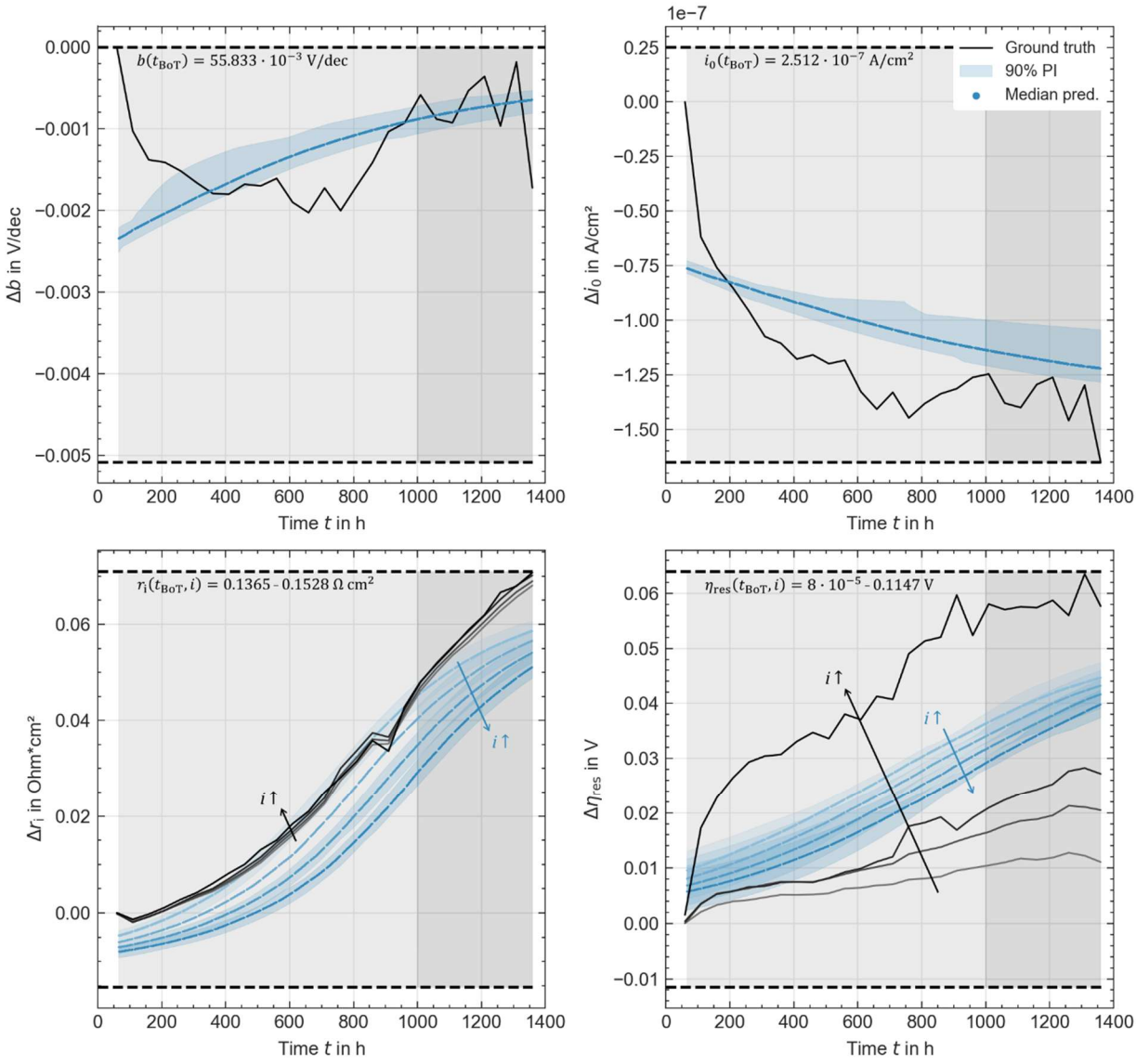

Abbildung 7: Ergebnis der identifizierten Verläufe der latenten Parameteränderungen im Vergleich zum BoT-Zustand; blau: Medianvorhersagen und Prediction Interval des Model Ensembles, schwarz: tatsächliche Parameteränderungen zur Validierung (ermittelt aus Charakterisierungsphasen), hellgrau: Trainingszeitraum und dunkelgrau: Testzeitraum.

Der zweite elementare Bestandteil der Funktionalität „Schnittstelle zwischen Feld und Entwicklung“ bezieht sich auf die vollumfängliche Realisierung der XAI-Analyse zur Erklärung der ANN-Modellvorhersagen und damit zur Identifikation und Quantifizierung dominierender betriebsbedingter Alterungseinflüsse, indem intern gelernten Zusammenhänge anhand der Feature Importance sichtbar gemacht werden. Da die Grundlage dessen ein umfassenden, hypothesengetriebenes Feature Engineering darstellt, wurde gezielt zur Validierung dieser Modellerweiterung ein zusätzlicher, realitätsnäherer und möglichst viele verschiedene Betriebsmodi abdeckender, AST entwickelt und umgesetzt. Dieser enthält in diskreten Lastpunkten sowohl konstante als auch dynamische Betriebsphasen, umfasst für die Fluktuationen unterschiedliche Amplituden und Haltedauern und besteht insgesamt aus verschiedene Phasenlängen – vgl. Abbildung 8:

- Lastpunkt: 0.5, 1.5 und 3 A/cm² (+ OCV und const. voltage hold bei 1.45 V)
- Betriebsmodus: konstant, dynamisch
- Fluktuation:
  - Amplitude: 5, 10 und 30 % relativ zum Lastpunkt
  - Haltedauer: 1, 3, 7.5 min
- Phasenlänge: 0.25, 1, 24 h (bei OCV max. 6 anstatt 24 h)

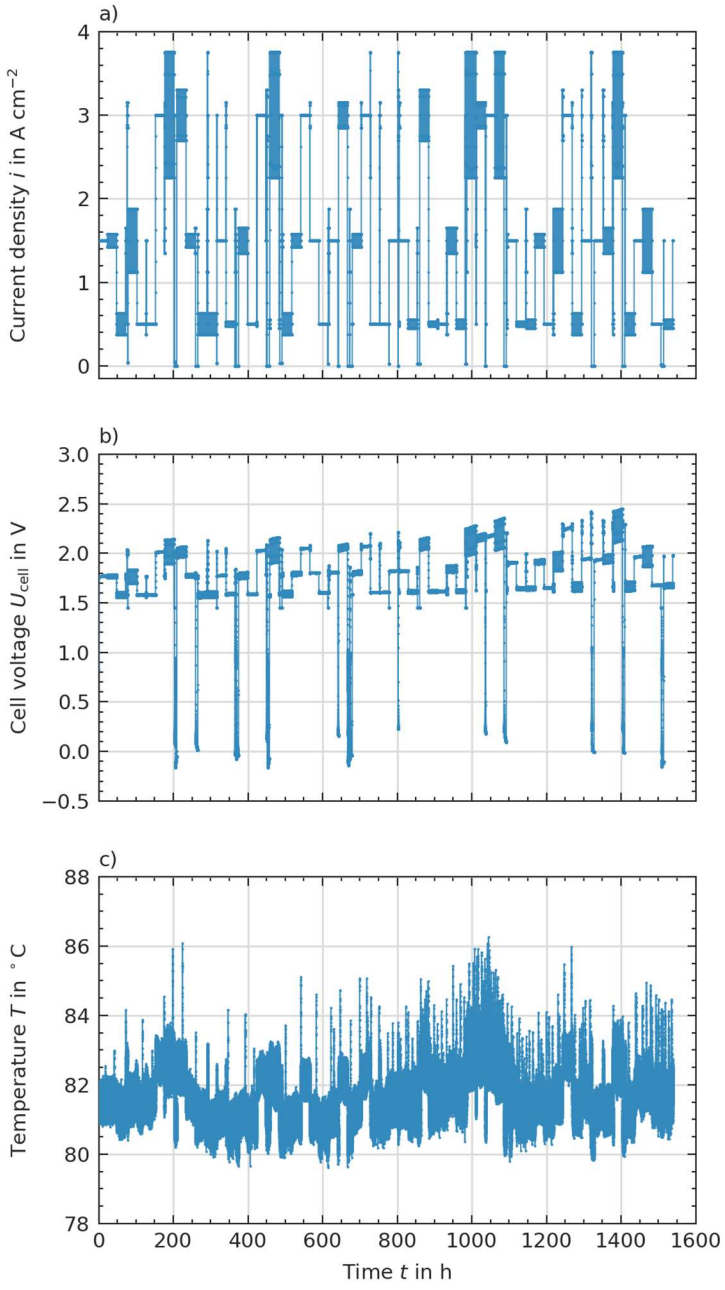

Abbildung 8: Messdaten des neuen AST mit einem vielseitigen Betriebsprofil zur Validierung der XAI-Analyse; a) Stromdichte, b) Zellspannung und c) Temperatur am Zelleingang.

Basierend auf den Messdaten wurde ein Feature Engineering durchgeführt, welches die einzelnen Betriebsmodi in separate, kumulative Features übersetzt. Diese wurden anschließend genutzt, um die fortlaufende Degradation zu gewählten Referenzbedingungen (primär bestehend aus i_{ref} = 1.5 A/cm² ± 1 %, T_{ref} = 81.5°C ± 1 %, $t(i_{ref}, T_{ref})$ = ≥2min) modelltechnisch zu beschreiben und den Lern- bzw. Trainingsprozess post-hoc u.a. mithilfe der XAI-Methode SHAP (SHapley Additive exPlanations) zu erklären. Zur umfassenden Validierung der Methode wurde dies für drei verschiedene Feature Sets mit unterschiedlicher Granularität durchgeführt. Die dabei resultierenden SHAP-Ergebnisse verdeutlichen grundsätzlich – vgl. Abbildung 9.:

- die ermittelte Feature Importance, sortiert nach dem durchschnittlichen Einfluss auf den Modelloutput (Rangliste dominierender betriebsbedingter Alterungseinflüsse),
- den qualitativen Einfluss einzelner Features auf die Degradation.

Den größten alterungstreibenden Einfluss (pos. SHAP values) bezogen auf die gewählten Referenzbedingen haben für das ANN-Modell im Fall des mittleren Basis Feature Sets demnach zwei Betriebsmodi im hohen Lastbereich („3 A/cm² | dyn. ± 25% “ und „3 A/cm² | const.“) sowie der konstante Betrieb im mittleren Lastbereich „1.5 A/cm² | const.“. Dem Betrieb bei Leerlaufspannung (engl. *Open Circuit Voltage*, OCV) „0 A/cm² (OCV)“ wird ebenfalls eine hohe Bedeutung zugeschrieben, jedoch mit entgegengesetzter, regenerativer Wirkung (reversible Degradation, neg. SHAP values). Darüber hinaus zeigt sich, dass der Lastbereich grundsätzlich der maßgebliche Alterungstreiber zu sein scheint, da im Mittel die Features für den Lastpunkt von 3 A/cm² höher einsortiert werden als die für 1.5 A/cm² und die wiederum im Vergleich zu 0.5 A/cm². Eine allgemeingültige Aussage zum Einfluss von stationärem Betrieb gegenüber fluktuierendem Betrieb auf die Degradation lässt sich nicht ableiten. Während im mittleren Lastpunkt dem konstanten Betrieb der größte Einfluss zugeschrieben wird („1.5 A/cm² | const.“), sind es im hohen und niedrigen Lastpunkt jeweils dynamische Betriebsmodi („3 A/cm² | dyn. ± 25% “, „0.5 A/cm² | dyn. ± 10% “). Nichtsdestotrotz liefert eine derartige Analyse erste fundierte Anhaltspunkte zur Quantifizierung der Alterungseinflüsse einzelner Betriebsmodi, um basierend darauf nachgelagerte Fragestellungen wie z.B. die Ableitung alterungsvermeidender Betriebsführungsstrategien zu adressieren.

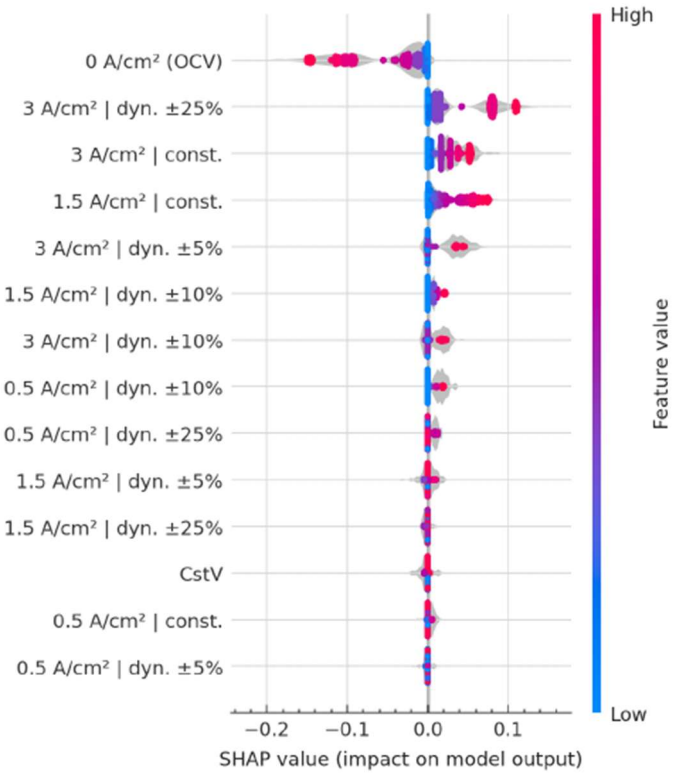

Abbildung 9: SHAP-Ergebnisse der XAI-Analyse für das mittlere Basis Feature Set; farbig: Medianvorhersage, grau: Model Ensemble.

Mit dieser Erweiterung ist der FleetTwin als Gesamtmodell vervollständigt. Er umfasst nun:

- Rekonstruktion des aktuellen Gesundheitszustands eines Einzelsystems,
- normierte Zustandsbeschreibung auf Kennlinienebene,
- zeitliche Fortschreibung unter gegebenen Lastprofilen,
- physikalisch abgesicherte Extrapolation,
- interpretierbare Parameterentwicklung,
- XAI-Analyse zur Quantifizierung der Alterungseinflüsse einzelner Betriebsmodi.

Damit wird die zweite Funktionalität vollständig realisiert: Die digitale Schnittstelle zwischen Feld und Entwicklung. Felddaten werden nicht nur diagnostisch ausgewertet, sondern in strukturierte, physikalisch abgesicherte Zustands- und Entwicklungsinformationen überführt. Diese können zur Bewertung von Betriebsstrategien, zur Abschätzung verbleibender Leistungsreserven sowie zur Identifikation systematischer Schwachstellen genutzt werden.

Die wissenschaftliche Validierung des vervollständigten FleetTwin-Modells ist in zwei Veröffentlichen dokumentiert.

Der Meilenstein MS 4.3 wurde vollständig erreicht.

2. Darstellung der wichtigsten Positionen des zahlenmäßigen Nachweises

Die im Teilvorhaben eingesetzten Mittel entfielen im Wesentlichen auf wissenschaftliches Personal. Insgesamt wurde eine Stelle eines wissenschaftlichen Mitarbeiters (283.898,04 €) und wissenschaftliche Hilfskräfte (16.376,52 €) aus den Personalmitteln in Höhe von insgesamt 298.863,72 € finanziert. Zudem wurden 13.881,41 € für Dienstreisen ausgegeben. Dies beinhaltet Projekttreffen und Verwertung auf Konferenzen.

Der personelle Aufwand war erforderlich für die Entwicklung, Implementierung und Validierung der datengetriebenen Modellarchitektur, einschließlich Datenaufbereitung, Trainings- und Validierungsprozessen sowie der physikalischen Erweiterung des FleetTwin. Die eingesetzten Ressourcen waren unmittelbar projektbezogen und notwendig zur Erreichung der wissenschaftlich-technischen Zielsetzungen.

3. Notwendigkeit und Angemessenheit der geleisteten Projektarbeiten

Universitäten verfügen in der Regel nicht über ausreichende Eigenmittel für größere, mehrjährige Forschungsaktivitäten. Die beantragte Zuwendung war daher erforderlich, um der LUH die wissenschaftliche Bearbeitung des Teilvorhabens sowie die Mitarbeit im Verbundprojekt zu ermöglichen. Die eingesetzten Mittel beschränkten sich auf Personalkosten und standen in einem angemessenen Verhältnis zum Umfang und zur wissenschaftlichen Tiefe der erzielten Ergebnisse.

4. Voraussichtlicher Nutzen, insbesondere Verwertbarkeit des Ergebnisses – auch konkrete Planungen für die nähere Zukunft - im Sinne des fortgeschriebenen Verwertungsplans

Im Projekt wurde eine methodisch anspruchsvolle, physik-informierte Zustands- und Entwicklungsmodellierung für PEM-Elektrolysesysteme entwickelt. Die Modellarchitektur geht hinsichtlich struktureller Tiefe, Parametrierbarkeit und Validierungsumfang deutlich über übliche empirische Industrieansätze hinaus.

Im Rahmen des Projekts konnte das entwickelte FleetTwin-Modell mit einem einfacheren, empirisch parametrisierten Industriemodell von Siemens Energy verglichen werden. Dabei zeigte sich, dass die erhöhte Modellkomplexität insbesondere bei reduzierter Datenabdeckung und bei Extrapolation außerhalb des Trainingsbereichs Vorteile hinsichtlich Stabilität, physikalischer Konsistenz und Interpretierbarkeit bietet.

Während im industriellen Umfeld aus Gründen der Rechenzeit, Robustheit und Implementierbarkeit häufig vereinfachte Modelle eingesetzt werden, ermöglicht der entwickelte Ansatz eine tiefergehende Analyse von Degradationsmechanismen sowie eine strukturierte Bewertung von Betriebsstrategien.

Der Nutzen liegt daher insbesondere in:

- der wissenschaftlich abgesicherten Weiterentwicklung datenbasierter Zustandsmodelle,
- der Verbesserung der Prognosestabilität unter realen Feldbedingungen,
- der Identifikation systematischer Degradationsmuster,

- sowie der Unterstützung von Entwicklungsentscheidungen durch physikalisch interpretierbare Modellparameter und der Quantifizierung der Alterungseinflüsse einzelner Betriebsmodi.

Die Ergebnisse bilden damit eine belastbare Grundlage für zukünftige industrielle Weiterentwicklungen und mögliche schrittweise Überführungen in produktionsnahe Monitoring-Umgebungen.

5. Während der Durchführung des Vorhabens bekannt gewordener Fortschritt auf dem Gebiet des Vorhabens bei anderen Stellen

Während der Projektlaufzeit wurden verstärkt datengetriebene Ansätze zur Zustandsbewertung elektrochemischer Energiesysteme publiziert. Insbesondere die Kombination von Machine Learning-Methoden mit physikalischen Modellstrukturen („Physics-informed Machine Learning Models“) sowie die Erklärbarkeit der Modellvorhersagen über Explainable AI (XAI)-Ansätze stellen wachsende Forschungsfelder dar. Die im Teilvorhaben entwickelte Architektur greift diese Entwicklungen auf und erweitert sie um eine explizite Flottenübertragbarkeit sowie eine strukturierte Analyse von Informationslücken im Trainingsdatensatz.

6. Liste der erfolgten oder geplanten Veröffentlichungen des Ergebnisses nach Nr. 5 der NKBF/NABF

Datum	Art der Veröffentlichung	Titel, Quelle/Zitat (Journal, Konferenz)	Autoren	Link
27.08.23	Konferenzbeitrag	Investigating the Potential of a Machine Learning-based Approach for Degradation Modelling in Proton Exchange Membrane (PEM) Water Electrolysis (ICE 2023)	Janis Pablo Woelke, Christoph Eckert, Alexander Rex, Boris Bensmann, Richard Hanke-Rauschenbach	Link
11.03.24	Poster	Machine Learning for Degradation Modelling in Proton Exchange Membrane (PEM) Water Electrolysis Research (Machine Learning Summer School 2024)	Janis Pablo Woelke, Christoph Eckert, Boris Bensmann, Richard Hanke-Rauschenbach	
09.10.24	Konferenzbeitrag	Towards the Prediction of Future Polarization Curves from Operating Data: Machine Learning-Based Investigations for Degradation Modelling of PEM Water Electrolysis Cells (ECS PRiME 2024)	Janis Pablo Woelke, Christoph Eckert, Alexander Rex, Boris Bensmann, Richard Hanke-Rauschenbach	Link
22.05.24	Paper	Machine learning in proton exchange membrane water electrolysis—A knowledge-integrated framework (Applied Energy)	Xia Chen, Alexander Rex, Janis Woelke, Christoph Eckert, Boris Bensmann, Richard Hanke-Rauschenbach, Philipp Geyer	Link
31.03.25	Paper	Cross-method overview of fleet-based machine health estimation and prediction: a practical guide for industrial applications (IEEE Access)	Xuqian Yan, Janis Woelke, Boris Bensmann, Christoph Eckert, Richard Hanke-Rauschenbach, Astrid Nieße	Link

21.06.25	Paper	Predicting Future Polarization Curves from Operating Data: Machine Learning-Based Investigation of Degradation Modeling Concepts for PEM Water Electrolysis (Energy and AI)	Janis Woelke, Christoph Eckert, Alexander Rex, Boris Bensmann, Richard Hanke-Rauschenbach	
In preparation	Paper	"Bridging Information Gaps in PEM Water Electrolysis Degradation Modeling: From Physical Consistency to Latent Parameter Inference via Physics-Embedded Residual Networks"	Janis Woelke, Lukas Koenemann, Christoph Eckert, Boris Bensmann, Richard Hanke-Rauschenbach	
In preparation	Paper	"Towards Explaining Operational Degradation in PEM Water Electrolysis: Synergizing Deep Learning with Explainable AI Methods"	Janis Woelke, Jon Hacke, Boris Bensmann, Richard Hanke-Rauschenbach	