

Hannover, 30.03.2026

**Verbundvorhaben H2Giga_TP_DERIEL: De-Risking PEM Elektrolyseur
Teilprojekt: Beiträge zur Entwicklung, Optimierung und Validierung eines
digitalen Zwillings für ein großskaliges Elektrolyse-Testsystem**

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, Boris Bensmann
Fördertitel:	H2Giga_TP_DERIEL – TP LUH - Beiträge zur Entwicklung, Optimierung und Validierung eines digitalen Zwillings für ein großskaliges Elektrolyse-Testsystem
Laufzeit:	01.05.2021 bis 31.12.2025
Förderkennzeichen:	03HY122G
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

AP2.1 – Grundlagenentwicklung und initiale Modellimplementierung

Im Arbeitspaket AP2.1 wurden die methodischen Grundlagen für die beiden im Antrag definierten Funktionalitäten Prozessanalyse/-diagnose sowie Alterungsmodellierung/Remaining Useful Lifetime geschaffen. Ziel war die Implementierung physikbasierter, numerisch stabiler Modellarchitekturen als Ausgangspunkt für die spätere physikalische Vertiefung und Validierung.

Physikochemisches Stack-Modell

Im Rahmen von AP 2.1 wurde ein physikochemisches Stack-Modell implementiert. Dieses wurde als pseudo-zweidimensionaler Ansatz ausgeführt und dient der Beschreibung der elektrochemischen und thermischen Prozesse im Stack. Der Schwerpunkt lag dabei auf der räumlichen Auflösung der Temperaturverteilung entlang der aktiven Fläche. Das Modell basiert auf den zugrundeliegenden Stoff-, Energie- und Ladungsbilanzen sowie den relevanten elektrochemischen Kinetiken. Durch die laterale Diskretisierung konnte die Verteilung der Temperatur innerhalb des Stacks erfasst werden. Ziel war die physikalisch konsistente Abbildung thermischer Inhomogenitäten als Grundlage für die spätere Prozessanalyse. Parallel wurde ein Kalibrierungskonzept entwickelt, das die spätere Anpassung des Modells an Messdaten strukturiert vorbereitet.

Damit lag am Ende von AP 2.1 ein implementiertes, lauffähiges pseudo-2D-Stackmodell vor, das insbesondere zur Analyse der Temperaturverteilung eingesetzt werden konnte.

Alterungsmodellierung – Grundstruktur

Für die Funktionalität „Alterungsmodellierung/Remaining Useful Lifetime“ wurde zunächst eine systematische Recherche und Zusammenstellung der relevanten Alterungsmechanismen durchgeführt. Auf Basis dieser Analyse wurde der Fokus auf die chemische Membrandegradation gelegt. Es wurde ein erstes, als OD-Variante implementiertes Degradationsmodell entwickelt, das die zeitliche Entwicklung der Membrandegradation beschreibt. Dieses Modell konzentrierte sich auf die wesentlichen chemischen Mechanismen innerhalb der Membran und stellte die Grundlage für die spätere räumliche Erweiterung dar. Damit war die Grundfunktionalität der Alterungsmodellierung als integrale Betrachtung ohne ortsaufgelöste Membran implementiert.

Ergebnis und Meilenstein

Mit Abschluss von AP 2.1 lagen vor:

- ein implementiertes pseudo-zweidimensionales Stack-Modell mit Fokus auf der Abbildung thermischer Inhomogenitäten,
- ein Kalibrierungskonzept zur späteren datenbasierten Anpassung,

- ein implementiertes OD-Degradationsmodell mit Schwerpunkt auf chemischer Membrandegradation.

Damit wurden die Grundfunktionalitäten des ModellTwin implementiert. Der Meilenstein MS2.1 „Grundfunktionalitäten des ModellTwin implementiert“ wurde fristgemäß erreicht.

AP 2.2 Grundmodell erweitern und optimieren

In AP 2.2 wurden die in AP 2.1 entwickelten Grundmodelle sowohl im Bereich der Prozessanalyse als auch der Alterungsmodellierung physikalisch erweitert, strukturell vertieft und systematisch ausgewertet. Ziel war die Validierung zentraler Modellannahmen, die Erweiterung der physikalischen Beschreibungstiefe sowie die Vorbereitung einer späteren datenbasierten Parametrisierung.

Erweiterung der Funktionalität „Prozessanalyse/-diagnose“

Das entwickelte Grundmodell wurde in AP 2.2 weiter komplementiert und detailliert ausgewertet. Ziel war die Untersuchung zusätzlicher physikalischer Effekte sowie die Bewertung ihrer Relevanz für die Systembeschreibung. Zunächst wurde das Modell auf Zellebene um Kapillardruckeffekte erweitert. Hierfür wurde ein Kapillardruckansatz auf Basis der Leverett-J-Gleichung implementiert, um die Wechselwirkung zwischen Flüssig- und Gasphase in der porösen Transportlage (PTL) realitätsnäher abzubilden.

Der Vergleich der Fluidverteilung am Outlet einer Zelle bei Vernachlässigung von Kapillareffekten sowie bei Berücksichtigung des Kapillardruckmodells zeigte, dass die Integration des Kapillardrucks nur einen geringen Einfluss auf die Fluidverteilung besitzt. Es wurde eine leichte Erhöhung des Gasphasenanteils in der anodischen PTL festgestellt, jedoch ohne signifikante strukturelle Änderung des Verteilungsmusters. Damit konnte gezeigt werden, dass Kapillardruckeffekte unter den betrachteten Bedingungen nur eine untergeordnete Rolle spielen.

Im nächsten Schritt wurde das Modell auf Stackebene erweitert, um insbesondere Temperatureffekte in Randzellen untersuchen zu können. Hierbei wurde der Einfluss einer unisolierten Endplatte analysiert. Die Simulationen zeigten, dass in der unteren Randzelle eine deutlich niedrigere Temperatur auftreten kann als in den inneren Zellen. Bereits in der zweiten Zelle reduzierte sich die Temperaturanomalie auf unter 0,1 K im Vergleich zu den übrigen Zellen.

Diese Ergebnisse (s.u. Krenz et al.) verdeutlichen:

- die Sensitivität der Randzellen gegenüber thermischen Randbedingungen,
- die Bedeutung einer korrekten Parametrierung der Wärmeleitfähigkeiten,
- die Notwendigkeit einer geeigneten Isolierung zur Herstellung homogener Bedingungen.

Abschließend konnte mithilfe des 3D-Modells bestätigt werden, dass die im zuvor entwickelten pseudo-2D-Temperaturmodell getroffenen Annahmen zulässig sind. Die dominanten thermischen Effekte werden

durch den reduzierten Ansatz korrekt abgebildet. Damit wurde die physikalische Konsistenz des pseudo-2D-Modells abgesichert.

Die Ergebnisse des pseudo-2D-Temperaturmodells wurden in einer wissenschaftlichen Veröffentlichung publiziert. Diese Publikation dokumentiert die Herleitung, Parametrisierung und Validierung des reduzierten Ansatzes und unterstreicht die wissenschaftliche Relevanz der entwickelten Prozessanalyse.

Erweiterung der Funktionalität „Alterungsmodellierung/Remaining Useful Lifetime“

Im Bereich der Alterungsmodellierung wurde in AP 2.2 ein generalisiertes numerisches Framework entwickelt, das die Beschreibung gekoppelter Transport- und Reaktionsprozesse innerhalb der gesamten Catalyst-Coated-Membrane (CCM) ermöglicht.

Das Framework basiert auf einem eindimensionalen physikalischen, das die räumlich aufgelöste Berechnung relevanter Spezieskonzentrationen erlaubt. Berücksichtigt werden insbesondere Diffusion, Migration, konvektive Transportanteile und gekoppelte chemische Reaktionsmechanismen.

Der Fokus lag weiterhin auf der chemischen Membrandegradation, insbesondere auf den für diesen Mechanismus relevanten Spezies und deren Wechselwirkungen. Im Unterschied zur in AP 2.1 implementierten 0D-Variante erlaubt das 1D-Modell nun die räumliche Auflösung von Konzentrationsprofilen über die gesamte CCM hinweg. Dadurch können Gradienten innerhalb von Anoden-Katalysatorschicht, Membran und Kathoden-Katalysatorschicht abgebildet werden. Die Modellarchitektur wurde modularisiert, sodass zusätzliche Alterungsmechanismen strukturell integrierbar sind. Damit entstand ein generalisiertes Degradationsframework, das nicht ausschließlich auf die chemische Membrandegradation beschränkt ist.

Im weiteren Verlauf wurde eine prototypische Implementierung des Degradationsmodells erstellt und an Siemens Energy übergeben. Diese erlaubt die Nutzung realer Stromprofile aus Labortests als Eingangsdaten und die Simulation zeitlich und räumlich aufgelöster Konzentrationsprofile degradationsrelevanter Spezies.

Die mechanistische Struktur und das numerische Framework des Alterungsmodells wurden im Rahmen einer Präsentation auf der ECS (Electrochemical Society) vorgestellt. Dort wurde insbesondere die generische Erweiterbarkeit des Ansatzes sowie der Degradationsmechanismus diskutiert.

1D-Modellstruktur

Die CCM wird entlang ihrer Dickenrichtung in Kontrollvolumina unterteilt. Für jedes Volumen werden die zeitabhängigen Stoffbilanzen relevanter Spezies gelöst. Berücksichtigt werden i) Diffusion infolge von Konzentrationsgradienten, ii) Migration geladener Spezies im elektrischen Feld und iii) konvektive Beiträge bei Vorhandensein von flüssigem Wasser.

Ein explizites Transportmodell wurde für Eisen implementiert, das die Bewegung von Fe²⁺- und Fe³⁺-Ionen durch die CCM beschreibt. Dabei werden Diffusion, Migration und konvektive Beiträge berücksichtigt. Die

räumliche Verteilung von Eisen ist wesentlich, da es als Katalysator für Fenton-Reaktionen wirkt und daher die chemische Alterung (s. folgend) verstärkt.

Chemischer Degradationsmechanismus

Der chemische Angriff auf die PFSA-Membran wird über ein gekoppeltes Reaktionsnetzwerk beschrieben, das insgesamt 18 gekoppelte Reaktionsgleichungen umfasst. Der Mechanismus basiert auf folgenden Schritten:

1. Gas-Crossover: Sauerstoff und Wasserstoff diffundieren durch die Membran und können in den Katalysatorschichten reagieren.
2. Bildung von Wasserstoffperoxid (H₂O₂): Durch Nebenreaktionen an katalytisch aktiven Oberflächen entsteht H₂O₂.
3. Radikalbildung (Fenton-Reaktion): In Anwesenheit von Fe²⁺/Fe³⁺ entstehen hochreaktive Hydroxylradikale (•OH).
4. Angriff auf Sulfonsäuregruppen (–SO₃H): Die Radikale greifen die protonenleitenden Seitenketten der PFSA-Membran an und führen zum Abbau der funktionellen Gruppen.

Der Abbau der Sulfonsäuregruppen stellt den zentralen Degradationspfad dar und wird räumlich und zeitlich aufgelöst berechnet.

Zusammenhang zwischen FRR, EW und Membrandicke

Die chemische Zerstörung der Polymerstruktur führt zur Freisetzung von Fluorid. Die Fluorid-Release-Rate (FRR) wird im Modell explizit berechnet und dient als experimentell zugänglicher Degradationsindikator. Im Modell wird der Verlust von Sulfonsäuregruppen direkt mit der Änderung des Equivalent Weight (EW) verknüpft. Der EW ist definiert als Verhältnis zwischen Polymermasse und Anzahl der protonenleitenden Gruppen. Mit abnehmender Anzahl intakter Sulfonsäuregruppen steigt der EW entsprechend an. Parallel wird der Materialverlust durch radikalischen Angriff in eine Abnahme der Membrandicke überführt. Die Membrandicke wird somit als Funktion des akkumulierten Materialverlusts berechnet. Damit ergibt sich folgender modellierter Zusammenhang:

- Radikalbildung → Abbau von –SO₃H-Gruppen
- Abbau von –SO₃H → Erhöhung des EW
- Polymerabbau → Reduktion der Membrandicke/-dichte
- Freisetzung von Fluorid → quantitative Abbildung des Degradationsfortschritts (FRR)

Langzeitsimulationen (z.B. 1.000h bei 2 A cm⁻²) zeigen die zeitliche Entwicklung der FRR in Abhängigkeit vom Gas-Crossover sowie die gekoppelte Veränderung von EW und Membrandicke/-dichte.

Bedeutung des Frameworks

Durch die räumliche Auflösung über die gesamte CCM hinweg kann das Modell:

- ortsabhängige Eisenprofile abbilden,
- lokale Radikalbildungsraten berechnen,
- und daraus resultierende Gradienten im Degradationsfortschritt darstellen.

Damit wurde in AP 2.2 erstmals eine mechanistisch konsistente, räumlich aufgelöste Beschreibung der chemischen Membrandegradation implementiert, bei der FRR, EW und Membrandicke/-dichte direkt miteinander verknüpft sind.

Ergebnis und Meilenstein

Am Ende von AP 2.2 lagen vor:

- erweitertes 3D-Modell mit Kapillardruck und Stack-Temperaturanalyse,
- Bestätigung der Zulässigkeit des pseudo-2D-Temperaturmodells,
- räumlich aufgelöstes 1D-Finite-Volumen-Degradationsmodell,
- mechanistische Abbildung von Gas-Crossover, Eisen-Transport und Radikalbildung,
- explizite Kopplung von FRR mit EW-Änderung und Membrandicken- bzw. -dichtenreduktion,
- Langzeitsimulationen zur Bewertung des chemischen Degradationsfortschritts,
- modulare und generalisierte Implementierung der erweiterten Funktionalitäten.

Damit wurden die Funktionalitäten des ModellTwin erweitert und optimiert. Der Meilenstein MS 2.2 „Funktionsumfang in DERIEL fixiert“ wurde erreicht.

AP 2.3 Gesamtmodell komplettieren und validieren

In AP 2.3 wurden die in AP 2.1 und AP 2.2 entwickelten Modellstrukturen zusammengeführt, datenbasiert parametrisiert und hinsichtlich ihrer industriellen Anwendbarkeit validiert. Ziel war es, die beiden Funktionalitäten „Prozessanalyse/-diagnose“ und „Alterungsmodellierung/Remaining Useful Lifetime“ von einer mechanistisch fundierten Modellbasis zu einer experimentell abgesicherten und mit Realbetriebsdaten betriebenen Systemlösung weiterzuentwickeln.

Während in AP 2.2 die physikalische Vertiefung und strukturelle Erweiterung der Modelle im Vordergrund stand, lag der Fokus in AP 2.3 auf:

- der experimentellen Validierung,
- der datenbasierten Kalibrierung zentraler Modellparameter,
- der Übertragung auf Großanlagendaten,
- sowie der Reduktion von Parameterunsicherheiten mittels Bayes'scher Methoden.

Die Arbeiten in AP 2.3 gliedern sich entsprechend in zwei Teile:

1. Erweiterung und Validierung der Funktionalität „Prozessanalyse/-diagnose“, einschließlich der Parametrisierung des Performance-Modells mit Daten des FZJ.
2. Kalibrierung und Validierung der Funktionalität „Alterungsmodellierung/Remaining Useful Lifetime“ unter Verwendung von Labor- und Systemdaten sowie deren Integration in die digitale Architektur.

Damit stellt AP 2.3 die Phase dar, in der die entwickelten Modelle nicht nur mechanistisch konsistent, sondern auch datenbasiert abgesichert und im realen Systemkontext betrieben wurden.

Funktionalität „Prozessanalyse/-diagnose“

In AP 2.3 wurde die Funktionalität „Prozessanalyse/-diagnose“ in zwei Richtungen weiterentwickelt:

- a) Erweiterung der elektrochemischen Diagnose um material- und montagebedingte Effekte
- b) Validierung und datenbasierte Parametrisierung des Performance-Modells mit Validierung aus BoL-Daten aus den Stack-Tests beim FZJ, während der Rechenaufwand deutlich reduziert bleibt.

a) Erweiterte Diagnosefunktion bei niedrig beladenen CCMs

Ziel war es, die Diagnosefunktion so zu erweitern, dass nicht nur Betriebszustände bewertet, sondern auch material- und kontaktbedingte Ursachen für Leistungsabweichungen identifiziert werden können.

Hierzu wurden CCMs mit drei IrOx-Beladungen (0,11 / 0,26 / 0,78 mg cm⁻²) bei unterschiedlichen Anpressdrücken elektrochemisch charakterisiert (80 °C, atmosphärische Bedingungen) – vgl. Abbildung 1. Die CCM mit der niedrigsten Beladung wurde zusätzlich mit einer mikroporösen Transportschicht (MPL) unterhalb der porösen Transportschicht (PTL) abgestützt, um die Kontaktierung zu erhöhen und so den Nachteil der geringeren Beladung auszugleichen.

Zusätzlich wurde der Hochfrequenzwiderstand (HFR), als Maß für die ohmschen Verluste, analysiert, der vor allem bei hohen Stromdichten entscheidend ist (Abb. 1, links):

- Mit sinkender IrOx-Beladung steigt der HFR im klassischen Setup ohne MPL.
- Die Sensitivität gegenüber Anpressdruck nimmt deutlich zu.
- Bei 1 MPa ist bei der niedrigsten Beladung kein stabiler Betrieb möglich.
- Der Einsatz einer MPL verbessert das Bild deutlich und macht niedrigere Beladungen möglich

Der zweite wichtige Parameter ist die Austauschstromdichte (i_0), die vor allem für Verluste im Aktivierungsbereich, kleine Stromdichten, sorgt (Abb. 1, mitte und rechts). Diese Analyse zeigt:

- Die Austauschstromdichte ist stark beladungs- und vor allem bei kleinen Beladungen auch abhängig vom Anpressdruck.
- Wichtig bei dieser Analyse ist, dass die Tafelsteigung als beladungsunabhängig angenommen wird. Diese wird bei kleinen Beladungen bereits im kleinen Stromdichtebereich durch Massen- und Ladungstransporteffekte beeinflusst. Dies ist wichtige Erkenntnis dieser Studie und bestätigt die Hypothese von Rogler et al. (2023).

- Die Abbildung rechts zeigt die Werte korrigiert um die Beladung, ist also ein Maß für die Ausnutzung der aktiven Fläche. Hier ist die CCM mit der geringsten Beladung die mit der höchsten spezifischen Austauschstromdichte. Dies zeigt, dass eine Verringerung der Beladung möglich ist, allerdings ist eine Optimierung des Systems notwendig.

Damit wurde die Diagnosefunktion des Modells in Deriel erweitert um:

- Bewertung mechanischer Kontaktbedingungen,
- Identifikation stofftransportlimitierter Bereiche,
- Sensitivitätsanalyse bei reduzierter Edelmetallbeladung.

Die Veröffentlichung zu dieser Studie wurde eingereicht und befindet sich in der Begutachtung.

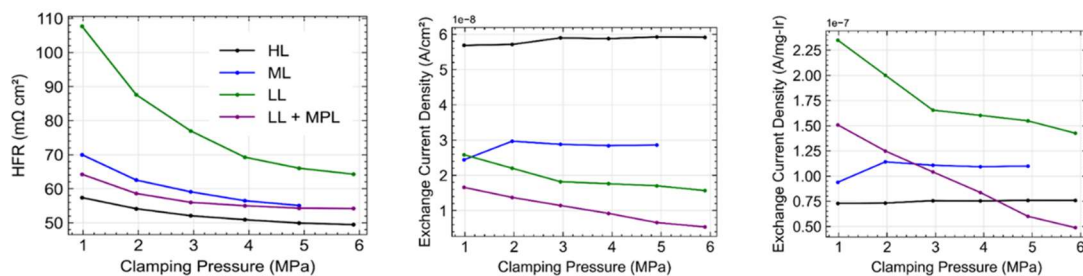


Abbildung 1: links) HFR bei 2 A/cm² für N212, mitte) korrigierte Austauschstromdichte sowie rechts) Ir-Beladungsbezogene Austauschstromdichte, bei atmosphärischen Bedingungen, 80 °C für eine IrOx-Beladung von 0.11 mg/cm² (LL), mit und ohne MPL, 0.26 mg/cm² (ML) sowie 0.78 mg/cm²(HL).

b) Validierung und Parametrisierung des Performance-Modells mit BoL-Jülich-Daten

Zusätzlich wurde ein physikbasiertes 1D-Performance-Modell mit BoL-Daten der Jülich-Großanlage validiert und datenbasiert parametrisiert. Ziel war die quantitative Anpassung zentraler Modellparameter auf Basis realer Großanlagendaten und die probabilistische Erfassung ihrer Unsicherheit.

Versuchsgrundlage:

Verwendet wurden BoL-Performance-Daten von 15 (von insgesamt 50) Zellen mit identischer Konfiguration aus dem Elektrolyse-Stack am FZJ. Die Charakterisierung erfolgte bei Stromdichten bis 1,5 A/cm² und 60°C.

Diese Daten dienen als Referenz für die Parametrisierung des Performance-Modells in einem zweistufigen Kalibrieransatz. Die Modellanpassung erfolgte in zwei Schritten:

1. Pre-Kalibrierung

Zunächst wurde das Performance-Modell ohne Alterungsmodell fixierter Membrandicke betrieben. In diesem Schritt wurden Austauschstromdichte und Protonenleitfähigkeit so angepasst, dass die simulierte Polarisationskurve die gemessene BoL-Charakteristik reproduziert. Diese deterministische Voranpassung (prior, in den folgenden Abbildungen) diene als Ausgangspunkt für die probabilistische Aktualisierung.

2. Bayesian Model Updating

Im zweiten Schritt wurde ein Bayes'scher Ansatz angewendet, bei dem die Membrandicke und die Austauschstromdichte als unsichere Parameter behandelt wurden. Das Bayesian Model Updating liefert

dann eine Posterior-Wahrscheinlichkeitsverteilung für Membrandicke und eine Posterior-Verteilungen für Austauschstromdichte (posterior, in den folgenden Abbildungen).

Obwohl die Membrandicke nominell durch die Fertigung definiert ist, zeigen die Ergebnisse, dass produktions-, montage- und betriebsbedingte Abweichungen probabilistisch erfasst werden können. Die Spannungskennlinien der Zellen lassen sich mit den posterioren Parametern konsistent reproduzieren. Dies wird beim Vergleich der gemessenen Daten (rot) mit den modellierten Werten (gelb) deutlich. Dabei konnte der physikalisch sinnvolle Bereich (blau, aus der prior-Modellierung) deutlich eingegrenzt werden.

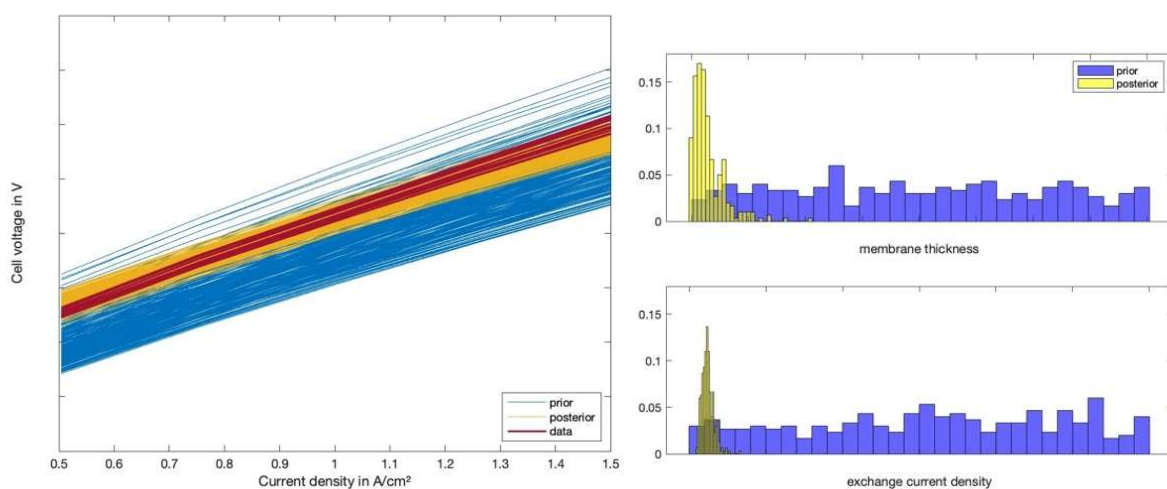


Abbildung 2: Ergebnis der Vorkalibrierung des Modells auf Basis der zur Verfügung stehenden Kennlinie sowie den zwei Parametern Membrandicke und Austauschstromdichte.

Der Ansatz ermöglicht darüber hinaus die Integration weiterer Einflussgrößen in die probabilistische Bewertung mit einzubeziehen, beispielsweise Temperaturschwankungen.

Die BoL-Kalibrierung zeigt, dass das Performance-Modell die gemessenen Polarisationskurven der 15 Zellen konsistent reproduziert. Damit können die Membrandicke und Austauschstromdichte datenbasiert identifiziert werden, die Parameterunsicherheiten werden explizit quantifiziert und die Zell-zu-Zell-Variationen können probabilistisch beschrieben werden.

Damit wurde die Funktionalität „Prozessanalyse/-diagnose“ um eine datengetriebene, probabilistische Parametrisierung erweitert. Das Modell ist nicht mehr nur physikalisch plausibel, sondern quantitativ auf reale Großanlagendaten abgestimmt. Der Transfer vom Watt-Maßstab in den höheren Maßstab funktioniert.

Funktionalität „Alterungsmodellierung/Remaining Useful Lifetime“

Im Rahmen von AP 2.3 wurde die Funktionalität „Alterungsmodellierung / Remaining Useful Lifetime“ zunächst unter kontrollierten Laborbedingungen validiert, um die mechanistische Konsistenz und quantitative Kalibrierbarkeit des in AP 2.2 entwickelten Degradationsmodells nachzuweisen (nachfolgend a)). Aufbauend auf der Laborvalidierung wurde die Alterungsfunktionalität im zweiten Schritt auf reale Stackdaten des Jülicher Testlaufs angewendet, um die Übertragbarkeit des Modells in den

Systemmaßstab sowie die datengetriebene Identifizierbarkeit überlagerter Degradationsmechanismen zu demonstrieren (b)).

a) Labordatensatz – Kalibrierung und experimentelle Validierung des 1D-Degradationsmodells

Ziel der Laboruntersuchungen war die quantitative Kalibrierung des in AP 2.2 entwickelten 1D-Degradationsmodells sowie die experimentelle Überprüfung eines möglichen Zusammenhangs zwischen:

- Gas-Crossover,
- radikalischer Reaktionschemie,
- Abbau von Sulfonsäuregruppen,
- Fluoridfreisetzung (FRR),
- struktureller Veränderung der Membran,
- sowie resultierender Performanceänderung.

Die Fluoridfreisetzung ist ein direkter Marker für den radikalinduzierten Abbau der polymeren Struktur. Im Modell wird die FRR aus der radikalischen Angriffskinetik auf die Membran berechnet und stellt damit die zentrale Kalibriergröße dar. Zur Anpassung des Modells wurden insbesondere kalibriert:

- Reaktionsraten der radikalischen Mechanismen,
- Transportparameter für Eisen-Spezies innerhalb der CCM,
- crossoverabhängige Quellterme für die Bildung reaktiver Spezies.

Im Mittelpunkt stand die Fragestellung, ob das mechanistisch formulierte Modell reale chemische Degradationspfade innerhalb der Catalyst-Coated-Membrane (CCM) unter definierten Betriebsbedingungen reproduzieren kann.

Die Kalibrierung wurde mit einer 4 cm² Laborzelle durchgeführt. Das gewählte Belastungsprofil bestand aus einem konstantem Strombetrieb über 40 Stunden, einer elektrochemischen Charakterisierung zu Beginn (t = 0 h) und am Ende (t = 45 h) sowie der kontinuierlichen Fluoridmessung mittels Ionenchromatographie auf der Kathodenseite. Gemessen wurde bei einer Temperatur von 80 °C, einem Wasserdurchfluss von 40 ml/min und stationärem galvanostatischem Betrieb.

Das Modell wurde während der Simulation zweistufig betrieben – vgl. Abbildung 3 – und beinhaltet eine zeitaufgelöste Degradationsberechnung innerhalb der CCM sowie die diskrete Performanceberechnung zur Abbildung der Spannungsentwicklung. Damit konnten sowohl die chemischen Veränderungen im Membranmaterial als auch deren Auswirkungen auf die Zellspannung erfasst werden.

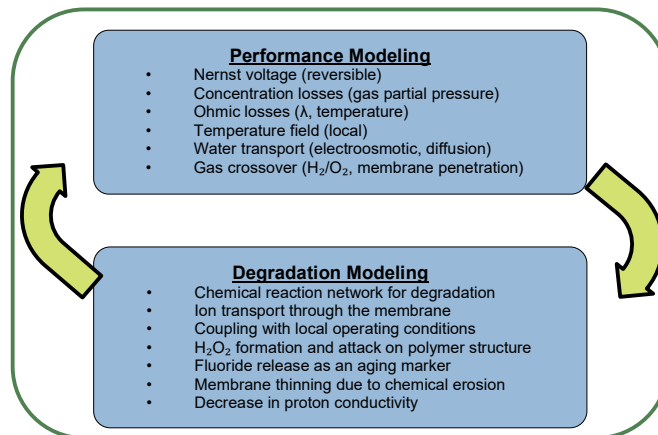


Abbildung 3: Physikbasiertes Multiskalenmodell zur Simulation von Transport-, Reaktions- und Degradationsprozessen im CCM-Bereich. Erfasst räumlich und zeitlich aufgelöste Konzentrationsprofile funktioneller Spezies unter realen Betriebsbedingungen. Ermöglicht die Bewertung von Degradationspfaden unter dem Einfluss dynamischer Lastprofile.

Abbildung 4 zeigt die Ergebnisse eines dieser Experimente. So betrug die durchschnittlich gemessene Fluorid-Release-Rate $0,021 \mu\text{mol}/(\text{h}\cdot\text{cm}^2)$ über 40 Stunden. Es ist ein kontinuierlicher Fluoridstrom (rote Punkte) zu erkennen. Die FRR steigt kontinuierlich an und im betrachteten Zeitraum wird kein stationärer Zustand erreicht.

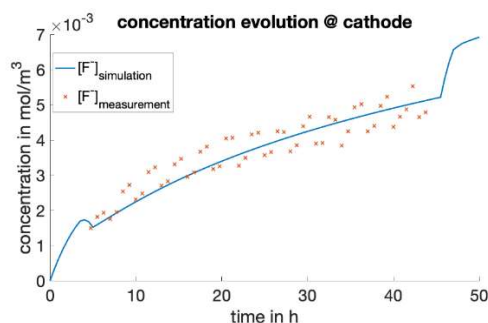


Abbildung 4: Das Modell wurde mit einer 4 cm^2 -Laborzelle unter definierten Lastbedingungen kalibriert. Zwischen Stunde 4 und Stunde 45 lag eine konstante Stromdichte von $4 \text{ A}/\text{cm}^2$ an. Davor und danach wurden Polarisationskennlinien gefahren. Die Fluoridfreisetzung an der Kathode dient dabei als quantitativer Marker für die Membrandegradation.

Die simulierte FRR-Zeitreihe (blau) konnte sowohl im Mittelwert als auch im zeitlichen Trend an die Messdaten (rot) angepasst werden. Damit wurde die chemische Kernmechanik des Modells quantitativ abgesichert.

Etwas unklarer ist noch wie sich dieser radikalische Angriff zum Abbau von Sulfonsäuregruppen ($-\text{SO}_3\text{H}$), die die protonenleitenden Zentren der PFSA-Membran darstellen, verhält. Der Verlust dieser Gruppen bewirkt eine Verringerung der Anzahl verfügbarer Protonenleitstellen und damit eine Reduktion der effektiven Protonenleitfähigkeit der Membran. Dies führt zu einer Zunahme des ohmschen Widerstands.

Parallel kann der chemische Angriff auf die Polymerstruktur zu einem Materialverlust führen, der als Abnahme der Membrandicke abgebildet wird. Eine geringere Membrandicke wirkt grundsätzlich widerstandsreduzierend. Im betrachteten Fall dominiert jedoch der Leitfähigkeitsverlust infolge des Abbaus der Sulfonsäuregruppen deutlich gegenüber dem Effekt der Dickenabnahme. Experimentell zeigte

sich eine Spannungsdegradationsrate von $15 \mu\text{V/h}$ bei 2 A/cm^2 . Der beobachtete Spannungsanstieg bei konstantem Strom könnte mit dem modellierten chemischen Degradationspfad:

Radikalbildung \rightarrow Abbau von $-\text{SO}_3\text{H}$ \rightarrow sinkende Protonenleitfähigkeit \rightarrow steigende Zellspannung korreliert werden. Allerdings sind die Unsicherheiten auf Grund anderer möglicher Alterungsfaktoren aktuell zu groß, um dies mit Sicherheit zu sagen.

Zur weiteren Validierung der FFR-Modellierung wurde das Modell auf drei unterschiedliche Membrantypen angewendet: einer Nafion™ N115- Membran, einer Fumasep® F-10120-PK-Membran und einer Fumasep® F-10120-PK mit Cerium-Dotierung.

Die gemessenen durchschnittlichen FRR-Werte betragen:

- Nafion: $0,015 \mu\text{mol}/(\text{h}\cdot\text{cm}^2)$
- Fumasep: $0,054 \mu\text{mol}/(\text{h}\cdot\text{cm}^2)$
- Fumasep Ce-dotiert: $0,0014 \mu\text{mol}/(\text{h}\cdot\text{cm}^2)$

Abbildung 5 zeigt zudem den zeitlichen Verlauf in den Messungen. Dafür wurde einen nacheinander zwei Polarisationskurven bei sechs verschiedenen Stromdichten ($0,25; 0,5; 0,75; 1; 2; 3 \text{ A/cm}^2$) abgefahren. Die Haltezeit pro Messpunkt betrug 4 h. Die Unterschiede sind deutlich ausgeprägt. Die Fumasep-Membran zeigt eine signifikant höhere chemische Degradationsrate als das Nafion-Material. Die ceriumdotierte (Ce) Variante reduziert die Fluoridfreisetzung um ein bis zwei Größenordnungen, da Ce als Radikalfänger wirkt und die Wirkung der Alterung reduziert.

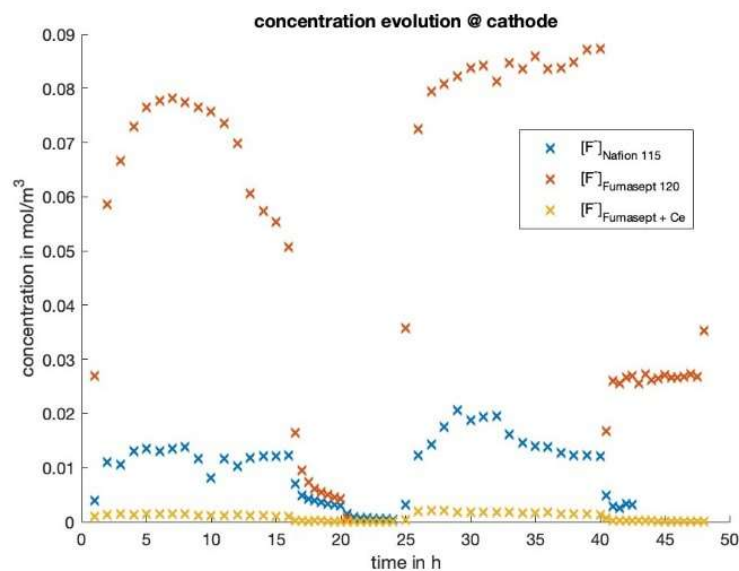


Abbildung 5: Experimentelle Ergebnisse der FRR-Messungen mit drei verschiedenen Membrankombinationen.

Abbildungen 6 und 7 zeigen den Vergleich des Modells mit den experimentellen Ergebnissen für fumasep bzw. Nafion. Für Beide Membrantypen kann das experimentelle Ergebnis nachgebildet werden. Das Modell reproduzierte diese Unterschiede durch Anpassung materialspezifischer Transport- und

Reaktionsparameter zumindest ansatzweise. Insbesondere wurden Unterschiede im Quellverhalten, Wassertransportverhalten sowie in der effektiven radikalischen Reaktivität berücksichtigt.

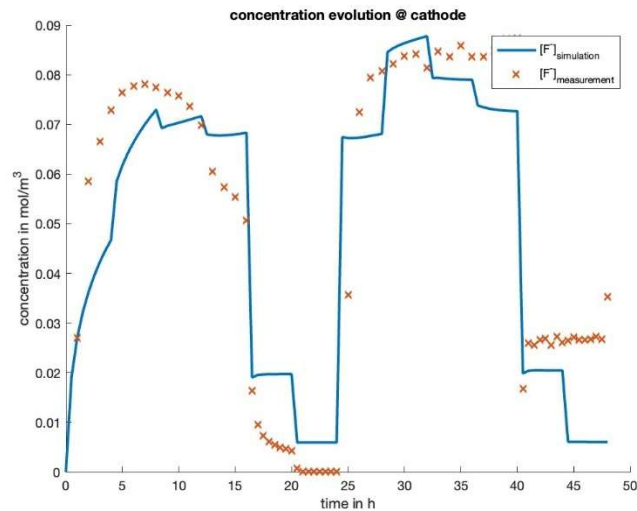


Abbildung 6: FRR Simulationsprofil und Messergebnisse für die fumasep-Membran

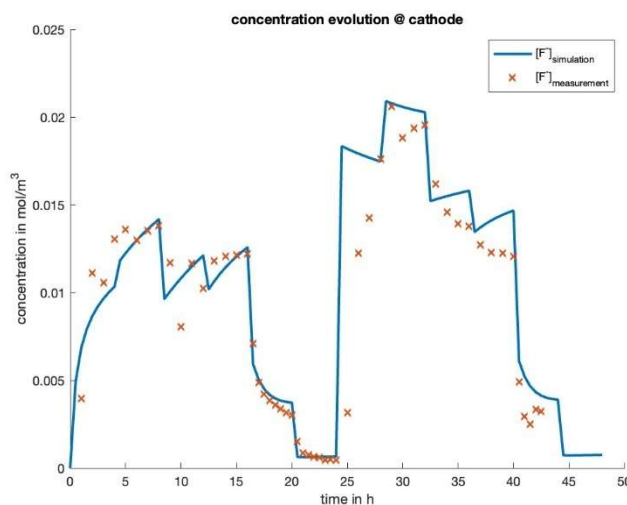


Abbildung 7: FRR Simulationsprofil und Messergebnisse für die Nafion-Membran

Zumindest teilweise werden auch die experimentell ermittelten Spitzen bzw. schnellen Wechsel in den Messwerten modelltheoretisch abgebildet. In Summe, dann der Verlauf aber, auch in Hinblick auf die messtechnischen Unsicherheiten in der gemessenen Rate, erfolgreich abgebildet werden. Damit ist bestätigt, dass das 1D-Modell nicht lediglich einen generischen Degradationsmechanismus beschreibt, sondern materialspezifische Unterschiede quantitativ erfassen kann.

Stand Ende des Projekts lässt sich der Einfluss der Cerium-Konzentration noch nicht komplett qualitativ abbilden. Abbildung 8 zeigt, dass das Modell den reduzierenden Einfluss auf die Fluorid-Freisetzung beschreiben kann, einzelne Peaks sind aber nicht abbildbar. Grundsätzlich besteht hier die Schwierigkeit, das insgesamt viel weniger Fluorid freigesetzt wird und dessen Bestimmung damit schwieriger ist.

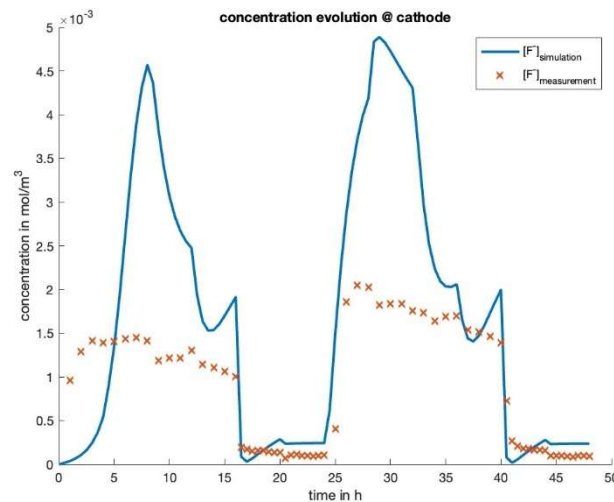


Abbildung 8: FRR Simulationsprofil und Messergebnisse für die fumasep-Membran mit Ce

Zusammenfassend kann gesagt werden, dass der Labordatensatz zusammen mit der Modellbetrachtung quantitativ reproduzierbar die Fluorid-Release-Rate abbilden kann. Damit ist eine mögliche Kopplung zwischen chemischer Degradation und Spannungsanstieg mit gleichzeitiger Berücksichtigung von Leitfähigkeitsverlust und Dickenabnahme gezeigt. Das Modell hat die Fähigkeit zur materialspezifischen Differenzierung, und der gewählte Ansatz eignet sich zur Beschreibung realer Degradationspfade.

Damit wurde die Funktionalität „Alterungsmodellierung/Remaining Useful Lifetime“ im Labormaßstab experimentell validiert.

b) Jülich test run Datensatz – Datenbasierte Validierung und Bayesian Model Updating

Datengrundlage und Zielsetzung:

Im zweiten Schritt wurde das kalibrierte 1D-Degradationsmodell auf reale Systemdaten der Testanlage am FZJ angewendet. Ziel war die Überprüfung der Übertragbarkeit vom Labormaßstab auf den Kw-Maßstab System sowie die probabilistische Aktualisierung zentraler Modellparameter unter realen Betriebsbedingungen.

Der verwendete Datensatz stammt aus einem definierten Testlauf der Anlage und umfasst Betriebs-, Spannungs- und Prozessdaten über einen längeren Zeitraum. Im Gegensatz zum Laborversuch lagen hier dynamische Lastprofile und systemtypische Schwankungen vor.

Vor der Modellanwendung wurde eine strukturierte Exploratory Data Analysis (EDA) durchgeführt. Ziel der EDA war die Identifikation konsistenter Betriebsphasen, der Ausschluss von Start-/Stopp-Transienten, die Eliminierung von Messartefakten sowie die Definition stabiler Lastsegmente für die Modellkalibrierung.

Damit wird das Profil von einigen Wochen auf 63 Betriebsstunden gekürzt. Nur diese Stunden sind für die Modellkalibrierung zu verwenden. Hierzu wurden Stromdichteverläufe, Spannungsverläufe, Temperatur- und Druckdaten sowie abgeleitete Kenngrößen systematisch ausgewertet.

Die EDA ermöglichte die Definition geeigneter Zeitfenster, in denen stationäre oder quasi-stationäre Bedingungen vorlagen. Diese Segmente wurden als Modellinput verwendet – vgl. Abbildung 9 und 10. Damit wurde sichergestellt, dass die Parameteridentifikation nicht durch nichtmodellierete Transienten verfälscht wird.

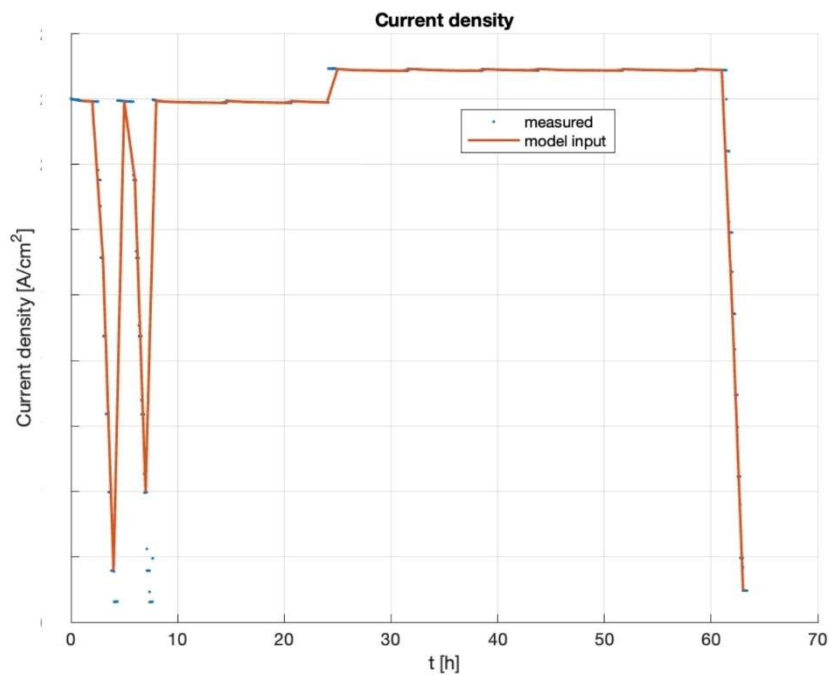


Abbildung 9: Modell-Input nach EDA der Jülich-Messdaten (Stromdichte).

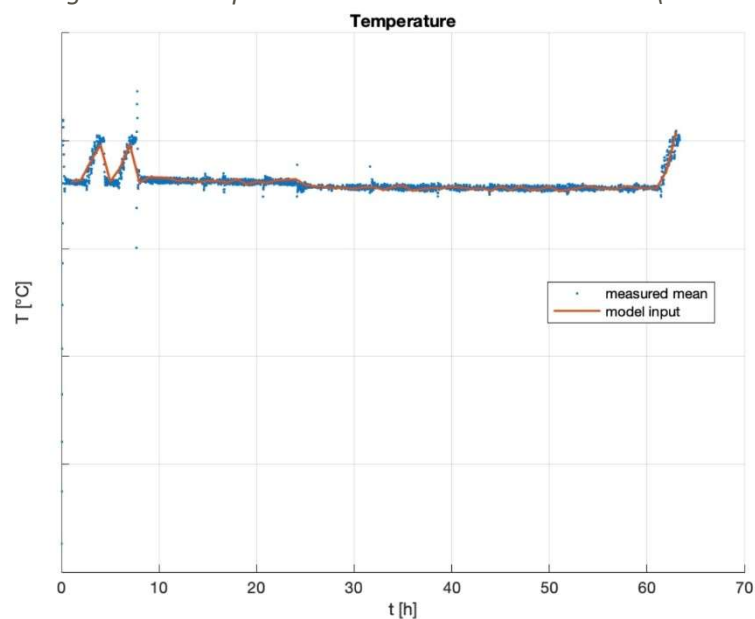


Abbildung 10: Modell-Input nach EDA der Jülich-Messdaten (Temperatur).

Zur datenbasierten Validierung des gekoppelten Performance-Degradationsmodells wurde ein Bayesian Model Updating (BMU) auf Basis des Testlaufs des Stacks im MW-Bereich durchgeführt. Ziel war es, die strukturelle Identifizierbarkeit der modellierten Degradationsmechanismen unter realen

Stackbedingungen zu prüfen und deren Beiträge quantitativ einzugrenzen. Die Membrandicke sowie die anodische Austauschstromdichte wurden im BMU nicht identifiziert, sondern als feste BoL-Parameter gesetzt – siehe Abschnitt „*Funktionalität Prozessanalyse/-diagnose*“. Diese Parameter wurden zuvor manuell kalibriert und dienen als definierter Ausgangszustand des Modells. Das BMU adressiert ausschließlich zeitabhängige Degradationsparameter.

Im definierten BMU-Lauf (N = 100 Stichproben, $\sigma_{LL} = 0.3$ V) wurden drei überlagerte Mechanismen gleichzeitig identifiziert

1. Membran-Kopplungsexponent $k_{p,\alpha}$: Beschreibt die Sensitivität der Protonenleitfähigkeit gegenüber dem im Degradationsmodell berechneten SO₃H-Verlust. Wichtig: Es wird nicht der chemische Abbau selbst identifiziert, sondern die elektrische Wirkung dieses Abbaus im Performance-Modell. Hierbei ist zu berücksichtigen, dass neben den Verlust an den Endgruppen auch andere Effekte wie Blockade durch Verunreinigungen zu dem selben Effekt führen.
2. Kontaktwiderstand-Drift k_r : Modelliert eine lineare Zunahme des anodenseitigen Kontaktwiderstands (TiO₂-Schichtwachstum) und damit einen zusätzlichen ohmschen Spannungsbeitrag.
3. Anoden-i₀-Zerfall k_{i0} : Beschreibt einen exponentiellen Aktivitätsverlust des IrO₂-Katalysators und damit einen zeitabhängigen Anstieg des Aktivierungsüberpotentials.

Alle drei Mechanismen wirken im gemessenen Spannungssignal überlagert und sind experimentell aus den Stackmessungen nicht direkt separierbar. Das BMU extrahiert ihre relativen Beiträge simultan aus der Zeitreihe.

Im Folgenden wurden eine Konvergenz und Unsicherheitsreduktion durchgeführt. Die Berechnung konvergierte in vier Stufen (0 → 0.046 → 0.434 → 1.0). Die Unsicherheit des Spannungsverlaufs reduzierte sich signifikant. Während die Prior-Bandbreite (2σ) noch 55 mV Abweichung zur Zellspannung betrug, lag die Posterior-Bandbreite (2σ) bei 10 mV. Die Unsicherheit konnte also ca. 18 % der ursprünglichen Unsicherheit reduziert werden. Auch die mittlere Modellabweichung verbesserte sich deutlich:

- Prior RMSE: 42.5 mV
- Posterior RMSE: 22.3 mV
- Referenzlösung: 22.6 mV

Das bedeutet eine Fehlerreduktion von ca. 48 %.

Der sehr geringe Unterschied der Posterior-RMSE ($\sigma = 0.8$ mV), gelbe Kurven in der Abbildung 11, mit der dicken gelben Linie als Durchschnittswert, zeigt, dass alle Posterior-Stichproben die Messung nahezu gleich gut erklären und keine ausgeprägte Multimodalität vorliegt.

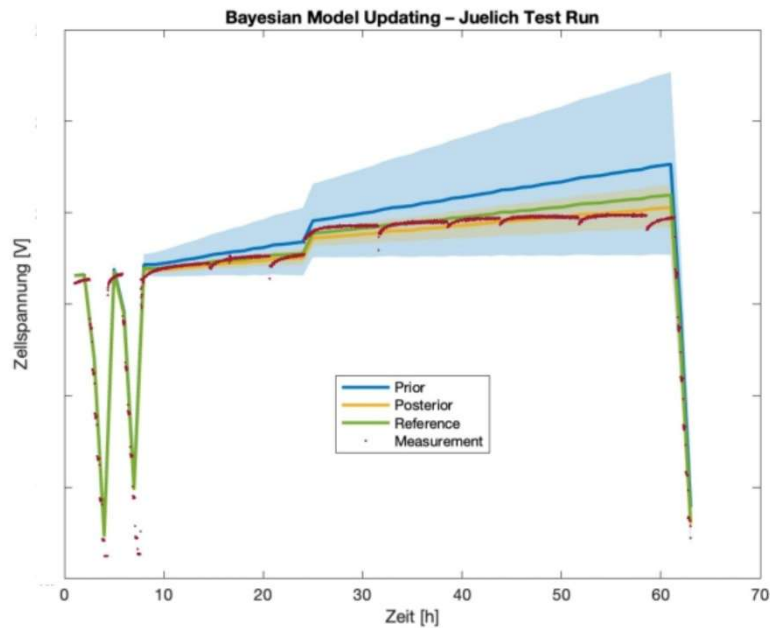


Abbildung 11: Ergebnis Bayesian Model Updating bzgl. der Gesamtzellspannung.

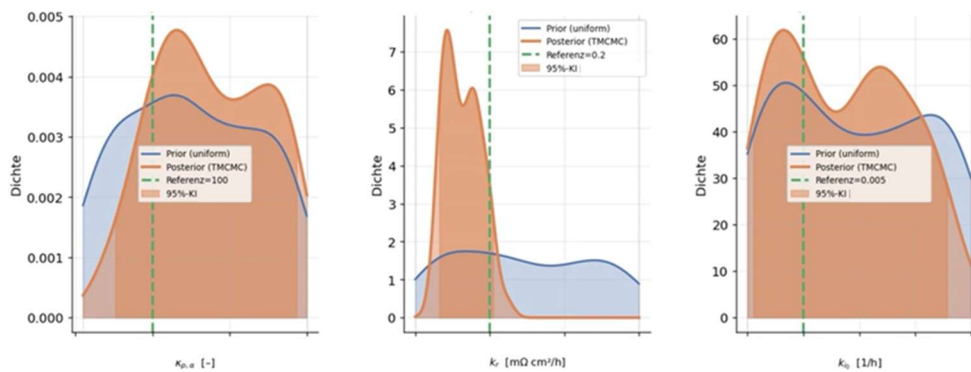


Abbildung 12: Ergebnis der Parameteroptimierung der drei Performance-Parameter im Modell

Dies ist auch an den Einzelparametern in Abbildung 12 zu erkennen. Insgesamt fällt auf, dass das Posterior-Band (orange) liegt deutlich enger und näher an der Referenz liegt (grün) als das Prior-Band. Dies belegt, dass:

- das Modell strukturell geeignet ist, den gemessenen Spannungsverlauf zu reproduzieren,
- die gewählten Degradationsmechanismen das Performance-Modell nahezu beschreiben können
- reale Stackdaten, wie in diesem Fall, eine signifikante Einschränkung des Parameterraums ermöglichen.

Gleichzeitig bleiben Restfehler bestehen, die nicht durch weitere Parameteroptimierung reduziert werden kann. Dieser Modellstrukturfehler reflektiert nicht explizit modellierte Einflüsse auf die Stackspannung, Zell-zu-Zell-Variabilität im Stack (Messung = Mittelwert Kanäle 36–50) und Messunsicherheiten. Zudem ist die Länge der Messung von 63 h kurz. Eine weitere Schwäche des Modells liegt in der Abbildung der reversiblen Zellalterung, die vor allem nach dem Ab- bzw. wieder Anschalten sichtbar wird (vgl. rote Kurve). Dieser Einfluss ist nicht Teil des Modells und würde bei längerem konstanten Betrieb auch deutlich

schwächer ausfallen. Des Weiteren sind andere reversible Mechanismen, wie die Blockade von Endgruppen durch Ionen, die zu einer temporären Verschlechterung der Leitfähigkeit der Membran führen, nicht berücksichtigt.

Der durchgeführte BMU-Lauf ist als Proof of Concept zu verstehen. Er zeigt:

- die grundsätzliche Identifizierbarkeit überlagerter Einflüsse auf die Zellspannung,
- die erfolgreiche Integration realer Stackdaten in das Modell,
- die probabilistische Beschreibung von Unsicherheiten.

Eine physikalisch eindeutige Trennung der Mechanismen ist mit der vorliegenden Datenlage (63 h, $\sigma_{LL} = 0.3$ V, $N = 100$) jedoch nicht möglich. Für eine weitergehende Differenzierung werden längere Testläufe, kleinere Likelihood-Varianzen und größere Stichprobenzahlen empfohlen.

Zusammenfassung der Ergebnisse AP 2.3

Am Ende von AP 2.3 lagen für beide Funktionalitäten folgende Ergebnisse vor:

Funktionalität „Prozessanalyse/-diagnose“

- Erweiterte elektrochemische Diagnostik für niedrig beladene CCMs unter Variation des Anpressdrucks.
- Quantitative Auswertung von Tafel-Steigungen, korrigierter Austauschstromdichte und HFR zur Trennung kinetischer und ohmscher Beiträge.
- Nachweis der starken Sensitivität von HFR und Tafel-Slope gegenüber z.B. mechanischer Kontaktierung.
- Bayesianische Validierung des Performance-Modells mit BoL-Daten eines Elektrolyse-Stacks.
- Nachweis der strukturellen Eignung des Performance-Modells zur Beschreibung realer Stackdaten.

Funktionalität „Alterungsmodellierung / Remaining Useful Lifetime“

Labordatensatz:

- Quantitative Kalibrierung des 1D-Degradationsmodells über gemessene Fluorid-Release-Raten.
- Eine konsistente Abbildung des Zusammenhangs zwischen SO₃H-Abbau, abnehmender Protonenleitfähigkeit und Spannungsanstieg.
- Reproduktion materialspezifischer Unterschiede verschiedener Membransysteme.
- Validierte Spannungsdegradationsrate im stationären Laborbetrieb.

Jülich-Testlauf:

- Integration eines 63 h-Stackdatensatzes in das gekoppelte Performance-Degradationsmodell.
- Durchführung eines TCMC-basierten Bayesian Model Updating zur Identifikation überlagerter Degradationsmechanismen.

- Signifikante Reduktion der Modellabweichung sowie deutliche Einengung des Parameterraums.
- Quantitative Einordnung verbleibender Modellstrukturanteile.

Technologietransfer:

Das gekoppelte Performance- und Degradationsmodell wurde an Siemens Energy übergeben und in einer implementierbaren, modularen Struktur bereitgestellt, sodass eine Integration in den ModellTwin technisch ermöglicht und vorbereitet wurde.

Meilenstein MS 2.3

Der Meilenstein MS 2.3 „ModellTwin in Version 1 einsetzbar“ wurde erreicht.

Begründung:

Die Funktionalität „Prozessanalyse/-diagnose“ wurde experimentell erweitert und systemseitig validiert. Die Funktionalität „Alterungsmodellierung / Remaining Useful Lifetime“ wurde laborseitig kalibriert, systemseitig mittels BMU abgesichert und für die Integration in den ModellTwin an Siemens Energy übergeben. Die Überführung der entwickelten Modellstruktur in ein industriell nutzbares Umfeld wurde umgesetzt. AP 2.3 schließt damit die Entwicklung, Validierung und industrielle Übergabe der Modellfunktionalitäten ab.

2. Darstellung der wichtigsten Positionen des zahlenmäßigen Nachweises

Die wesentlichen Positionen des zahlenmäßigen Nachweises betreffen ausschließlich projektgebundenes wissenschaftliches Personal (734.961,60 € für wissenschaftlich Mitarbeitende, 33.617,39 € für studentischen Hilfskräfte). Die Mittel wurden für die Durchführung der modellbasierten Entwicklungsarbeiten, die Implementierung und Validierung der Performance- und Degradationsmodelle sowie für die Auswertung umfangreicher Labor- und Stackdatensätze eingesetzt.

Die personellen Ressourcen waren erforderlich, um die physikbasierte Modellierung, die numerische Umsetzung des 1D-Finite-Volumen-Ansatzes, die Durchführung des Bayesian Model Updating sowie die wissenschaftliche Dokumentation und Abstimmung im Verbundprojekt sicherzustellen. Die Arbeiten waren in Umfang und methodischer Tiefe nur durch dedizierte wissenschaftliche Stellen realisierbar und standen in unmittelbarem Zusammenhang mit der Erreichung der Projektziele.

3. Notwendigkeit und Angemessenheit der geleisteten Projektarbeiten

Die Zuwendung war erforderlich, da Universitäten in der Regel nicht über eigene Mittel für größere, projektgebundene Forschungsaktivitäten verfügen. Die im Teilvorhaben durchgeführten Arbeiten – insbesondere die Entwicklung und Validierung der Performance- und Alterungsmodelle sowie die Auswertung umfangreicher Labor- und Stackdatensätze – erforderten zusätzliches wissenschaftliches Personal und projektgebundene Ressourcen, die aus der Grundfinanzierung der LUH nicht bereitgestellt werden können.

Ohne die bewilligten Mittel wären die aus dem Verbundprojekt erzielten Ergebnisse nicht in dem gezeigten Umfang möglich gewesen. Die Höhe der Zuwendung war angemessen, da sie sich auf die zur Zielerreichung notwendigen personellen und sachlichen Aufwendungen beschränkte.

Mit den zur Verfügung gestellte Mitteln konnte ein sehr umfangreiches Modell erstellt und parametrisiert werden. Dies schafft die Basis für weitere wertvolle Arbeiten auf dem wichtigen Gebiet der Elektrolyse-Alterungsbeschreibung. Das Modell konnte zudem an SE zur weiteren Verwendung übergeben werden. Zudem wurden wesentliche experimentelle Ergebnisse erzielt, die Zusammenhänge auf Zellebene zur Prognose der Lebensdauer und zum Design von Elektrolysezellen erklären können. Ergebnisse aus den Studien konnten auf wichtigen Konferenzen vorgestellt und in Journalen publiziert werden.

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

Die Arbeiten in AP 2 wurden kontinuierlich mit den Verbundpartnern abgestimmt und in den Gesamtzusammenhang des ModellTwin eingebettet. Insbesondere bestand ein enger fachlicher Austausch mit Siemens Energy hinsichtlich Modellstruktur, Parametrierstrategie und Implementierungsanforderungen. Die entwickelten Performance- und Degradationsmodelle wurden iterativ vorgestellt, diskutiert und hinsichtlich ihrer industriellen Anwendbarkeit angepasst. Ergebnisse aus den Zwischenberichten sowie aus den Präsenzmeetings in Hanau und Berlin flossen unmittelbar in die Weiterentwicklung ein. Das gekoppelte Modell wurde schließlich in einer modularen, implementierbaren Struktur an Siemens Energy übergeben, sodass eine Integration in den ModellTwin technisch vorbereitet und ermöglicht wurde. Die Schnittstellen- und Datenflussanforderungen wurden dabei berücksichtigt, um eine konsistente Einbindung in die bestehende digitale Architektur sicherzustellen.

Das vorhandene Modell soll nun in weiteren geförderten Projekten verbessert werden. Die Erhöhung des Verständnisses zu den Alterungseffekten in PEM-Wasserelektrolyseuren ist von großer Bedeutung für die wirtschaftliche Entwicklung der Technologie. Vor allem der Kontext des Einflusses der Wasserreinheit auf die Leistungsfähigkeit und Alterung ist hier zu nennen. Wir streben aktuell die Beteiligung an einem Grundlagenprojekt zur Vergrößerung des Verständnisses der Wirkung dieser Verunreinigungen an, in dem das Modell zum Einsatz kommen soll. Ansonsten sind wir durch die Publikationen wissenschaftlich sichtbar und haben wissenschaftliches Personal zu dem Thema PEM-Wasserelektrolyse ausgebildet, was Multiplikator-Wirkung haben wird.

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

Die im Projekt entwickelten Modelle und Methoden wurden sowohl wissenschaftlich als auch industrienah verwertet. Die Ergebnisse zum pseudo-2D-Temperaturmodell sowie zur Alterungsmodellierung wurden auf internationalen Konferenzen präsentiert und in Fachbeiträgen veröffentlicht. Darüber hinaus wurde das physikbasierte 1D-Finite-Volumen-Degradationsframework als modular erweiterbares Konzept ausgearbeitet, das die Abbildung weiterer Alterungsmechanismen erlaubt. Die Anwendung des Bayesian Model Updating auf reale Stackdaten stellt einen methodischen Beitrag zur probabilistischen Zustandsbewertung dar und erweitert die Möglichkeiten datengetriebener Modellkalibrierung im PEM-Elektrolysebereich. Durch die Übergabe der implementierbaren Modellstruktur an Siemens Energy wurde zudem eine direkte industrielle Verwertung vorbereitet. Insgesamt bilden die erzielten Ergebnisse eine belastbare Grundlage für die Weiterentwicklung digitaler Zwillinge zur Zustandsdiagnose und Alterungsbewertung von PEM-Elektrolyse-Stacks.

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
10.10.22	Konferenzbeitrag	Quantifying Temperature Effects in Large-Scale PEM Water Electrolysis Stacks (Electrochemical Society)	Tobias Krenz, Oskar Weiland, Patrick Trinke, Lennard Helmers, Boris Bensmann and Richard Hanke-Rauschenbach	Link
19.04.23	Paper	Temperature and Performance Inhomogeneities in PEM Electrolysis Stacks with Industrial Scale Cells (Journal of the Electrochemical Society)	Tobias. Krenz, Oskar Weiland, Patrick Trinke, Lennard Helmers, Christoph Eckert, Boris Bensmann and Richard Hanke-Rauschenbach	Link
11.10.23	Konferenzbeitrag	Coupled Simulation of Chemical Membrane Degradation and Gas Crossover in PEM Water Electrolysis (244th ECS Meeting)	Christoph Eckert, Patrick Trinke, Boris Bensmann and Richard Hanke-Rauschenbach	Link
25.08.25	Poster	Modeling Chemical Membrane Degradation in PEM Water Electrolysis: Integration of Experimental Fluoride Emission Measurements (ICE 2025 Freiburg)	Christoph Eckert, Patrick Trinke, Boris Bensmann and Richard Hanke-Rauschenbach	
16.10.25	Konferenzbeitrag	Contact and Performance of Low Anode Loading CCMs for PEM Electrolysis at Different Clamping Pressures (248th ECS Meeting)	Oskar Weiland, Boris Bensmann and Richard Hanke-Rauschenbach	Link



<p>Dez. 25</p>	<p>Paper</p>	<p>Clamping Effects with Low-Iridium Loadings in PEM Water Electrolysis (Journal of the Electrochemical Society)</p>	<p>Oskar Weiland, Boris Bensmann and Richard Hanke- Rauschenbach</p>	<p>Under review</p>
-----------------------	--------------	--	--	----------------------------