

Bachelorarbeit

Modellierung und Simulation des Wasserstoff-Energiesystems eines Quarzglasherstellers in Modelica zur Identifikation effizienter Systemkonzepte

Modelling and simulation of the hydrogen-energysystem of a fused quartz producer in
Modelica to identify efficient systemconcepts

Aachen, März 2021

Tobias Jonathan Boschmann

Matrikelnummer: 379947

Betreuer:

Hannah Krütfeld, M. Sc.

Univ.-Prof. Dr.-Ing. Dirk Müller

Diese Arbeit wurde vorgelegt am:

E.ON Energy Research Center | ERC

Institute for Energy Efficient Buildings and Indoor Climate | EBC

(Lehrstuhl für Gebäude- und Raumklimatechnik)

Mathieustraße 10, 52074 Aachen

Zusammenfassung

Er hörte leise Schritte hinter sich. Das bedeutete nichts Gutes. Wer würde ihm schon folgen, spät in der Nacht und dazu noch in dieser engen Gasse mitten im übel beleumundeten Hafenviertel? Gerade jetzt, wo er das Ding seines Lebens gedreht hatte und mit der Beute verschwinden wollte! Hatte einer seiner zahllosen Kollegen dieselbe Idee gehabt, ihn beobachtet und abgewartet, um ihn nun um die Früchte seiner Arbeit zu erleichtern? Oder gehörten die Schritte hinter ihm zu einem der unzähligen Gesetzeshüter dieser Stadt, und die stählerne Acht um seine Handgelenke würde gleich zuschnappen? Er konnte die Aufforderung stehen zu bleiben schon hören. Gehetzt sah er sich um. Plötzlich erblickte er den schmalen Durchgang. Blitzartig drehte er sich nach rechts und verschwand zwischen den beiden Gebäuden.

Beinahe wäre er dabei über den umgestürzten Mülleimer gefallen, der mitten im Weg lag. Er versuchte, sich in der Dunkelheit seinen Weg zu ertasten und erstarrte: Anscheinend gab es keinen anderen Ausweg aus diesem kleinen Hof als den Durchgang, durch den er gekommen war. Die Schritte wurden lauter und lauter, er sah eine dunkle Gestalt um die Ecke biegen. Fieberhaft irrten seine Augen durch die nächtliche Dunkelheit und suchten einen Ausweg. War jetzt wirklich alles vorbei, waren alle Mühe und alle Vorbereitungen umsonst? Er presste sich ganz eng an die Wand hinter ihm und hoffte, der Verfolger würde ihn übersehen, als plötzlich neben ihm mit kaum wahrnehmbarem Quietschen eine Tür im nächtlichen Wind hin und her schwang. Könnte dieses der flehentlich herbeigesehnte Ausweg aus seinem Dilemma sein?

Langsam bewegte er sich auf die offene Tür zu, immer dicht an die Mauer gepresst. Würde diese Tür seine Rettung werden? Er hörte leise Schritte hinter sich. Das bedeutete nichts Gutes. Wer würde ihm schon folgen, spät in der Nacht und dazu noch in dieser engen Gasse mitten im übel beleumundeten Hafenviertel? Gerade jetzt, wo er das Ding seines Lebens gedreht hatte und mit der Beute verschwinden wollte! Hatte einer seiner zahllosen Kollegen dieselbe Idee gehabt, ihn beobachtet und abgewartet, um ihn nun um die Früchte seiner Arbeit zu erleichtern? Oder gehörten die Schritte hinter ihm zu einem der unzähligen Gesetzeshüter dieser Stadt, und die stählerne Acht um seine Handgelenke würde gleich zuschnappen? Er konnte die Aufforderung stehen zu bleiben schon hören. Gehetzt sah er sich um. Plötzlich erblickte er den schmalen Durchgang. Blitzartig drehte er sich nach rechts und verschwand zwischen den beiden Gebäuden. Beinahe wäre er dabei über den umgestürzten Mülleimer gefallen, der mitten im Weg lag. Er versuchte, sich in der Dunkelheit seinen Weg zu ertasten und erstarrte: Anscheinend gab es keinen anderen Ausweg aus diesem kleinen Hof als den Durchgang, durch den er gekommen war. Die Schritte wurden lauter und lauter, er sah eine dunkle Gestalt um die Ecke biegen. Fieberhaft irrten seine Augen durch die nächtliche

Dunkelheit und suchten einen Ausweg. War jetzt wirklich alles vorbei, waren alle Mühe und alle Vorbereitungen umsonst? Er presste sich ganz eng an die Wand hinter ihm und hoffte, der Verfolger würde ihn übersehen, als plötzlich neben ihm

Die deutsche Kurzfassung in einer Abschlussarbeit sollte nicht mehr als 500 Wörter haben.
The English abstract in a thesis should not exceed 300 words.

Abstract

Überall dieselbe alte Leier. Das Layout ist fertig, der Text lässt auf sich warten. Damit das Layout nun nicht nackt im Raume steht und sich klein und leer vorkommt, springe ich ein: der Blindtext. Genau zu diesem Zwecke erschaffen, immer im Schatten meines großen Bruders »Lorem Ipsum«, freue ich mich jedes Mal, wenn Sie ein paar Zeilen lesen. Denn esse est percipi - Sein ist wahrgenommen werden.

Und weil Sie nun schon die Güte haben, mich ein paar weitere Sätze lang zu begleiten, möchte ich diese Gelegenheit nutzen, Ihnen nicht nur als Lückenfüller zu dienen, sondern auf etwas hinzuweisen, das es ebenso verdient wahrgenommen zu werden: Webstandards nämlich. Sehen Sie, Webstandards sind das Regelwerk, auf dem Webseiten aufbauen. So gibt es Regeln für HTML, CSS, JavaScript oder auch XML; Worte, die Sie vielleicht schon einmal von Ihrem Entwickler gehört haben. Diese Standards sorgen dafür, dass alle Beteiligten aus einer Webseite den größten Nutzen ziehen.

Im Gegensatz zu früheren Webseiten müssen wir zum Beispiel nicht mehr zwei verschiedene Webseiten für den Internet Explorer und einen anderen Browser programmieren. Es reicht eine Seite, die - richtig angelegt - sowohl auf verschiedenen Browsern im Netz funktioniert, aber ebenso gut für den Ausdruck oder die Darstellung auf einem Handy geeignet ist. Wohlge-merkt: Eine Seite für alle Formate. Was für eine Erleichterung. Standards sparen Zeit bei den Entwicklungskosten und sorgen dafür, dass sich Webseiten später leichter pflegen lassen. Natürlich nur dann, wenn sich alle an diese Standards halten. Das gilt für Browser wie Fire-fox, Opera, Safari und den Internet Explorer ebenso wie für die Darstellung in Handys. Und was können Sie für Standards tun? Fordern Sie von Ihren Designern und Programmieren einfach standardkonforme Webseiten. Ihr Budget wird es Ihnen auf Dauer danken. Ebenso möchte ich Ihnen dafür danken, dass Sie mich bis zum Ende gelesen

The English abstract in a thesis should not exceed 300 words.

Die deutsche Kurzfassung in einer Abschlussarbeit sollte nicht mehr als 500 Wörter haben.

Inhaltsverzeichnis

Nomenklatur	VII
Abbildungsverzeichnis	XI
Tabellenverzeichnis	XIII
1 Questions and Answers	1
1.1 Page Layout	1
1.2 Figures	3
1.3 Tables	5
1.4 Literature and citations	8
1.5 Miscellaneous	9
2 Einleitung	11
2.1 Motivation	11
2.2 Zielsetzung	11
3 Grundlagen	13
3.1 Elektrolyse	13
3.1.1 Wasserelektrolyse	13
3.1.2 Thermodynamische Betrachtung	14
3.1.3 Reversible Zellspannung	15
3.1.4 Überspannungen	15
3.1.5 Alkalischer Elektrolyseur	16
3.1.6 Protonen Austausch Membran (PEM) Elektrolyseur	17
3.1.7 Feststoffoxid Elektrolyseur	17
3.1.8 Polarisationskurve und Betriebsbereiche von Elektrolyseuren	18
3.2 Brennstoffzelle	20
4 Methode+Anwendung	21
4.1 K.A.	21
4.1.1 Modell Aufbau	21
4.1.2 Modellgleichungen	21
4.1.3 Szenarien Vorstellen	21

4.2	Blindtext	21
5	Diskussion	23
5.1	Modellierung	23
5.1.1	Elektrolyseur	23
5.1.2	Brennstoffzelle	23
5.2	Szenarien	23
5.2.1	Szenario 1	23
5.2.2	Szenario 2	23
5.2.3	Szenario 3	23
6	Erkenntnisse	25
6.1	Modellierung	25
6.1.1	Elektrolyseur	25
6.2	Szenarien	25
	Literaturverzeichnis	26

Nomenklatur

Formelzeichen und Einheiten

Symbol	Bedeutung	Einheit
A	Fläche	m^2
c_p	spezifische Wärmekapazität bei konstantem Druck	$\text{J}/(\text{kgK})$
C	Wärmekapazität	W kg^{-1}
H	Enthalpie	J
\dot{H}	Enthalpiestrom	J s^{-1}
E	Exergie	J
e	spezifische Exergie	J kg^{-1}
\dot{m}	Massenstrom	kg s^{-1}
p	Druck	Pa
\dot{Q}	Wärmestrom	W
R	spezifische Gaskonstante	$\text{J}/(\text{kgK})$
S	Entropie	J K^{-1}
\dot{S}	Entropiestrom	W K^{-1}
T	Temperatur	K
t	Zeit	s
U	innere Energie	J
U_T	Wärmedurchgangskoeffizient	$\text{W}/(\text{kgK})$
h	Wärmeübergangskoeffizient	$\text{W}/(\text{m}^2\text{K})$
V	Volumen	m^3
\dot{V}	Volumenstrom	m^3/s
\dot{W}	Leistung	W
Y	Wasserbeladung der Luft	g kg^{-1}

Griechische Formelzeichen

Symbol	Bedeutung	Einheit
η_C	Carnot-Wirkungsgrad	—
κ_E	exergetische Aufwandszahl der Wärmeerzeugung	—
κ_T	exergetische Aufwandszahl des Wärmetransfers	—
Φ	thermische Leistung	W
ϱ	Massendichte	kg/m ³
σ	Temperaturspreizung	K
ϑ	Temperatur	°C
$\Delta\vartheta$	Temperaturdifferenz	K

Indizes und Abkürzungen

Symbol	Bedeutung
0	Referenzzustand (<i>ambient dead state</i>)
A	Außen/Umgebung
CH	chemisch
CV	Kontrollvolumen (<i>control volume</i>)
DSC	Dynamische Differenzkalorimetrie (<i>differential scanning calorimetry</i>)
e	über die Systemgrenze (<i>external</i>)
F	Volumenstrom
FW	Fassadenwärmeübertrager
gen	erzeugt (<i>generated</i>)
In	Eingang (<i>input</i>)
KN	kinetisch
KRM	Kapillarrohrmatte
LabVIEW	Programmiersprache und Entwicklungsumgebung für die Messdatenerfassung der Firma National Instruments
L	Luft
LWS	Latentwärmespeicher
m	Mittelwert
Ob	Oberfläche
PCM	Latentwärmespeichermaterial (<i>phase change material</i>)

Fortsetzung auf der nächsten Seite

Indizes und Abkürzungen

Symbol	Bedeutung
PH	physikalisch
PT	potentiell
Q	auf einen Wärmestrom bezogen
R	Rücklauf
Reg	Speicherregeneration
T	Temperatur
Δt	Zeitschritt der Länge Δt
t	technisch
V	Vorlauf
V	Verlust (Exergieanalyse)
W	Wärmeträgermedium

Abbildungsverzeichnis

1.1	A PDF example figure.	3
1.2	A PDF-TeX example generated by Inkscape	4
1.3	An example of a tikz diagram	5
3.1	Ladungsträger bei der Wasserelektrolyse [?]	14
3.2	Mögliche Bereiche der Polarisationskurven verschiedener Elektrolyse-Technologien nach ?	18

Tabellenverzeichnis

1.1	Normal horizontal lines	6
1.2	Rules as horizontal lines	6
1.3	An example of a predefined table formats	6
1.4	An example of a table with numbers aligned by their decimal point with <code>dcolumn</code>	7
1.5	An example of a table with numbers aligned by their decimal point with standard tools	8
3.1	Standardtbildungsenthalpien und Standardtentropien für 298.15 K [?] sowie stöchiometrische Koeffizienten aus (3.1)	14

1 Questions and Answers

This is an example chapter with the purpose of providing answers and examples to everyday challenges in L^AT_EX. The format represents a question and answer structure separated by the category. It is recommended that you read through the questions before trying to find a solution to your problem, in most cases, someone has already found the solution and has written the answer here. Feel free to use the examples provided here in your own document. Keep in mind that some methods have conflicts with other methods and therefore the least used case is commented here.

Although we tried to include as many answers and examples as possible, you may find better options to achieve certain tasks. Feel free to extend this document or write issues if this template needs correction in its GIT repository.

1. What should I consider when using this template?

The template uses the so called toggles to switch between different modes. So you have to consider what you are writing, e.g. a master thesis or a dissertation and correct the toggles by changing them to false or true (e.g. `\toggletrue{thesis}`). This automatically reformats your document to include the correct cover page, margins, chapters, etc.

After that you just update the pages you need and add your chapters to the document. If you do not have very special wishes, you do not need to change anything else in the document as all the packages and options that you may require are predefined.

2. How do I choose the language between German and English?

Change `\togglefalse{ingerman}` to `\toggletrue{ingerman}` for a document in German or vice versa for a document in English.

1.1 Page Layout

This document uses the “Koma-Script” class. This class provides great flexibility in comparison to predefined classes. The following Q&A’s describe some of the commands necessary to achieve different tasks in the Koma-Script class. But, there are many more options available which you can find [here](#).

1. How do I write a part of my document in German/English?

`\selectlanguage{language}` is used to change the default language at any part of your document. Don't forget to change it back after you finished your text in the second language. For example,

```
\selectlanguage{ngerman}
  Heizölrückstoßabdämpfung
\selectlanguage{english}
  Some text in English ...
```

will result in: Heizölrückstoßabdämpfung and Some text in English ...

This is specially useful, for example, when you are writing an abstract in two languages.

2. How do I change the font size of my whole document?

11 points is chosen as the default font size in most of the templates at the institute. If you want to change it, just change the value in the options of the `\documentclass`.

For example, `\documentclass[12pt]{scrreprt}` changes the font size of the whole document to 12 points.

3. How do I change the font size of a part of the document (locally)?

Depending on the situation, there are a few ways to do this. \LaTeX has many predefined formats such as `\huge`, `\large`, `\small`, etc. You can use them either inline or in an environment.

- Inline: Just write the command in front of your text in a curly bracket.

For example, `{\Huge Text}` results in a Huge Text,
and `{\tiny Text}` results in a tiny Text.

- Environment: You can use an environment not only to change the font size of a block of text but rather the font size in figures and tables. You can create the environment as follow:

```
\begin{Font size}
  Your text here ...
\end{Font size}
```

Keep in mind that there is usually no need to change your font size. A uniform font size makes the document look much better. Change the font size locally only if no other method of separating context works.

4. What should I consider when I want to have a double sided document?

Use the option `twoside` for the document class.

```
\documentclass[twoside]{scrreprt}.
```

This automatically moves the page number of odd pages to the right and even pages to the left. It also recalculates the binding space for a two sided document depending on odd and even pages.

5. The figure/table captions are too long resulting in a very cluttered list of figures and tables. How can I prevent that?

You can actually define two captions, one for the table of contents (TOC) by placing it in a bracket and one for the actual figure or table by placing it inside a curly bracket.

```
\caption[Caption for TOC]{Actual caption for the figure, table, chapter, section, etc.}
```

1.2 Figures

There are many ways to import different figures in \LaTeX . It is always recommended to keep the fonts similar to the rest of the document. Below are a few examples of what can be done.

1. How can I input a figure in \LaTeX ?

You can use the figure environment to include figures with a caption and a label (see Figure 1.1). The code for including the Figure 1.1 is given below.

```
\begin{figure}[h]
\centering
\includegraphics[scale=0.5]{Resources/rwth_eerc_rgb_ohne_Schutzraum}
\caption{A PDF example figure.}
\label{fig:PDFExample}
\end{figure}
```



Abbildung 1.1: A PDF example figure.

2. How can I input a figure side by side?

To be answered ...

3. How can I input a figure but with \LaTeX fonts?

One way to do that is to create/import your figure in Inkscape. Then save it as a PDF and check the PDFLaTeX box while saving. This generates two separate files. One includes all the graphics as a PDF and one is a TeX formatted file including all the text and their positions in the figure with the extension pdf_tex. Note that this file loads the PDF graphics automatically. If these files are in a folder not directly accessible from your main document, you will get an error. To fix that you have to add the path to your graphics path by writing:

```
\graphicspath{{<path to file>/}}
```

in your main document. Figure 1.2 shows an example.

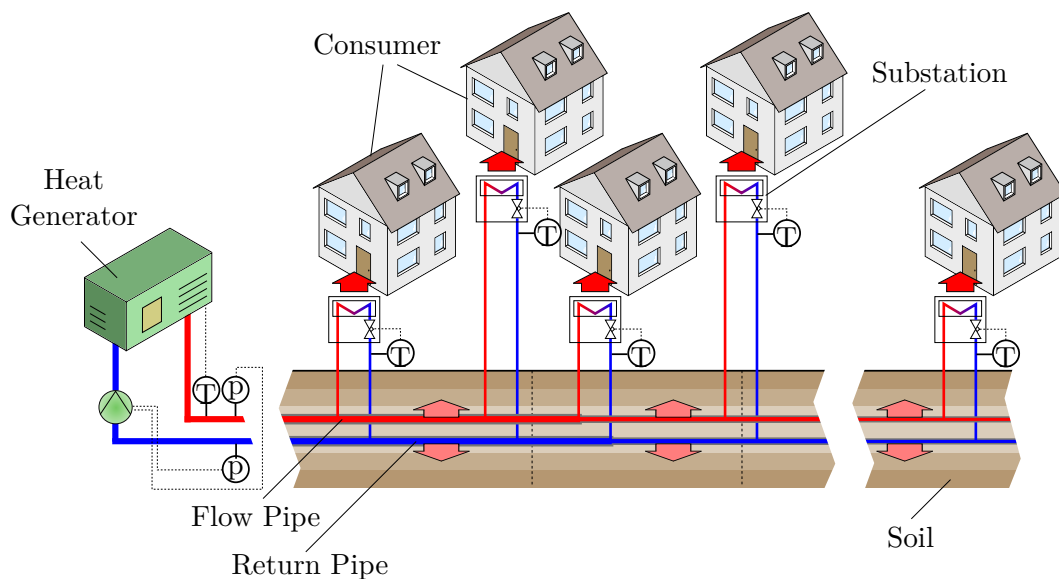


Abbildung 1.2: A PDF-TeX example generated by Inkscape

Note that changing the scale of the figure does not affect the font size. You have to adjust the position of the text boxes slightly as the font size and types vary in the Inkscape file and \LaTeX .

It is also possible to write equations or accented characters by just writing them in \LaTeX mathematics format in your Inkscape file.

4. How can I implement a diagram while having the \LaTeX font?

The easiest way is to save your diagram in Python or Matlab with their \LaTeX font in PDF format and include those in your document. The problem with that method is that you cannot scale your diagram without scaling the font as well. And, changing the final figure is impossible.

Another method is to use TikZ plots. Note that TikZ plots are not only for diagrams, and there are many examples what you can do [here](#). There are functions in Matlab and

Python (for example [here](#)) that generate TikZ plots from your figures. They basically generate a TikZ code which includes the definition of axis and labels following by the actual data points of your diagram. Several types diagrams are possible such as bars, line, etc with or without error bars. Sometimes you have to slightly change the generated TikZ code for your need. You can also directly change the labels or even the range of your diagram within the TikZ code. Figure 1.3 shows an example of a TikZ diagram.

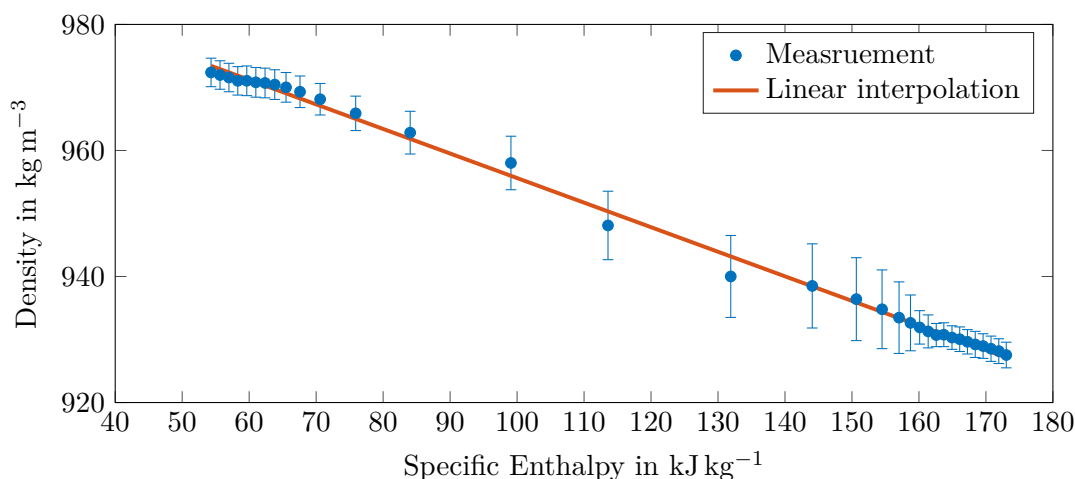


Abbildung 1.3: An example of a tikz diagram

Depending on the method you generate the TikZ code, it may contain fixed dimensions. You can change it by replacing the fixed with and height with variables `\figureheight` and `\figurewidth` in the TikZ code.

The disadvantage of using TikZ plots is that it makes compilation of your \LaTeX code slower and when there are many data points in the diagram, it may lead to a memory error. It is possible to compile TikZ plots externally and only once when there is no change by using the `\usetikzlibrary{external}`.

You can also prevent the memory error by using the LuaLaTeX compiler instead of the PDFLaTeX.

In any case, it is recommended that you compile only the chapters you are currently writing in while commenting the rest and compile the whole document at the end.

1.3 Tables

Creating tables in \LaTeX is really time consuming. Making it look good is sometimes even harder. But there are ways to make it easier. In any case try to prevent using vertical lines in your table to make it look more professional. In the following are some examples:

Tabelle 1.1: Normal horizontal lines

Title	Value
Text 1	123
Text 2	456

Tabelle 1.2: Rules as horizontal lines

Title	Value
Text 1	123
Text 2	456

1. How can I create tables without using pure codes?

Usually different programs have some tools to make it easier. For example TexMaker has a Table-Assistant. If you are using that, try to make your table as close as to the one you actually want before exiting, otherwise you cannot go back.

There is also an online tool [Tables Generator](#) which makes coding a table much easier.

2. I am having a hard time writing the values in my table, is there a way to do it more efficiently?

There are some tools to generate table data in L^AT_EX format. For example the [latexTable function](#) in Matlab can put your data in correct L^AT_EX table style.

3. What is the best way to draw horizontal lines in the table?

Use `\toprule`, `\midrule` or `\bottomrule` depending on the position instead of `\hline`. These command add extra space in the correct direction to prevent text being too close to the lines. Tables 1.1 and 1.2 illustrate the difference.

4. How did we just put two tables side by side?

Use: `\parbox{0.45\linewidth}{...}\hfill\parbox{0.45\linewidth}{...}`

See the code of the previous tables as an example.

5. Center aligned columns with predefined width are too time consuming. What can I do?

Keep in mind that if you are using a certain type of column too many times, it is always easier to define it once in your main document and use your defined configuration instead. For the specific case of centered alignment with predefined width, this template defines the column type `C{<width>}`. See Table 1.3 as an example.

Tabelle 1.3: An example of a predefined table formats

Non centered	Centered
abc	efg
123	456

6. How can I align my data based on the decimal point?

Use package `dcolumn`

It is more professional to align numbers on their decimal point rather than format the columns centered. To make it easier, this template has a predefined `d{x.y}` type which does the aligning. The `x` is the number of characters at the left side and `y` is the number of characters at the right side of the decimal point. The only problem is that if you want to add label text in the same column, it enters the math-mode. To prevent this, you have to write the label in a multicolumn format which is only one column as follow:

```
\multicolumn{1}{c}{Label}
```

To align numbers with decimal comma instead of a decimal point, change the following line in the main.tex file:

```
\newcolumntype{d}[1]{D{.}{.}{#1}}
```

to:

```
\newcolumntype{d}[1]{D{,}{,}{#1}}
```

Table 1.4 shows an example.

Tabelle 1.4: An example of a table with numbers aligned by their decimal point with `dcolumn`

Name	Centered	Decimal
A	1000	1000
B	100	100
C	10	10
D	1	1
E	.1	.1
F	.01	.01
G	.001	.001
H	.0001	.0001

Align at decimal point with standard tools

Use `r@{.}l` to use the `&` character to insert a decimal point and instead of the `&`. Be aware that this is interpreted as two columns and you must use `\multicolumn{2}{c}{label text}` to combine two cells horizontally.

Use `r@{,}l` to use the `&` character to insert a decimal *comma* for German language.

A complex table making usage of this approach is Table 1.5.

7. How can I wrap the text in more lines in a single table cell?

To be answered ...

Tabelle 1.5: An example of a table with numbers aligned by their decimal point with standard tools

Date	$n_{\text{days},i}$ [–]	Q_{HC} [kWh]	Q_{DHW} [kWh]	$Q_{\text{th,tot}}$ [kWh]	W_{el} [kWh]	Q_{end} [kWh]	useful energy output [kWh]
30 Aug.	92	202.4	1205.2	1407.6	239.2	2401.2	1646.8
11 Jan.	97	6751.2	1241.6	7992.8	1290.1	10437.2	9282.9
27 Feb.	103	11433.0	1349.3	12782.3	1854.0	15841.4	14636.3
01 Jun.	73	153.3	956.3	1109.6	182.5	1854.2	1292.1
1 year:		18539.9	4752.4	23292.3	3565.8	30534.0	26858.1

8. How can I draw horizontal lines under only certain cells?

This can be done with `\cline{3-6}` or `\cmidrule{3-6}`. Thus, a horizontal line is drawn from column 3 to 6.

(For the difference between `line` and `rule` see Tables 1.1 and 1.2.)

See Table 1.5 where `\cmidrule{}` is applied.

1.4 Literature and citations

1. How can I manage the literature?

You should use a reference manager to organize your literature. A common reference management software is Citavi which can be installed from the software center.

2. How can I import references to latex?

In latex you can cite papers, books, etc. by importing your references from a bibtex file (*Literature.bib*). The bibtex file can be created with Citavi by exporting the references. If you have created or modified the *Literature.bib* file, you have to compile your latex document with BibTeX once.

To refer to a reference in the text, use the command `citep{}` or `cite{}` to write the reference with or without square brackets: `[?]` or `?`

In order to understand all options for and types of the `cite` command, e.g. to reference a particular page, have a look into online documentations.

The `citep{}` command works only due to the imported `natbib` package. See the official [CTAN website](#) for documentation or [this Overleaf website](#) for further information. If you want to have a numbered citation in the text like `[1]` instead of `[author, year]`, you need to change the option in the preamble to `\usepackage[square, numbers]{natbib}`.

1.5 Miscellaneous

1. How do I create a nomenclature?

There are two possible way for creating the nomenclature:

- a) You can add all abbreviations manually in a table. Therefor, include the file NomenclatureTable in the main document:

```
\include{Chapters/NomenclatureTable}
```

- b) You can use the package `nomenc1` to generate the nomenclature automatically. The advantage of the automatic generation is that you can add and define abbreviations everywhere in your document. For further information have a look [here](#).

2. How do I write Modelica Code in \LaTeX ??

You can use the `lstlisting` environment. There is a Modelica Style file that defines the colors and format. It is also possible to add a complete source code file after the `lstlisting` command.

```
\begin{lstlisting}[language=modelica] <Code> \end{lstlisting}
```

For example:

```
replaceable partial function f
  extends Modelica.Icons.Function;
  input ThermodynamicState state "thermodynamic state record";
  output Real f;
end f;
```

3. How do I write footnotes?

To be answered ...

4. How do I restart footnote numbering at the beginning of each chapter?

To be answered ...

2 Einleitung

2.1 Motivation

Ich bin sehr motiviert.

2.2 Zielsetzung

Ich habe ein klares Ziel.

3 Grundlagen

Im folgenden Kapitel sollen die zum Verständnis der Arbeit nötigen Grundlagen erläutert werden. Anfangs werden die elektrochemischen Grundlagen der Elektrolyse von Wasser vorgestellt sowie deren thermodynamische Zusammenhänge geschildert. Zudem wird die ideale Zellspannung hergeleitet und es werden wesentliche Verlustmechanismen benannt. Weiterhin werden gängigen technischen Lösungen der Wasserelektrolyse vorgestellt. Im Anschluss werden die Gemeinsamkeiten und Unterschiede von Elektrolyseuren und Brennstoffzellen dargelegt.

3.1 Elektrolyse

Als Elektrolyse bezeichnet man einen chemischen Prozess, bei dem eine Redoxreaktion durch elektrische Spannung erzwungen wird. Um eine kontrollierbare Durchführung der Reaktion sicherzustellen, muss eine räumliche und elektrische Trennung der Oxidation und Reduktion vorliegen. Allerdings muss Ionenaustausch zwischen Anode und Kathode möglich sein und dies wird durch ein Elektrolyt erreicht.

3.1.1 Wasserelektrolyse

Bei der Wasserelektrolyse wird dieses Prinzip angewendet, um aus Wassermolekülen elementaren Wasserstoff und elementaren Sauerstoff zu gewinnen. Dabei liegt folgende allgemeine Reaktionsgleichung vor:



Die allgemeine Reaktionsgleichung ist dabei unabhängig vom Elektrolyt, wohingegen sich die Oxidations- und Reduktionsgleichungen unterscheiden. Die Oxidation findet an der Anode statt und hat Sauerstoff als Produkt. An der Kathode wird durch die Reduktion Wasserstoff gebildet. Es gibt drei mögliche Ladungsträger bei der Wasserelektrolyse: Hydroxidionen, Protonen oder Oxidionen. Zu den verschiedenen Ladungsträgern werden in 3.1.5 bis 3.1.7 technische Verfahren angeführt und erläutert.

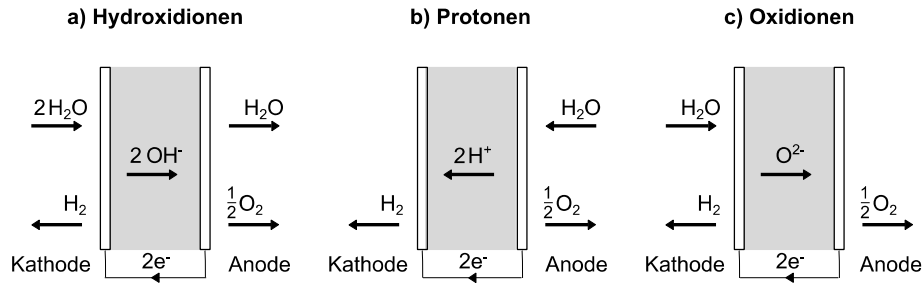


Abbildung 3.1: Ladungsträger bei der Wasserelektrolyse [?]

3.1.2 Thermodynamische Betrachtung

Die benötigte Energie bei einer Redoxreaktion entspricht der Reaktionsenthalpie ΔH_R und lässt sich aus den Bildungsenthalpien ($\Delta_f H_i$) und stöchiometrischen Koeffizienten (ν_i) der Edukte und Produkte bestimmen:

$$\Delta H_R = \sum \nu_i \Delta_f H_i \quad (3.2)$$

Unter der Annahme, dass die nötige thermische Energie vorliegt, entspricht die zur Reaktion benötigte elektrische Energie der freien Reaktionsenthalpie ΔG_R , welche sich über die Reaktionsentropie ΔS_R errechnen lässt.

$$\Delta G_R = \Delta H_R - T \Delta S_R \quad (3.3)$$

$$\Delta S_R = \sum \nu_i S_i \quad (3.4)$$

Für die Wasserstoffelektrolyse 3.1 bei Standardbedingungen ($T_0 = 298.15 \text{ K}$ und $p_0 = 101.325 \text{ kPa}$) ergibt sich mit den Daten aus 3.1 die Reaktionsenthalpie zu $\Delta H_R^0 = 285.25 \text{ kJ mol}^{-1}$ und die freie Enthalpie zu $\Delta G_R^0 = 236.59 \text{ kJ mol}^{-1}$.

Tabelle 3.1: Standardbildungsenthalpien und Standardentropien für 298.15 K [?] sowie stöchiometrische Koeffizienten aus (3.1)

Komponenten i	$\Delta_f H_i^0$ [kJ/mol]	S_i^0 [J/(molK)]	ν_i [-]
H_2O	-285,25	70,12	-1
O_2	0	205,25	1
H_2	0	130,7	1/2

3.1.3 Reversible Zellspannung

Mit der Faraday Konstante ($F = 96\,485.3 \text{ C mol}^{-1}$) und der Anzahl der pro Reaktion transferierten Elektronen ($n = 2$) lässt sich die thermoneutrale Spannung bei Standardbedingungen U_{th}^0 sowie die reversible Zellspannung bei Standardbedingungen U_{rev}^0 errechnen:

$$U_{th}^0 = \frac{\Delta H_R^0}{nF} = 1.478 \text{ V} \quad (3.5)$$

$$U_{rev}^0 = \frac{\Delta G_R^0}{nF} = 1.226 \text{ V} \quad (3.6)$$

Der Abschnitt muss in den Methodenteil rein:

Über die Nernst-Gleichung lässt sich die Abhängigkeit der reversiblen Zellspannung U_{rev} von der Temperatur und den Partialdrücken der Produkte (p_{H_2} für Wasserstoff und p_{O_2} für Sauerstoff) sowie der Aktivität des Wassers (a_{H_2O}) beschreiben (zitat!!!). Im Falle der Festoxid Elektrolyse muss, weil gasförmiges Wasser vorliegt, der Partialdruck des Wassers (a_{H_2O}) verwendet werden.

$$U_{rev} = U_{rev}^0 + \frac{RT}{nF} \ln \left(\frac{p_{H_2} \sqrt{p_{O_2}}}{a_{H_2O}} \right) \quad (3.7)$$

$$U_{rev} = U_{rev}^0 + \frac{RT}{nF} \ln \left(\frac{p_{H_2} \sqrt{p_{O_2}}}{p_{H_2O}} \right) \quad (3.8)$$

3.1.4 Überspannungen

Die reale Zell-Spannung U_{real} ist im Betrieb aufgrund von Verlusten immer größer als die reversiblen Zellspannung. Die maßgeblichen Verluste, auch Überspannungen genannt, werden üblicherweise in drei Bereiche aufgeteilt: Aktivierungsverluste (U_{Akt}), Ohmsche Verluste (U_{Ohm}) und Konzentrationsüberspannung (U_{Diff})?. Ein weiteres Phänomen sind Diffusionsströme von Wasserstoff auf die Anodenseite und von Sauerstoff auf die Kathodenseite, allerdings sind diese aus Sicherheitsaspekten gering zu halten, was in 3.1.8 näher erläutert wird. Daher werden Diffusionsströme in dieser Arbeit als vernachlässigbar klein angenommen.

$$U_{real} = U_{rev} + U_{Akt} + U_{Ohm} + U_{Diff} \quad (3.9)$$

Aktivierungsverluste

Aktivierungsverluste kommen durch die elektrochemischen Vorgänge an den Oberflächen der Elektroden und ihrer Kinetik zustande. Dabei treten zwei Phänomene auf: Einerseits chemische (wegen des chemischen Gleichgewichtszustands der Ionen an der Grenzfläche zwischen Elektrode und Elektrolyt) und andererseits elektrische (aufgrund des Ladungstrans-

ports durch das elektrische Feld an der Grenzfläche)?.

Ohmsche Verluste

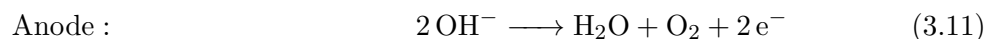
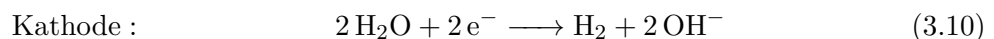
Ohmsche Verluste werden durch elektrische sowie ionische Widerstände und Kontaktwiderständen zwischen den Komponenten verursacht. Ionischen Widerstände, welche sich in der Membran (bei alkalischer und PEM-Elektrolyse) und an den Elektrodenoberflächen lokalisieren lassen, dominieren üblicherweise die Ohmschen Verluste ?. Elektrisch Widerstände treten in den Elektroden und an der Kontaktierung der Zelle auf und lassen sich somit durch den Aufbau der Zelle beeinflussen ?.

Diffusionsüberspannungen

Diffusionsüberspannungen treten auf, wenn aufgrund hoher Stromdichten, eine Überpopulation von Produktgasen an den Elektroden entsteht. Die Gase bilden dann Bläschen auf den Elektrodenoberflächen und behindern somit die Elektrolyse der Wassermoleküle. Diffusionsüberspannungen treten verstärkt bei hohen Stromdichten auf und sind somit ein limitierender Faktor für die maximale Stromdichte eines Elektrolyseurs [?].

3.1.5 Alkalischer Elektrolyseur

Die alkalische Elektrolyse ist eine ausgereifte Technik und der derzeitige Standard für groß dimensionierte Elektrolyseure. Anlagen mit einer Leistung Wasserstoffproduktion von bis zu 130 MW [] sind derzeit im Betrieb und die minimale Teillast liegt nach bei ungefähr 20%. Als Elektrolyt dient üblicherweise Kalilauge, deren Konzentration zwischen 25 und 30% liegt. Grund dafür ist, das der Base-Gehalt der Lösung maßgeblich deren Leitfähigkeit beeinflusst. Als Ladungsträger in der Lösung fungieren Hydroxidionen. Es werden metallische Elektroden verwendet, welche gelegentlich zur Steigerung der Aktivität mit Edelmetallen beschichtet werden. Folgende Reaktionen laufen an der Kathode und Anode ab:



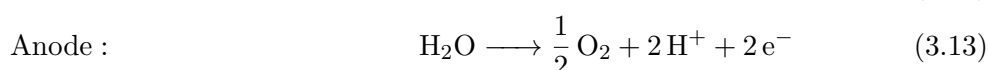
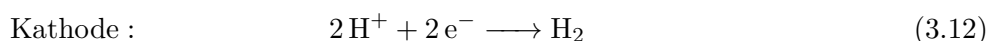
Um die produzierten Gase von einander getrennt zu halten, wird zwischen Anode und Kathode ein Diaphragma positioniert. Dies hat Performance aber auch Sicherheitsgründe, da elementarer Wasserstoff hochentzündlich ist. Aus diesem Grund sind alkalische Elektrolyseure auch in ihrer Dynamik eingeschränkt: Bevor das System abgeschaltet werden kann, müssen

die Gasleitungen mit Inertgas gefüllt werden, um die Bildung einer explosiven Wasserstoff-Sauerstoff Mischung zu verhindern. Dies hat auch einen Einfluss auf den Anlaufvorgang des Systems, da die Gasqualität durch die anfangs vorliegenden Inertgase vermindert wird. Ein weiterer Nachteil aktueller technischer Anlagen der alkalischen Elektrolyse ist, dass die maximale Stromdichte verglichen mit anderen Elektrolyseuren niedrig ausfällt [??????] gibt Stromdichten von $0,2 - 0,5 \text{ A cm}^{-2}$ an.

3.1.6 Protonen Austausch Membran (PEM) Elektrolyseur

PEM-Elektrolyseure werden seit 1950 entwickelt und derzeit im 1 MW Bereich vertrieben. Ein Vorteil der Technologie sind die hohen erreichbaren Stromdichten von bis zu $0,5 \text{ A cm}^{-2}$. Zudem können PEM-Elektrolyseure sehr dynamisch betrieben werden und ein Betrieb bei bis zu 10% minimaler Teillast ist möglich [1].

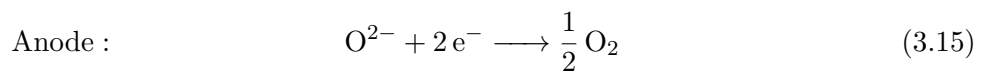
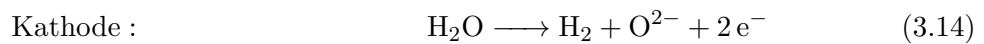
Als Ladungsträger fungieren Protonen und als Elektrolyt dient eine in destilliertem Wasser positionierte Protonen-Austausch-Membran (**P**roton **E**xchange **M**embran). Dies vereinfacht den Betrieb verglichen mit den mit stark basischer Lösung befüllten, alkalischen Elektrolyseuren erheblich. Die Protonenleitfähigkeit der Polymer-Membran wird durch Sulfonsäurebindende Seitengruppen, sogenannte Idomere, erreicht [2]. Für die Dicke der Membran muss dabei ein Kompromiss zwischen Langlebigkeit und Durchlässigkeit gefunden werden [3]. Die Säure des Elektrolyts, so wie das Erstreben hoher Reaktionsgeschwindigkeiten führt zu hohen Kosten bei den Elektrodenmaterialien: Die Kathode besteht meist aus mit Platin beschichtetem Kohlenstoff, als Anode werden häufig als Oxid vorliegendes Iridium oder Ruthenium verwendet. Folgende Reaktionen laufen an der Kathode und Anode ab:



3.1.7 Feststoffoxid Elektrolyseur

Feststoffoxid(SO) Elektrolyseure sind seit 1980 in Entwicklung [4]. Sie haben aus thermodynamischer Sicht den Vorteil, dass sie Temperaturen von $600 - 900^\circ\text{C}$ betrieben werden. Somit wird bei der SOE-Elektrolyse dampfförmiges Wasser zerlegt, wohingegen bei alkalischen und PEM-Elektrolyseuren flüssiges Wasser vorliegt. Daraus resultiert, dass die zur Elektrolyse des Wassers benötigte Zellspannung und somit auch die zugeführte Elektrische Energie niedriger ausfällt. Dieser Effekt wird dadurch verstärkt, dass bei hohen Temperaturen die ohmschen Verluste sinken, wodurch niedrigere Überspannungen entstehen [5]. Zudem steigt mit der Temperatur auch die Reaktionsgeschwindigkeit, weshalb keine teuren Katalysatormaterialien verwendet werden müssen [6].

Ein Nachteil der gesteigerten Betriebstemperatur sind die höheren Ansprüche an die Temperaturbeständigkeit der Elektroden und des Elektrolyts. Als Elektrolyt wird meist Zirkoniumdioxid (ZrO_2) verwendet, welches zur Steigerung Leitfähigkeit mit ungefähr 8 mol% Yttriumoxid (Y_2O_3) stabilisiert wird (?). Das Elektrolyt wird zwischen zwei porösen Elektroden (Beispielsweise eine Nickeloxid Anode und eine LSCF-Kathode [?]) positioniert, was den Austausch der Oxidionen ermöglicht. Es existieren SO-Elektrolyseure, welche auf dem Transport von Protonen basieren [?], allerdings soll aufgrund ihrer geringen Bedeutung in dieser Arbeit nicht weiter darauf eingegangen werden.



Eine Herausforderung ist das Bereitstellen der benötigten Wärme zur Wasserdampferzeugung und zum Aufrechterhalten der Betriebstemperatur. Dazu werden verschiedene Möglichkeiten, wie beispielsweise (groß oder klein geschrieben?) die Kopplung mit Wärmepumpen oder Sonnenkollektoren in Betracht gezogen [?]. Weiterhin bleibt ein zu lösendes Problem der Leistungsverlust und der Abbau der Elektrodenmaterialien, was die Lebensdauer der Zellen signifikant einschränkt [?].

3.1.8 Polarisationskurve und Betriebsbereiche von Elektrolyseuren

Der Zusammenhang der Stromdichte und der realen Zellspannung eines Elektrolyseurs wird als Polarisationskurve bezeichnet. Diese wird von vielen Einflussfaktoren - wie beispielsweise den Elektrodenmaterialien, der Dicke der Membran oder den Betriebsbedingungen wie Druck und Temperatur - beeinflusst. Grundlage für die Berechnung der Polarisationskurve ist die in !!!!! hergeleitete reversible Zellspannung und Gleichung (3.9). Abbildung !!!! vergleicht die Polarisationskurven der drei vorher genannten technischen Verfahren.

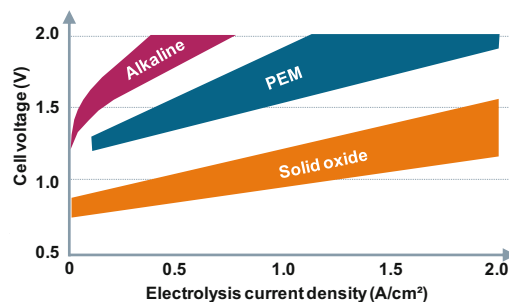


Abbildung 3.2: Mögliche Bereiche der Polarisationskurven verschiedener Elektrolyse-Technologien nach ?

Des weiteren lässt sich mithilfe der Polarisationskurve auch die Abhängigkeit des Wirkungs-

grades von der Stromdichte ableiten: Die elektrische Leistung einer Zelle (P_{el}) lässt sich aus der Stromdichte (i), der aktiven Fläche (A_{zelle}) und der realen Zellspannung errechnen. Das Faradaysche Gesetz liefert einen direkten Zusammenhang zwischen dem Elektronenfluss und dem Stoffmenge an produziertem Wasserstoff (\dot{N}_{H_2O}).

$$P_{el}(i) = U_{real}(i) \cdot i A_{zelle} \quad (3.16)$$

$$\dot{N}_{H_2O} = \frac{i A_{zelle}}{nF} \quad (3.17)$$

Der Wirkungsgrad (η) einer Zelle, bezogen auf den unteren Heizwert (H_u) von Wasserstoff wird damit durch folgenden Ausdruck beschrieben:

$$\eta = \frac{H_u \cdot \dot{N}_{H_2O}}{P_{el}} = \frac{H_u}{U_{real}(i) \cdot nF} \quad (3.18)$$

Somit zeigt sich, dass es zur Steigerung der Effizienz erstrebenswert ist, den Elektrolyseur bei einer niedrigen Spannungen bzw. einer niedrigen Stromdichte zu betreiben [?]. Allerdings bleibt zu bedenken, dass dadurch auch der Produktgasstrom verringert wird, weshalb ein Kompromiss zwischen Wirkungsgrad und einer größeren aktive Zellflächen, und damit verbunden höheren Investitionskosten und größerem Bauraum, zu finden ist.

Weiterhin stellt die Gasreinheit der Produktströme eine untere Betriebsgrenze für die Stromdichte dar. Aufgrund von Diffusion durch Membran (bei Alkalischer und PEM-Elektrolyse) bzw. Elektrolyt (bei SO-Elektrolyse) kommt es zu einer Mischung von Sauerstoff und Wasserstoff. Da beide Produktgase bei einer Verunreinigung von 4 bis 96 Volumen-% explosive Mischungen bilden können, wird üblicherweise bei 2 Volumen-% Verunreinigung ein Notstop des gesamten Elektrolyseur-Systems eingeleitet. Dabei lassen sich physikalisch zwei Abhängigkeiten erklären:

Einerseits nimmt die Verunreinigung der Produktgase bei hohem Druck zu, da dann auch der für die Diffusion maßgebliche Konzentrationsgradient eines Gases in der Membran/dem Elektrolyt steigt. Andererseits sinkt die Verunreinigung bei steigender Stromstärke, weil die produzierte Stoffmenge mit der Stromdichte linear ansteigt, der Diffusionsstrom aber wegen gleichbleibender Konzentrationsverläufe nahezu konstant ist. Somit wird die Verunreinigung bei einer höheren Stromdichte stärker verdünnt [?].

[?] gibt an, dass die Verunreinigung der Produktgase insbesondere durch die Rekombination von Wasserstoff und Sauerstoff verringert werden kann. Eine technische Lösung ist beispielsweise das Einbringen von Platin bei Anode und Kathode. Somit kann durch bestimmte Maßnahmen der Betriebsbereich in Richtung niedrigerer Stromstärken erweitert werden.

3.2 Brennstoffzelle

Funktionsprinzip und Gleichungen der Brennstoffzelle

4 Methode+Anwendung

4.1 K.A.

4.1.1 Modell Aufbau

In diesem Abschnitt sollen der Aufbau der Modelle erläutert werden.

4.1.2 Modellgleichungen

Gleichungen

4.1.3 Szenarien Vorstellen

LIYDNvklusah.dygvÖSRi.ldgh.kvnr sd

4.2 Blindtext

Dies hier ist ein Blindtext zum Testen von Textausgaben. Wer diesen Text liest, ist selbst schuld. Der Text gibt lediglich den Grauwert der Schrift an. Ist das wirklich so? Ist es gleichgültig, ob ich schreibe: „Dies ist ein Blindtext“ oder „Huardest gefburn“? Kjift – mitnichten! Ein Blindtext bietet mir wichtige Informationen. An ihm messe ich die Lesbarkeit einer Schrift, ihre Anmutung, wie harmonisch die Figuren zueinander stehen und prüfe, wie breit oder schmal sie läuft. Ein Blindtext sollte möglichst viele verschiedene Buchstaben enthalten und in der Originalsprache gesetzt sein. Er muss keinen Sinn ergeben, sollte aber lesbar sein. Fremdsprachige Texte wie „Lorem ipsum“ dienen nicht dem eigentlichen Zweck, da sie eine falsche Anmutung vermitteln.

Das hier ist der zweite Absatz. Dies hier ist ein Blindtext zum Testen von Textausgaben. Wer diesen Text liest, ist selbst schuld. Der Text gibt lediglich den Grauwert der Schrift an. Ist das wirklich so? Ist es gleichgültig, ob ich schreibe: „Dies ist ein Blindtext“ oder „Huardest gefburn“? Kjift – mitnichten! Ein Blindtext bietet mir wichtige Informationen. An ihm messe ich die Lesbarkeit einer Schrift, ihre Anmutung, wie harmonisch die Figuren zueinander stehen und prüfe, wie breit oder schmal sie läuft. Ein Blindtext sollte möglichst viele verschiedene Buchstaben enthalten und in der Originalsprache gesetzt sein. Er muss

keinen Sinn ergeben, sollte aber lesbar sein. Fremdsprachige Texte wie „Lorem ipsum“ dienen nicht dem eigentlichen Zweck, da sie eine falsche Anmutung vermitteln.

Und nun folgt – ob man es glaubt oder nicht – der dritte Absatz. Dies hier ist ein Blindtext zum Testen von Textausgaben. Wer diesen Text liest, ist selbst schuld. Der Text gibt lediglich den Grauwert der Schrift an. Ist das wirklich so? Ist es gleichgültig, ob ich schreibe: „Dies ist ein Blindtext“ oder „Huardest gefburn“? Kjift – mitnichten! Ein Blindtext bietet mir wichtige Informationen. An ihm messe ich die Lesbarkeit einer Schrift, ihre Anmutung, wie harmonisch die Figuren zueinander stehen und prüfe, wie breit oder schmal sie läuft. Ein Blindtext sollte möglichst viele verschiedene Buchstaben enthalten und in der Originalsprache gesetzt sein. Er muss keinen Sinn ergeben, sollte aber lesbar sein. Fremdsprachige Texte wie „Lorem ipsum“ dienen nicht dem eigentlichen Zweck, da sie eine falsche Anmutung vermitteln.

Nach diesem vierten Absatz beginnen wir eine neue Zählung. Dies hier ist ein Blindtext zum Testen von Textausgaben. Wer diesen Text liest, ist selbst schuld. Der Text gibt lediglich den Grauwert der Schrift an. Ist das wirklich so? Ist es gleichgültig, ob ich schreibe: „Dies ist ein Blindtext“ oder „Huardest gefburn“? Kjift – mitnichten! Ein Blindtext bietet mir wichtige Informationen. An ihm messe ich die Lesbarkeit einer Schrift, ihre Anmutung, wie harmonisch die Figuren zueinander stehen und prüfe, wie breit oder schmal sie läuft. Ein Blindtext sollte möglichst viele verschiedene Buchstaben enthalten und in der Originalsprache gesetzt sein. Er muss keinen Sinn ergeben, sollte aber lesbar sein. Fremdsprachige Texte wie „Lorem ipsum“ dienen nicht dem eigentlichen Zweck, da sie eine falsche Anmutung vermitteln.

Dies hier ist ein Blindtext zum Testen von Textausgaben. Wer diesen Text liest, ist selbst schuld. Der Text gibt lediglich den Grauwert der Schrift an. Ist das wirklich so? Ist es gleichgültig, ob ich schreibe: „Dies ist ein Blindtext“ oder „Huardest gefburn“? Kjift – mitnichten! Ein Blindtext bietet mir wichtige Informationen. An ihm messe ich die Lesbarkeit einer Schrift, ihre Anmutung, wie harmonisch die Figuren zueinander stehen und prüfe, wie breit oder schmal sie läuft. Ein Blindtext sollte möglichst viele verschiedene Buchstaben enthalten und in der Originalsprache gesetzt sein. Er muss keinen Sinn ergeben, sollte aber lesbar sein. Fremdsprachige Texte wie „Lorem ipsum“ dienen nicht dem eigentlichen Zweck, da sie eine falsche Anmutung vermitteln.

5 Diskussion

5.1 Modellierung

5.1.1 Elektrolyseur

In diesem Abschnitt sollen ein Vergleich von Elektrolyseur-modell Eigenschaften und realen Messungen präsentiert werden

5.1.2 Brennstoffzelle

In diesem Abschnitt sollen ein Vergleich von Brennstoffzell-modell Eigenschaften und realen Messungen präsentiert werden

5.2 Szenarien

hier sollen die Ergebnisse der Szenarien-simulation aufgeführt werden.

5.2.1 Szenario 1

wprisnväpiWSK-DG;M

5.2.2 Szenario 2

SöouyGDHNVUWSK:JYDGHMV

5.2.3 Szenario 3

siYD-Gfjxg,nvlsrkn

6 Erkenntnisse

6.1 Modellierung

6.1.1 Elektrolyseur

Modell gut, weil...

Schwächen sind...

6.2 Szenarien

Vorteile von 1 ist ... allerdings bei 2 folgendes besser

Anhang

wird hier der gesamte Code abgebildet??

Eigenständigkeitserklärung

Hiermit versichere ich, dass ich die vorliegende Arbeit selbstständig und ohne Benutzung anderer als der angegebenen Hilfsmittel angefertigt habe. Alle Stellen, die wörtlich oder sinngemäß übernommen sind, sind als solche kenntlich gemacht. Die Arbeit ist in gleicher oder ähnlicher Form noch nicht als Prüfungsarbeit eingereicht worden. Ich erkläre mich damit einverstanden, dass die vorliegende Arbeit in der Lehrstuhlbibliothek und Datenbank aufbewahrt und für den internen Gebrauch kopiert werden darf.

Aachen, 19. März 2021

Tobias Jonathan Boschmann