

## 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, Mai 2021

**Tobias Jonathan Boschmann**

Matrikelnummer: 379947

Betreuer:

Hannah Krütfeldt, 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**

Bei der Quarzglasveredelung wird in fluktuierenden Mengen Wasserstoff sowie Sauerstoff benötigt. Diese werden im Wasserstoff-Energiesystem eines Quarzglasherstellers mithilfe eines Elektrolyseurs erzeugt. Elektrolyseure produzieren Wasserstoff und Sauerstoff in einem festen Stoffmengenverhältnis, allerdings wird in einigen Verfahrensschritten ein anderes Stoffmengenverhältnis benötigt. Daher werden für den Betrieb nicht benötigte Mengen Wasserstoff erzeugt, welche im aktuellen System ungenutzt in die Atmosphäre entweichen. In dieser Arbeit wird daher anhand einer Simulationsstudie untersucht, ob eine Nutzung der überschüssigen Gase sinnvoll in das Energiesystem des Herstellers eingebunden werden kann. Als Erweiterung des aktuellen Wasserstoff-Energiesystems wird eine Brennstoffzelle, eine Photovoltaik-Anlage und ein Zwischenspeicher für die Prozessgase in Betracht gezogen.

In vorangehenden Arbeiten wurde bereits die Modelica-Bibliothek AixLib entwickelt, welche unter anderem Modelle der relevanten Elektronik-Komponenten, wie beispielsweise der Photovoltaik-Anlage, enthält. Im ersten Schritt werden für die benötigten Wasserstoffkomponenten - insbesondere Elektrolyseur und Brennstoffzelle - Modelle in Modelica erstellt. Dabei wird ein Aufbau gewählt, der es ermöglicht, verschiedene Anlagen anhand von Kennwerten aus Datenblättern zu modellieren. Aus einer Validierung der Komponentenmodelle geht hervor, dass diese für die in dieser Arbeit angestrebten Untersuchungen geeignet sind: In den gewählten Betriebspunkten ergeben sich für den Elektrolyseur und die Brennstoffzelle Abweichungen von durchschnittlich 2,0 % und 5,3 % der relevanten Ausgangsgrößen zu Messwerten aus der Literatur.

Im zweiten Schritt werden mögliche Konzepte des Energiesystems herausgearbeitet. Dabei wird zur Nutzung des Wasserstoffüberschusses die Verwendung einer Brennstoffzelle betrachtet. Zudem wird die Einbindung einer Photovoltaik-Anlage zur Deckung des Strombedarfs sowie deren Ergänzung um einen Gasspeicher untersucht. Daraufhin werden die Konzepte in Modelica simuliert und abschließend wird eine Interpretation der Simulationsergebnisse durchgeführt. Zur Bewertung werden die Kapitalwerte sowie die CO<sub>2</sub>-Einsparungen der Systemkonzepte verglichen.

Die Investition in eine Brennstoffzelle stellt sich als tendenziell unwirtschaftlich heraus, wobei die ökologische Bewertung positiv ausfällt. Eine Optimierung des Brennstoffzellen-Konzepts verspricht deutliche Verbesserungen des Kapitalwerts, ohne die CO<sub>2</sub>-Einsparungen signifikant

zu vermindern. Die PV-Anlage stellt sowohl nach der ökonomischer, als auch nach der ökologischer Bewertung die sinnvollste Erweiterung des aktuellen Systems dar. Die Ergänzung der PV-Anlage um einen Gasspeicher hat auf die Ausgangsgrößen der Simulation keinen Einfluss und wird daher als nicht sinnvoll bewertet.

## **Abstract**



# Inhaltsverzeichnis

<b>Nomenklatur</b>	<b>VII</b>
<b>Abbildungsverzeichnis</b>	<b>XI</b>
<b>Tabellenverzeichnis</b>	<b>XIII</b>
<b>1 Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>2 Grundlagen</b>	<b>3</b>
2.1 Modellierung . . . . .	3
2.1.1 Elektrolyseur . . . . .	4
2.1.2 Brennstoffzelle . . . . .	5
2.2 Wasserelektrolyse . . . . .	6
2.2.1 Elektrochemische Betrachtung . . . . .	7
2.2.2 Thermisches Verhalten . . . . .	11
2.2.3 Polarisationskurve und Betriebsbereiche . . . . .	11
2.2.4 Technologien der Wasserelektrolyse . . . . .	13
2.2.5 Brennstoffzellen . . . . .	15
2.2.6 Benötigte Systemkomponenten . . . . .	17
<b>3 Modellierung des Wasserstoff-Energiesystems</b>	<b>19</b>
3.1 Implementierung der Wasserstoffkomponenten in Modelica . . . . .	19
3.1.1 Modellierung der Elektrolysezelle . . . . .	19
3.2 Entwicklung von Energiesystem-Konzepten . . . . .	21
3.2.1 Identifikation sinnvoller Bewertungskriterien . . . . .	22
3.2.2 Systemkonzepte . . . . .	22
3.2.3 Parametrierung der Komponenten . . . . .	24
3.2.4 Randbedingungen . . . . .	26
<b>4 Simulation der Systemkomponenten und Diskussion der Ergebnisse</b>	<b>29</b>
4.1 Validierung der Komponentenmodelle . . . . .	29
4.1.1 Komponenten der Systemkonzepte . . . . .	29
4.1.2 PEM-Elektrolyseur . . . . .	32
4.2 Ergebnisse der Simulationen der Systemkonzepte . . . . .	34

<b>5</b>	<b>Fazit und Ausblick</b>	<b>41</b>
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>43</b>
<b>A</b>	<b>Parametrierung der Modelle</b>	<b>53</b>
<b>B</b>	<b>Systemkonzepte</b>	<b>55</b>
<b>C</b>	<b>Parameter zur Berechnung des Kapitalwerts</b>	<b>57</b>
<b>D</b>	<b>Parameter zur Berechnung der CO2-Einsparungen</b>	<b>59</b>



## Nomenklatur

### Formelzeichen und Einheiten

Symbol	Bedeutung	Einheit
$A$	Fläche	$\text{m}^2$
$C$	Kapitalwert	€
$C_{Zelle}$	Wärmekapazität der Zelle	J/K
$C_{th}$	Wärmeverlustfaktor	W/K
$c_p$	spezifische Wärmekapazität bei konstantem Druck	J/(kgK)
$F$	Faraday Konstante	A/m <sup>2</sup>
$f$	CO <sub>2</sub> -Faktor	gCO <sub>2</sub> /kWh
$\Delta_R G$	freie Reaktionsenthalpie	A/m <sup>2</sup>
$H$	Enthalpie	J
$H_u$	unterer Heizwert	J/mol
$\Delta_f H_i$	Bildungsenthalpie	J/mol
$\Delta_R H$	Reaktionsenthalpie	J/mol
$H_u$	unterer Heizwert	J/mol
$I$	Stromstärke	A
$I_0$	Anfangsinvestition	€
$i$	Stromdichte	A/m <sup>2</sup>
$i_0$	Austauschstromdichte	A/m <sup>2</sup>
$m$	molare Konzentration	mol/l
$\Delta m_{\text{CO}_2}$	CO <sub>2</sub> -Einsparungen	kg
$n$	Kalkulationszeitraum	a
$\dot{n}$	Stoffmengenstrom	mol/s
$P$	Leistung	W
$\Delta P_{el}$	Stromeinsparungen	kWh
$p$	Druck	Pa
$\dot{Q}$	Wärmestrom	W
$\Delta Q$	Gaseinsparungen	kWh
$R$	molare Gaskonstante	J K/mol

Fortsetzung auf der nächsten Seite

## Formelzeichen und Einheiten

Symbol	Bedeutung	Einheit
$r$	Kalkulatorischer Zinssatz	—
$R_{el}$	elektrischer Widerstand	$\Omega$
$S_i$	Bildungsentropie	J K/mol
$\Delta_R S$	Reaktionsentropie	J K/mol
$T$	Temperatur	K
$t$	Zeit	s
$U$	Spannung	V
$V$	Volumen	m <sup>3</sup>
$z$	Elektronenzahl	—
$Z$	Jährliche Zahlungsströme	€

## Griechische Formelzeichen

Symbol	Bedeutung	Einheit
$\alpha$	Durchtrittsfaktor	—
$\delta$	Elektrodenabstand	m
$\eta$	Wirkungsgrad	—
$\nu_i$	stöchiometrische Koeffizienten	—
$\lambda$	Feuchtegehalt	—
$\sigma$	Leitfähigkeit	§/m

## Indizes und Abkürzungen

Symbol	Bedeutung
0	Referenzzustand ( <i>ambient dead state</i> )
Akt	Aktivierung
Alk	alkalisch
aus	Ausgangszustand
ein	Eingangszustand

Fortsetzung auf der nächsten Seite

## Indizes und Abkürzungen

Symbol	Bedeutung
einsp.	Einsparungen
el	elektrisch
Em.	Emissionen
exp	Exponentialfunktion
GR	Gleichrichter
PEM	Protonen-Austausch-Membran ( <i>proton exchange membran</i> )
PV	Photovoltaik
Prod.	Produktion
R	Reaktion
rev	reversibel
SO	Festoxid ( <i>solid oxide</i> )
tn	thermoneutral
WR	Wechselrichter



## Abbildungsverzeichnis

2.1	Überdeckung der Eigenschaften von System und Modell nach Tabeling [3]. . .	3
2.2	Ladungsträger bei der Wasserelektrolyse nach Tjarks [8]. . . . .	7
2.3	Abhängigkeit der Reaktionsenthalpie und der freien Enthalpie von der Temperatur nach Tremel [18]. . . . .	8
2.4	Mögliche Bereiche der Polarisationskurven der in 2.2.4 erläuterten technischen Verfahren nach Tremel [18]. . . . .	12
2.5	Übersicht der benötigten Systemkomponenten zum Betrieb eines Elektrolyseurs [8]. . . . .	17
2.6	Übersicht der benötigten Systemkomponenten zum Betrieb einer Brennstoffzelle.	18
3.1	Architektur des entwickelten Elektrolyseur- und Brennstoffzellen-Modells. . .	20
3.2	Aktuelles System sowie betrachtete Erweiterungen (1.Netzanschluss 2.Elektrolyseur 3.Gasheizung 4.Strombedarf 5.Wasserstoffbedarf 6.Sauerstoffbedarf 7.Heizwärmebedarf - Erweiterungen: 8.Brennstoffzelle 9.PV-Anlage 10.Gasspeicher). . . . .	23
3.3	An 2018 angelehnter, exemplarischer Verlauf des Wasserstoff- und Sauerstoffbedarfs über einen Arbeitstag. . . . .	27
3.4	An 2019 angelehnter, exemplarischer Verlauf des Wasserstoff- und Sauerstoffbedarfs über einen Arbeitstag. . . . .	27
4.1	Vergleich des Elektrolyseur-Modells mit Messwerten von Hammoudi et al. [45].	30
4.2	Vergleich des Brennstoffzellen-Modells mit Messwerten von Chugh et al. [11].	31
4.3	Vergleich des Elektrolyseur-Modells mit Messwerten von Tjarks [8]. . . . .	33
4.4	Vergleich der Simulationsergebnisse für den Jahresstromverbrauch des aktuellen Systems und der Konzepte samt Angabe der Stromeinsparungen im Vergleich zum aktuellen System. . . . .	36
4.5	Kapitalwerte der Systemkonzepte. . . . .	38
4.6	CO <sub>2</sub> -Einsparungen der Systemkonzepte. . . . .	39



## Tabellenverzeichnis

2.1	Eigenschaften verschiedener Modellstrukturen. . . . .	4
2.2	Standardbildungsenthalpien und Standardentropien für 25 °C [16] sowie stöchiometrische Koeffizienten aus Gleichung 2.1. . . . .	8
2.3	Vergleich der gängigen Technologien zur Wasserelektrolyse nach Milanzi et al. [26], Tremel [18] und Rashid et al. [30]. . . . .	15
2.4	Vergleich der gängigen Technologien Wasserstoff-basierter Brennstoffzellen nach Mekhilef et al. [33]. . . . .	17
3.1	In der Simulationsstudie betrachtete Erweiterungen des Wasserstoff-Energiesystems. . . . .	24
3.2	Zur Simulation des alkalischen Elektrolyseurs verwendete Parameter. . . . .	24
3.3	Zur Simulation der PEM-Brennstoffzelle verwendete Parameter. . . . .	25
4.1	Vergleich der Stromeinsparungen, Einspeisung und Gaseinsparung der Systemkonzepte (Im erste Block sind die Daten für die Bedarfsverläufe aus 2018 und im zweite die Daten für die Bedarfsverläufe aus 2019 angegeben). . . . .	36
4.2	Kapitalwerte der Konzepte sowie Kosten, die in die Berechnung einfließen (Im erste Block sind die Daten für die Bedarfsverläufe aus 2018 und im zweite die Daten für die Bedarfsverläufe aus 2019 angegeben). . . . .	38
4.3	CO <sub>2</sub> -Einsparungen der Systemkonzepte sowie Einsparungen elektrischer Energie, Gaseinsparungen und bei der Produktion der Komponenten entstehende CO <sub>2</sub> -Emissionen (Im erste Block sind die Daten für die Bedarfsverläufe aus 2018 und im zweite die Daten für die Bedarfsverläufe aus 2019 angegeben). . . . .	40





# 1 Einleitung

Die deutsche Bundesregierung hat durch den Beschluss vom 12.05.2021 die Zielvorgaben der CO<sub>2</sub> Einsparungen weiter verschärft. Waren anfangs 55 % Einsparungen im Jahr 2030 im Vergleich zum CO<sub>2</sub>-Ausstoß von 1990 geplant, wurde dieser Wert auf 65 % angehoben [1]. Auch die Industrie ist gefordert, Maßnahmen zur CO<sub>2</sub>-Einsparung zu entwickeln und umzusetzen: In den nächsten 10 Jahren sollten die jährlichen Emissionen der deutschen Industriebranche nach dem alten Plan um 21 % gesenkt werden [2], was sich durch den aktuellen Beschluss weiter verschärft. In der vorliegenden Arbeit wird daher exemplarisch das Wasserstoff-Energiesystem eines Quarzglas Herstellers betrachtet, um Konzepte zur effizienteren Gestaltung solcher Systeme zu identifizieren.

Bei der Nachbehandlung von Quarzglas werden Wasserstoff sowie Sauerstoff benötigt welche im Wasserstoff-Energiesystem des Herstellers mithilfe eines Elektrolyseurs erzeugt werden. Elektrolyseure spalten Wasser zu Wasserstoff und Sauerstoff und produzieren die beiden Gase daher in einem festen Stoffmengenverhältnis, allerdings werden die Gase in den Verfahrensschritten in einem anderen Stoffmengenverhältnis benötigt. Somit wird ein Wasserstoffüberschuss erzeugt, welcher ungenutzt in die Atmosphäre entweicht.

In dieser Arbeit wird daher anhand einer Simulationsstudie untersucht, ob das Wasserstoff-Energiesystem des Herstellers effizienter gestaltet werden kann. Dabei wird die Verwendung einer Brennstoffzelle zur Nutzung der überschüssigen Gase betrachtet. Diese bietet die Möglichkeit, den Wasserstoff mit Umgebungsluft unter Freisetzung von Wärme und elektrischem Strom zu Wasser zu kombinieren. Zudem wird untersucht, welchen Nutzen die Einbindung einer Photovoltaik-Anlage in das Energiesystem für die Deckung des Strombedarfs hat.

Zur Modellierung der Elektronik-Komponenten, wird auf vorangehende Arbeiten zurückgegriffen. Am Lehrstuhl für Gebäude- und Raumklimatechnik wurde bereits eine Bibliothek in der Modellierungssprache *Modelica* entwickelt, welche unter anderem Modelle für Photovoltaik(PV)-Anlagen enthält. Da die Bibliothek keine Modelle der Wasserstoffkomponenten beinhaltet, ist die Modellierung von Elektrolyseuren und Brennstoffzellen Bestandteil dieser Arbeit. Für eine bessere Wiederverwendbarkeit und vereinfachte Nutzung des Modells wird ein Aufbau gewählt, der es ermöglicht, verschiedene Anlagen anhand von Kennwerten

aus Datenblättern zu modellieren. Die Eignung der entwickelten Modelle für die folgenden Simulationen wird durch eine Validierung mit Literaturangaben sichergestellt. Auf die Simulation der betrachteten Wasserstoff-Energiesysteme folgt die Interpretation der Simulationsergebnisse. Um eine Bewertung inklusive Vergleich der Systemkonzepte zu ermöglichen, werden Bewertungsgrößen festgelegt, die aus den Simulationsergebnissen berechnet werden.

Ergebnis der Arbeit sind somit im ersten Schritt Modelle der Wasserstoffkomponenten, welche auf der bestehenden *Modelica*-Bibliothek basieren und für folgende Arbeiten genutzt werden können. Darauf aufbauend wird eine auf Simulationsergebnissen gestützte Bewertung verschiedener Wasserstoff-Energie Systeme anhand von definierten Bewertungsgrößen durchgeführt. Dazu ist die vorliegende Arbeit wie folgt aufgebaut:

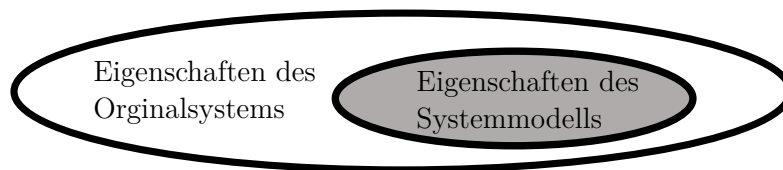
- In Kapitel 2 werden die allgemeinen Grundlagen vorgestellt, auf denen die Modellierung der Wasserstoffkomponenten aufbaut. Anfangs werden dazu Grundlagen der Modellierung sowie der Stand der Technik Modellierung von Elektrolyseuren und Brennstoffzellen vorgestellt. Weiterhin wird die Funktionsweise von Elektrolyse- und Brennstoffzellen, deren thermodynamische und elektrochemische Grundlagen sowie gängige technische Lösungen erläutert.
- Die Modellierung der Wasserstoff-Energiesysteme wird Kapitel 3 beschrieben. Anfangs werden die Modelle des Elektrolyseurs und der Brennstoffzelle vorgestellt. Weiterhin werden Bewertungskriterien für Wasserstoff-Energiesysteme ausgearbeitet und anschließend alternative Systemkonzepte präsentiert. Im letzten Abschnitt werden die für die Simulation der Systemkonzepte gewählten Parameter und Randbedingungen hergeleitet.
- In Kapitel 4 wird einerseits eine Validierung des Elektrolyseur- und Brennstoffzellenmodells anhand von in der Literatur dokumentierten Messwerten vorgenommen. Weiterhin werden die Simulationsergebnisse präsentiert und darauf aufbauend eine Bewertung der Systemkonzepte nach den herausgearbeiteten Kriterien vorgenommen.

## 2 Grundlagen

Im folgenden Kapitel werden die Grundlagen vorgestellt, auf denen die Modellierung der Wasserstoffkomponenten aufbaut. Anfangs wird dazu auf die Eigenschaften verschiedener Modellstrukturen sowie deren Vor- und Nachteile eingegangen. Weiterhin wird ein Überblick über den aktuellen Stand der Modellierung von Elektrolyseuren und Brennstoffzellen geliefert. Im zweiten Abschnitt wird die Funktionsweise von Elektrolyseuren und Brennstoffzellen erläutert und darauf aufbauend auf die zur Modellierung genutzten physikalischen Grundlagen eingegangen.

### 2.1 Modellierung

Nach Tabeing [3, S. 32] ist ein Systemmodell eine Abstraktion zu einem System (im Sinne des Systemgebildes) welche nur eine Menge ausgewählter, gerade interessierender Sachverhalte des betrachteten Systems aufweist. Das Ziel der Modellierung ist daher nicht alle Eigenschaften des realen Systems möglichst exakt wiederzugeben sondern ausgewählte Eigenschaften ausreichend genau zu beschreiben.



**Abbildung 2.1:** Überdeckung der Eigenschaften von System und Modell nach Tabeing [3].

Nach Sjöberg et al. [4] liegt die Schwierigkeit in der Modellierung in erster Linie in der Identifikation einer zur Anwendung geeigneten Modellstruktur. Üblicherweise werden dabei drei Gruppen unterschieden: White-, Grey- und Black-Box-Modelle. White-Box-Modelle erfordern ein umfassendes Verständnis des realen Systems und bauen vollständig auf physikalischem Vorwissen auf. Ziel ist eine exakte, auf physikalischen Gesetzen basierende Modellierung. Black-Box-Modelle hingegen nutzen kein Vorwissen, sondern verwenden aus Experimenten gewonnene Daten. Dabei schätzen sie das Systemverhalten als eine Kombination mehrerer Eingangs- und dazu gehöriger Ausgangsgrößen ab [5]. Häufig liegen verwendete

Modelle zwischen den beiden genannten Fällen, es handelt sich also meist um Grey-Box-Modelle. Diese lassen sich wiederum in zwei Untergruppen unterteilen: Bei physikalischen Grey-Box-Modellen wird physikalisches Vorwissen genutzt und mit experimentell gewonnenen Parametern ergänzt. Bei semiphysikalischen Grey-Box-Modellen wird Vorwissen über das Systemverhalten genutzt, um eine Modellstruktur für ein Modell mit Black-Box Charakter zu entwickeln.

Sjöberg et al. [4] geben als Basisregel an, dass vorhandenes Wissen über das Systemverhalten bei der Modellierung genutzt werden sollte. Dies lässt sich darin begründen, dass experimentell gewonnene Datensätze nur Teilbereiche eines komplexen Systems beschreiben können und daher in ihrer Allgemeingültigkeit eingeschränkt sind. Als Nachteil der physikalischen Modellierung ist zu benennen, dass mit steigender Systemkomplexität die Entwicklungs- und Rechenzeit erheblich zunimmt [5]. In Tabelle 2.1 sind grundlegende Eigenschaften von White- und Black-Box-Modellen zusammengefasst.

**Tabelle 2.1:** Eigenschaften verschiedener Modellstrukturen.

White-Box-Modell	hohes Maß an implementierter Systemkenntnis + großer Gültigkeitsbereich – lange Rechen- und Entwicklungsdauer bei komplexen Systemen
Grey-Box-Modell	erfordert sowohl Systemkenntnis als auch Eingangsdaten · mittlerer Gültigkeitsbereich · mittlere Rechen- und Entwicklungsdauer bei komplexen Systemen
Black-Box-Modell	große Menge an Eingangsdaten + geringer Entwicklungs- und Rechenaufwand bei komplexen Systemen – eingeschränkter Gültigkeitsbereich

### 2.1.1 Elektrolyseur

Im Folgenden wird ein kurzer Überblick über aktuelle Forschungsergebnisse zur Modellierung von Elektrolyseuren geliefert:

Ulleberg [6] präsentiert ein semi-physikalisches Modell einer alkalischen Elektrolyse-Zelle zur Bestimmung der Polarisationskurve. Dabei wurden als Einflussparameter die Betriebstemperatur und der Druck berücksichtigt. Der Zusammenhang von elektrischer Leistung und produzierter Stoffmenge wird durch eine Kombination aus physikalischen Gesetzen und aus Messwerten gefolgerten Approximationen bestimmt. Amores et al. [7] ergänzen dieses Modell um ausgewählte Materialeigenschaften und Geometrie-Parameter der Zelle, um den Gültigkeitsbereich des Modells zu vergrößern. Die Parameter wurden dabei mithilfe eines Matlab Fitting-Codes aus experimentell gewonnenen Messwerten bestimmt.

Tjarks [8] stellt ein physikalisches Modell eines PEM-Elektrolyseurs für die Untersuchung von Power-to-Gas Anwendungen vor. Dabei werden physikalische Gesetze verwendet, um Verlustmechanismen zu beschreiben. Weiterhin wird das Zellverhalten mit Fitting Parametern den Messwerten einer Versuchsreihe angenähert. Eine Besonderheit des Modells ist die Berücksichtigung des Thermomanagements des Elektrolyseurs zur Berechnung der benötigten Heizbeziehungsweise Kühlleistung. Zudem werden zum Betrieb des Elektrolyseurs benötigte Systemkomponenten in der Modellierung berücksichtigt.

Rodríguez and Amores [9] modellieren neben den elektrochemischen Vorgängen in einem Elektrolyseur auch die Strömungsvorgänge, die den Stofftransport beschreibenden. Dabei werden die Vorgänge der Blasenbildung und Strömung von Gasen mithilfe einer CFD-Simulation berücksichtigt. Die Abweichungen der Simulationsergebnisse von Messwerten einer Einzelzelle liegt unter 1%, wobei zu bedenken ist, dass die Methode eine genaue Kenntnis der Zellgeometrie, der Eigenschaften der verwendeten Materialien und weiterer Parameter erfordert.

Nach aktuellem Stand wird somit eine Anzahl verschiedener Modellierungsansätze genutzt, um das Verhalten von Elektrolysezellen vorherzusagen. Häufig werden physikalische Modelle verwendet, da diese einen Mittelweg zwischen der benötigten Datenmenge und dem Entwicklungsaufwand darstellen. Der Detaillierungsgrad variiert dabei abhängig vom Untersuchungsfokus. Nachteile aktueller Modelle sind die Beschränkung auf eine Elektrolyse-Technologie.

### **2.1.2 Brennstoffzelle**

Brennstoffzellen weisen hinsichtlich der Modellierung große Ähnlichkeiten zu Elektrolysezellen auf. Beispielsweise implementieren Motapon et al. [10] oder Chugh et al. [11] die gleichen physikalischen Gesetze in einem Modelle für Brennstoffzellen die von Tjarks [8] in dem Elektrolyseur-Modell implementiert sind.

Barragan et al. [12] präsentieren ein Black-Box Modell zur Echtzeitregelung von Brennstoffzellen. Das Modell basiert auf der Fuzzy Methode, welche aus Paaren von Eingangs- und Ausgangsdaten Merkmale ableitet. Abhängig davon, in welchem Maß die Eingangswerte die Merkmale erfüllen, werden Ausgangsdaten der Versuchsreihen überlagert, um die Ausgangswerte abzuschätzen. Kombiniert wird die Fuzzy Methode mit einem Kalman Filter. Dieser rekursive Filter, schätzt das Datenrauschen auf Grundlage von Messwerten ab und ermöglicht es, die Ausgabe iterativ zu bestimmen. Das Modell ist besonders vorteilhaft für die Langzeit-Regelung von Brennstoffzellen, weil laufend Input-Output Daten in die Modellierung einfließen.

Jiao and Ni [13] untersuchen den aktuellen Stand der physikalischen Modellierung von PEM-Brennstoffzellen und arbeitet Schwächen der aktuellen Modellierungsansätze aus. Das Wassermanagement der Zelle wird als wichtiges Forschungsfeld angeführt, da die Membran zur höheren Leitfähigkeit ausreichend befeuchtet sein muss. Es werden numerische Modelle vorgestellt, die entwickelt wurden, um Verdampfungsvorgänge sowie die Mehr-Phasen-Strömung in den Kanalstrukturen zu beschreiben. Als Nachteil stellt sich dabei die hohe benötigte Rechenleistung heraus. Weiterhin bleibt die Eisbildung, welche besonders im Falle eines Kaltstarts auftritt und die Katalysator-Flächen bedecken kann, in den Verfahren unberücksichtigt.

Wie auch bei der Modellierung von Elektrolysezellen, existieren somit nach aktuellem Stand eine Anzahl verschiedener Modellierungsansätze für Brennstoffzellen. Meist beschränken sich die Modelle auf die Modellierung der elektrischen Ausgangsleistung zur Nutzung in mobilen Anwendungen. Ein weiterer Nachteil aktueller Modelle ist die Beachtung von nur einer Elektrolyse-Technologie.

### 2.2 Wasserelektrolyse

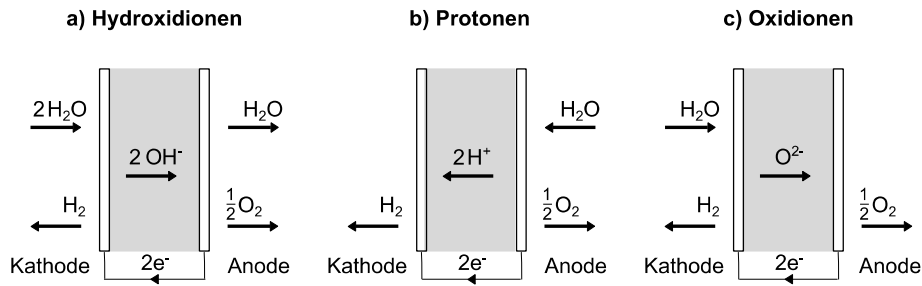
Im folgenden Abschnitt werden anfangs die elektrochemischen Grundlagen der Elektrolyse von Wasser vorgestellt sowie deren thermodynamische Zusammenhänge geschildert. Zudem wird die ideale Zellspannung hergeleitet und wesentliche Verlustmechanismen sowie deren Einfluss auf den Betriebsbereich von Elektrolyseuren beschrieben. Weiterhin werden drei technische Lösungen der Wasserelektrolyse vorgestellt, sowie Gemeinsamkeiten und Unterschiede von Elektrolyseuren und Brennstoffzellen aufgezeigt. Abschließend wird auf Komponenten eingegangen, die zum Betrieb von Elektrolyseuren und Brennstoffzellen benötigt werden.

Als Elektrolyse bezeichnet man einen chemischen Prozess, bei dem eine Redoxreaktion durch elektrische Spannung erzwungen wird. Um eine kontrollierbare Durchführung der Reaktion sicherzustellen, ist eine räumliche und elektrische Trennung der Oxidation und Reduktion nötig [8]. Allerdings muss der Ionenaustausch zwischen Anode und Kathode möglich sein, was durch ein Elektrolyt erreicht wird.

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



Die allgemeine Reaktionsgleichung ist dabei unabhängig vom Elektrolyt, wohingegen sich die Oxidations- und Reduktions Gleichungen 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, welche in Abbildung 2.2 gezeigt werden: Hydroxidionen, Protonen oder Oxidionen [8]. Bei der alkalischen Elektrolyse werden Hydroxidionen durch eine Lauge geleitet und als Trennung der Elektroden wird eine Gas-dichte Membran verwendet. Bei Zellen mit einer Protonen-Austausch-Membran(PEM) wird der Protonen-Austausch durch die Beschaffenheit der Membran sichergestellt. In Festoxid(SO)-Zellen sind als Elektrolyt poröse Feststoffe verbaut, die den Austausch von Oxidionen zwischen den Elektroden ermöglichen. Im Unterkapitel 2.2.4 werden die benannten technischen Verfahren näher erläutert.



**Abbildung 2.2:** Ladungsträger bei der Wasserelektrolyse nach Tjarks [8].

### 2.2.1 Elektrochemische Betrachtung

Die benötigte Energie bei einer Redoxreaktion entspricht der Reaktionsenthalpie  $\Delta_R H$  und lässt sich aus den Bildungsenthalpien ( $\Delta_f H_i$ ) und stöchiometrischen Koeffizienten ( $\nu_i$ ) der Edukte und Produkte bestimmen [14, 15]:

$$\Delta_R H = \sum \nu_i \cdot \Delta_f H_i \quad (2.2)$$

Unter der Annahme, dass die nötige thermische Energie vorliegt, entspricht die zur Reaktion benötigte elektrische Energie der freien Reaktionsenthalpie  $\Delta_R G$ , welche sich über die Reaktionsentropie  $\Delta_R S$  errechnen lässt [14, 15].

$$\Delta_R G = \Delta_R H - T \cdot \Delta_R S \quad (2.3)$$

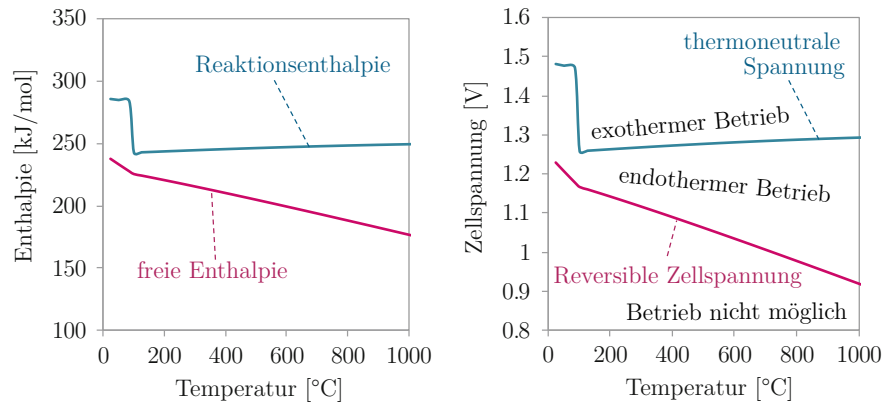
$$\Delta_R S = \sum \nu_i S_i \quad (2.4)$$

Für die Wasserelektrolyse (2.1) bei Standardbedingungen ( $T_0 = 25^\circ C$  und  $p_0 = 101,325 \text{ kPa}$ )

ergibt sich mit den Daten aus Tabelle 2.2 die Reaktionsenthalpie zu  $\Delta H_R^0 = 285,25 \text{ kJ/mol}$  und die freie Enthalpie zu  $\Delta G_R^0 = 236,59 \text{ kJ/mol}$ . Es liegt dabei eine starke Temperaturabhängigkeit vor, was in Abbildung 2.3 deutlich wird.

**Tabelle 2.2:** Standardbildungsenthalpien und Standardentropien für 25 °C [16] sowie stöchiometrische Koeffizienten aus Gleichung 2.1.

Komponenten i	$\Delta_f H_i^0$ [kJ/mol]	$S_i^0$ [J/(molK)]	$\nu_i$ [—]
H <sub>2</sub> O	-285,25	-216.35	-1
O <sub>2</sub>	0	21,78	1/2
H <sub>2</sub>	0	19,88	1



**Abbildung 2.3:** Abhängigkeit der Reaktionsenthalpie und der freien Enthalpie von der Temperatur nach Tremel [18].

### Reversible Zellspannung

Mit der Faraday Konstante ( $F = 96\,485,3 \text{ C/mol}$ ) und der Anzahl der pro Reaktion transferierten Elektronen ( $z = 2$ ) lässt sich die thermoneutrale Spannung bei Standardbedingungen  $U_{tn}^0$  sowie die reversible Zellspannung bei Standardbedingungen  $U_{rev}^0$  errechnen [14].

$$U_{tn}^0 = \frac{\Delta H_R^0}{zF} = 1,478 \text{ V} \quad (2.5)$$

$$U_{rev}^0 = \frac{\Delta G_R^0}{zF} = 1,226 \text{ V} \quad (2.6)$$

Der oben erläuterte Temperatureinfluss auf die Reaktionsbedingungen wirkt sich auch auf die reversible und thermoneutrale Spannungen aus (Abbildung 2.3). Häufig wird dieser Zusammenhang durch Gleichung 2.8 abgebildet [17]. Weiterhin liegt für die Zellspannung eine Ab-



hängigkeit von den Produkt- und Edukt Aktivitäten vor, welche durch die Nernst Gleichung beschrieben werden kann. Drückt man die Aktivität der Produktgase über das Verhältnis des Partialdrucks zum Standarddruck  $p_0$  aus, ergibt sich der in Gleichung 2.9 angeführte Zusammenhang.

$$U_{rev} = U_{rev}^0 + \Delta U_{rev}(p) + \Delta U_{rev}(T) \quad (2.7)$$

$$\Delta U_{rev}(T) = -8,5 \cdot 10^{-4} \cdot (T - 298) \quad (2.8)$$

$$\Delta U_{rev}(p) = \frac{RT}{zF} \ln \left( \frac{p_{H_2}/p_0 \sqrt{p_{O_2}/p_0}}{a_{H_2O}} \right) \quad (2.9)$$

## Überspannungen

Die reale Zellspannung  $U_{Zelle}$  ist im Betrieb aufgrund von Verlusten immer größer als die reversiblen Zellspannung. Ist die reale Zellspannung niedriger, als die thermoneutrale Spannung, läuft das System endotherm ab. In dem Fall muss dem System Wärmeenergie zugeführt werden.

Als maßgebliche Verluste, auch Überspannungen genannt, werden üblicherweise drei Phänomene betrachtet: Aktivierungsverluste ( $U_{Akt}$ ), Ohmsche Verluste ( $U_{Ohm}$ ) und Konzentrationsüberspannung [14]. In dieser Arbeit werden die Konzentrationsüberspannungen als vernachlässigbar klein angenommen, da sie erst außerhalb der üblichen Betriebsgrenzen von signifikanter Größenordnung sind. 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 2.2.3 näher erläutert wird. Daher werden Diffusionsströme in dieser Arbeit vernachlässigt. Somit wird die reale Zellspannung wie folgt berechnet:

$$U_{Zelle} = U_{rev} + U_{Akt} + U_{Ohm} \quad (2.10)$$

## 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 zwi-

schen Elektrode und Elektrolyt) und andererseits elektrische (aufgrund des Ladungstransports durch das elektrische Feld an der Grenzfläche) [19]. Aktivierungsverluste lassen sich mithilfe der Butler-Volmer-Gleichung beschreiben [17, 19]. Zur Modellierung kann für ausreichend hohe Stromdichten vereinfachend die Tafel-Gleichung angewendet werden, Abdin et al. [20] nutzen sie in der folgenden Form:

$$U_{Akt} = \frac{RT}{2 \cdot \alpha \cdot F} \cdot \ln(i/i_0) \quad (2.11)$$

Der Durchtrittsfaktor  $\alpha$  und die Austauschstromdichte  $i_0$  sind dabei experimentell zu ermitteln und unterscheiden sich je nach Bauart.

### Ohmsche Verluste

Ohmsche Verluste werden durch elektrische sowie ionische Widerstände und Kontaktwiderständen zwischen den Komponenten verursacht. Ionische Widerstände, welche sich in dem Elektrolyt und an den Elektrodenoberflächen lokalisieren lassen, dominieren üblicherweise die Ohmschen Verluste [19, 21]. Elektrische Widerstände treten in den Elektroden und an den Kontakten der Zelle auf und lassen sich somit durch einen günstigen Aufbau der Zelle vermindern [8]. Die ohmschen Verluste können mithilfe des Ohmschen-Gesetzes (Gleichung 2.12) bestimmt werden, für welches neben dem Elektrodenabstand auch die Leitfähigkeit des jeweiligen Elektrolyts benötigt wird.

Olivier et al. [17] geben eine Gleichung zur Berechnung der Leitfähigkeit alkalischer Zellen an, dabei sind die Einflussfaktoren die Betriebstemperatur ( $T$ ) sowie die Stoffmengenkonzentration ( $m$ ) der Lauge des Elektrolyts. Die Berechnung der Leitfähigkeit für Festoxid (SO) Zellen ist Hajimolana et al. [22] entnommen. Der Ansatz für PEM-Zellen wird in der Literatur häufig verwendet [14, 17] und beachtet neben der Betriebstemperatur ( $T$ ) auch den Feuchtegehalt der Membran ( $\lambda$ ). Tjarks [8] erweitert die Berechnung des ohmschen Widerstandes nach Gleichung 2.13 um einen Parameter zur Berücksichtigung elektrischer Widerstände  $R_{el}$ .

$$U_{Ohm} = i \cdot (\delta / \sigma) \quad (2.12)$$

$$U_{Ohm, PEM} = i \cdot (\delta / \sigma + R_{el}) \quad (2.13)$$

$$\begin{aligned}\sigma_{Alk} = & -2.04m - 0.0028m^2 + 0.005332mT \\ & + 207.2m/T + 0.001043m^3 - 3 \cdot 10^{-3}m^2T^2\end{aligned}\quad (2.14)$$

$$\sigma_{SO} = 3.34 \cdot 10^4 + \exp(-10300/T) \quad (2.15)$$

$$\sigma_{PEM} = (0.005139 \cdot \lambda - 0.00326) \cdot \exp(1268 \cdot (1/303 - 1/T)) \quad (2.16)$$

### 2.2.2 Thermisches Verhalten

Zur Bestimmung des Wärmeflusses wird nach Webster and Bode [23] die Energiebilanz einer Elektrolysezelle betrachtet. Die im System enthaltene Energie wird dabei über die Zelltemperatur und die Wärmekapazität ( $C_{Zelle}$ ) beschrieben.

$$C_{Zelle} \frac{dT}{dt} = \dot{n}(h_{ein} - h_{aus}) + P_{el} - \dot{Q} \quad (2.17)$$

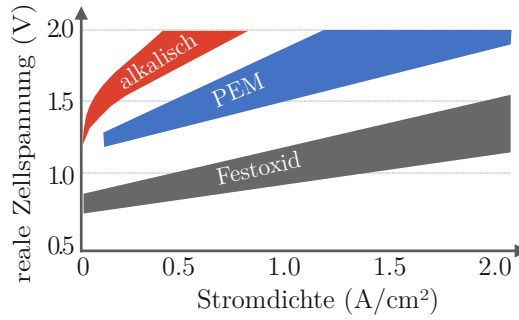
Die Enthalpiedifferenz ergibt sich aus der Reaktionsenthalpie und der Temperaturdifferenz zwischen Eingang und Ausgang. Die benötigte Reaktionsenthalpie und die elektrische Leistung drückt Webster and Bode [23] über die thermoneutrale Spannung und die Zellspannung aus. Unter der Annahme, dass die Ausgangstemperatur der Gase gleich der Betriebstemperatur ist, ergibt sich für die Energiebilanz damit:

$$\begin{aligned}C_{Zelle} \frac{dT}{dt} = & -(\dot{n}_{H_2, ein} \cdot c_{p, H_2} + \dot{n}_{H_2, ein} \cdot c_{p, O_2}) \cdot (T_{ein} - T) \\ & - I \cdot (U_{Zelle} - U_{tn}) - \dot{Q}\end{aligned}\quad (2.18)$$

### 2.2.3 Polarisationskurve und Betriebsbereiche

Die Polarisationskurve gibt die Abhängigkeit der realen Zellspannung  $U_{Zelle}$  eines Elektrolyseurs von der Stromdichte graphisch wieder. Diese wird von vielen Faktoren, wie beispielsweise den Elektrodenmaterialien, der Geometrie der einzelnen Bauteile oder den Betriebsbedingungen wie Druck und Temperatur, beeinflusst. Grundlage für die Berechnung der Polarisationskurve ist die in 2.2.1 hergeleitete reversible Zellspannung und die reale Zellspannung (2.10). In Abbildung 2.4 werden die Polarisationskurven der in 2.2.4 erläuterten technischen Verfahren verglichen.

Des weiteren lässt sich die Polarisationskurve auch zur Identifikation sinnvoller Betriebsbereiche nutzen. 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



**Abbildung 2.4:** Mögliche Bereiche der Polarisationskurven der in 2.2.4 erläuterten technischen Verfahren nach Tremel [18].

einen direkten Zusammenhang zwischen dem Elektronenfluss und dem Stoffmengenstrom des produzierten Wasserstoffs ( $\dot{n}_{H_2O}$ ).

$$P_{el}(i) = U_{Zelle}(i) \cdot i A_{zelle} \quad (2.19)$$

$$\dot{n}_{H_2O} = \frac{i A_{zelle}}{zF} \quad (2.20)$$

Der Wirkungsgrad ( $\eta_{Zelle}$ ) einer Zelle, bezogen auf den unteren Heizwert ( $H_u$ ) von Wasserstoff wird damit durch folgenden Ausdruck beschrieben:

$$\eta_{Zelle} = \frac{H_u \cdot \dot{n}_{H_2O}}{P_{el}} = \frac{H_u}{U_{Zelle}(i) \cdot zF} \quad (2.21)$$

Somit zeigt sich, dass es zur Steigerung der Effizienz erstrebenswert ist, den Elektrolyseur bei einer niedrigen Spannungen zu betreiben [24]. Aus Abbildung 2.4 wird ersichtlich, dass dies bei einer niedrigen Stromdichte der Fall ist. Allerdings bleibt zu bedenken, dass dadurch auch der Produktgasstrom verringert wird. Daher ist bei der Auslegung ein Kompromiss zwischen Wirkungsgrad und einer größeren aktiven Zellfläche - und damit verbunden höheren Investitionen und größerem Bauraum - zu finden.

Weiterhin stellt die Gasreinheit der Produktströme eine untere Betriebsgrenze für die Stromdichte dar. Aufgrund der Diffusion der Produktgase zur gegenüberliegenden Elektrode kommt es zu einer Mischung von Sauerstoff und Wasserstoff. Um die Zerstörung des Systems durch Explosionen zu verhindern, geben Brauns and Turek [15] an, dass meist bei einer Verunreinigung über 2 Volumen-% ein Notstopp des gesamten Elektrolyseur-Systems eingeleitet wird. Weil der Betriebsdruck und die Stromdichte die Gasreinheit signifikant beeinflussen, wird es

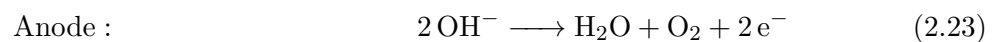
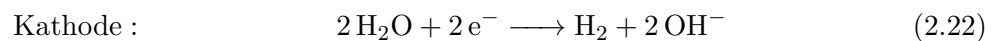
empfohlen, Grenzwerte für diese beiden Größen festzulegen.

### 2.2.4 Technologien der Wasserelektrolyse

Im Folgenden werden die drei maßgeblichen Verfahren zur Wasserelektrolyse näher erläutert und verglichen.

#### Alkalischer Elektrolyseur

Die alkalische Elektrolyse ist eine ausgereifte Technik und der derzeitige Standard für groß dimensionierte Elektrolyseure [18]. Anlagen mit einer Eingangsleistung von bis zu 130 MW sind derzeit im Betrieb und die minimale Teillast liegt nach Guandalini et al. [25] bei ungefähr 20 %. Als Elektrolyt dient üblicherweise zwischen 25 und 30 prozentige Natron- (NaOH) oder Kalilauge (KOH) [18]. Die Konzentration beeinflusst dabei maßgeblich die Leitfähigkeit der Lösung. Als Ladungsträger in der Lösung fungieren Hydroxidionen. Es werden metallische Elektroden verwendet, welche zur Steigerung der Aktivität mit Edelmetallen beschichtet werden können. Folgende Reaktionen laufen an der Kathode und Anode ab:



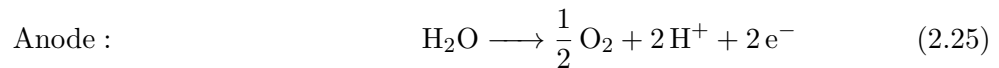
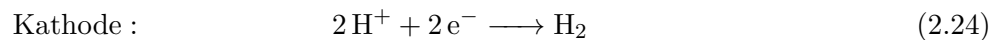
Um die produzierten Gase voneinander getrennt zu halten, wird zwischen Anode und Kathode ein Diaphragma positioniert. Dies hat neben Performance- auch Sicherheitsgründe, da elementarer Wasserstoff hochentzündlich ist. Aus diesem Grund sind Elektrolyseure auch in ihrer Dynamik eingeschränkt: Bevor das 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. Nach Milanzi et al. [26] kann die Anfahrtzeit von Elektrolyseuren erheblich verkürzt werden, wenn sie während Standzeiten im Standby betrieben werden. Ein Nachteil ist dabei der gesteigerte Energieverbrauch.

Ein weiterer Nachteil aktueller technischer Anlagen der alkalischen Elektrolyse ist, dass die maximale Stromdichte verglichen mit anderen Elektrolyseuren niedrig ausfällt (Tremel [18] gibt Stromdichten von  $0,2 - 0,5 \text{ A/cm}^2$  an). Dies trägt, verglichen mit anderen Bauarten, zu einer gesteigerten Baugröße und höherem Gewicht bei gleicher Maximalleistung bei.

### 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  $2 \text{ A/cm}^2$ . Zudem können PEM-Elektrolyseure sehr dynamisch betrieben werden und ein Betrieb bei bis zu 10% minimaler Teillast ist möglich [18].

Als Ladungsträger fungieren Protonen und als Elektrolyt dient eine in destilliertem Wasser positionierte Protonen-Austausch-Membran (**P**roton **E**xchange **M**embran). Die Protonenleitfähigkeit der Polymer-Membran wird durch Sulfonsäure-bindende Seitengruppen, sogenannte Idomere, erreicht [8]. Für die Dicke der Membran muss dabei ein Kompromiss zwischen Langlebigkeit und Durchlässigkeit gefunden werden [14]. Der Säuregehalt des Elektrolyts und die damit verbundene Anforderung an die Korrosionsbeständigkeit, 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:

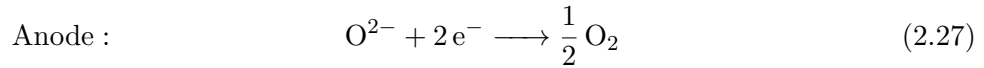
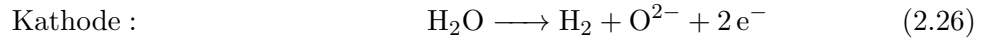


### Festoxid-Elektrolyseur

Festoxid(SO)-Elektrolyseure sind seit 1980 in Entwicklung [18]. Sie haben den Vorteil, dass sie bei Temperaturen von  $700\text{--}1000^\circ\text{C}$  betrieben werden, wodurch dampfförmiges Wasser zerlegt wird, wohingegen bei alkalischen und PEM-Elektrolyseuren flüssiges Wasser vorliegt. Daraus resultiert, dass Reaktionsenthalpie und dadurch auch die reale Zellspannung niedriger ausfällt. Dieser Effekt wird dadurch verstärkt, dass bei hohen Temperaturen die ohmschen Verluste sinken, wodurch niedrigere Überspannungen entstehen [18]. Zudem steigt mit der Temperatur auch die Reaktionsgeschwindigkeit, weshalb keine teuren Katalysator-Materialien verwendet werden müssen [27].

Ein Nachteil der gesteigerten Betriebstemperatur sind die höheren Ansprüche an die Temperaturbeständigkeit der Elektroden und des Elektrolyts. Als Elektrolyt wird meist Zirkoniumdioxid ( $\text{ZrO}_2$ ) verwendet, welches zur Steigerung der Leitfähigkeit mit Yttriumoxid ( $\text{Y}_2\text{O}_3$ ) stabilisiert wird [28]. Das Elektrolyt wird zwischen zwei porösen Elektroden (Beispielsweise eine Nickeloxid Anode und eine LSCF-Kathode [29]) positioniert, was den Austausch der Oxidionen ermöglicht. Darüber hinaus existieren SO-Elektrolyseure, welche auf dem Trans-

port von Protonen basieren, allerdings wird aufgrund ihrer geringen Bedeutung in dieser Arbeit nicht weiter darauf eingegangen [19]. Folgende Reaktionsgleichungen liegen bei den betrachteten Festoxid-Elektrolyseuren vor:



Eine Herausforderung ist das Bereitstellen der benötigten Wärme zur Wasserdampferzeugung und zum Aufrechterhalten der Betriebstemperatur. Dazu werden verschiedene Möglichkeiten, wie beispielsweise die Kopplung mit Wärmepumpen oder Sonnenkollektoren in Betracht gezogen [19]. Weiterhin bleibt ein zu lösendes Problem der Leistungsverlust und der Abbau der Elektrodenmaterialien, was die Lebensdauer der Zellen signifikant einschränkt [27].

Abschließend sind in Tabelle 2.3 wichtige Kennwerte der drei Technologien sowie ihre Vor- und Nachteile aufgeführt.

**Tabelle 2.3:** Vergleich der gängigen Technologien zur Wasserelektrolyse nach Milanzi et al. [26], Tremel [18] und Rashid et al. [30].

	alkalisch	PEM	Festoxid
Temperatur	40 – 90 °C	20 – 100 °C	700 – 1000 °C
min. Teillast	20%	10%	30%
max. Stromdichte	0,2 – 0,5 A/cm <sup>2</sup>	2 A/cm <sup>2</sup>	1 A/cm <sup>2</sup>
max. Lastgradient	33 %/s	100 %/s	
Vorteile	geringer Preis Technologiereife Lebensdauer	Kompaktheit Betriebsbereich Lastgradient Gasreinheit	Wirkungsgrad günstiger Katalysator hoher Betriebsdruck
Nachteile	geringe Gasreinheit korrosives Elektrolyt geringer Betriebsdruck	hohe Kosten saures Elektrolyt lange Anfahrzeit	Technologiereife Lebensdauer

### 2.2.5 Brennstoffzellen

In Brennstoffzellen wird der Umkehrprozess der Elektrolyse betrieben. Die chemische Reaktionsenergie eines Kraftstoffes wird in elektrische Energie umgewandelt. Bei Wasserstoff betriebenen Brennstoffzellen läuft die Reaktion 2.1 rückwärts ab, es wird aus Wasserstoff

und Sauerstoff Wasser gebildet. Der Aufbau von Brennstoffzellen gleicht dem von Elektrolyseuren: Es werden zwei Elektroden, ein Elektrolyt sowie gegebenenfalls ein Diaphragma zur Gastrennung verwendet. Daher werden einige Zellen sowohl als Brennstoffzelle als auch als Elektrolyseur eingesetzt [27]. Ein Vorteil der Brennstoffzelle ist dabei, dass sowohl reiner Sauerstoff als auch Umgebungsluft zur Kombination mit Wasserstoff verwendet werden kann [13, 31].

Die in 2.2.1 genannten elektrochemischen Grundlagen lassen sich auf die Brennstoffzelle übertragen: Die reversible Zellspannung  $U_{rev}$  entspricht der maximalen Ausgangsspannung der Brennstoffzelle. Weil  $U_{rev} < U_{th}$  wird stets weniger elektrische Energie abgeführt, als chemische Energie zugeführt wird, es liegt also eine exotherme Reaktion vor. Da die in 2.2.1 beschriebenen Verlustmechanismen durch Diffusionsvorgänge und ohmsche Widerstände hervorgerufen werden, treten sie auch bei Brennstoffzellen auf [11]. Allerdings werden die Verlustterme von der reversiblen Zellspannung subtrahiert:

$$U_{Zelle} = U_{rev} - U_{Akt} - U_{Ohm} - U_{Diff} \quad (2.28)$$

Wie auch bei Elektrolyseuren existieren für die Umsetzung von reinem Wasserstoff alkalische, PEM und Festoxid Brennstoffzellen [32]. Auf weitere Technologien, welche Methan, Erdgas oder vergaste Kohle als Energieträger verwenden wird in dieser Arbeit nicht näher eingegangen.

Während die elektrochemischen Grundlagen der Brennstoffzelle bereits im 19. Jahrhundert entdeckt wurden, entwickelte die NASA gegen Ende der 1950er die ersten alkalischen und PEM Brennstoffzellen für Raumfahrtanwendungen. Auffällig ist, dass im Gegensatz zur Elektrolyse, bei der heutzutage bei großen Anlagen alkalische Elektrolyseure der Stand der Technik sind (2.2.4), bei den Brennstoffzellen die PEM-Technologie deutlich verbreiteter ist. So gibt Lucia [32] an, dass 2010 der Marktanteil der PEM-Technologie bei Brennstoffzellen bei 97% lag. Eine mögliche Erklärung dafür ist, dass Brennstoffzellen vorwiegend bei mobilen Anwendungen eingesetzt werden - nach Lucia [32] ist dies bei 95% aller verkauften Brennstoffzellen der Fall. Die Vorteile von Brennstoffzellen sind dabei die geringen Geräusch- und Schadstoffemissionen [31]. Für mobile Anwendungen eignen sich insbesondere PEM-Brennstoffzellen, da diese bei einer höheren maximalen Stromdichte betrieben werden können als alkalische und Festoxid-Zellen. Das wiederum bringt Vorteile im Bezug auf den benötigten Bauraum und das Gewicht mit sich.

Eine weiteres Anwendungsgebiet von Brennstoffzellen ist aufgrund des exothermen Betriebs die Kraft-Wärme-Kopplung. Olabi et al. [31] geben an, dass Brennstoffzellen höhere Gesamt-



Wirkungsgrade erreichen als andere klein-skalierte Systeme zur Kraft-Wärme-Kopplung. Dabei ist zu beachten, dass die Qualität der Abwärme insbesondere von der Betriebstemperatur der Brennstoffzelle abhängt, was nach Tabelle 2.4 für den Einsatz von Festoxid-Brennstoffzellen spricht.

In Tabelle 2.4 werden wichtige Kennwerte der drei Technologien sowie ihre Vor- und Nachteile angegeben.

**Tabelle 2.4:** Vergleich der gängigen Technologien Wasserstoff-basierter Brennstoffzellen nach Mekhilef et al. [33].

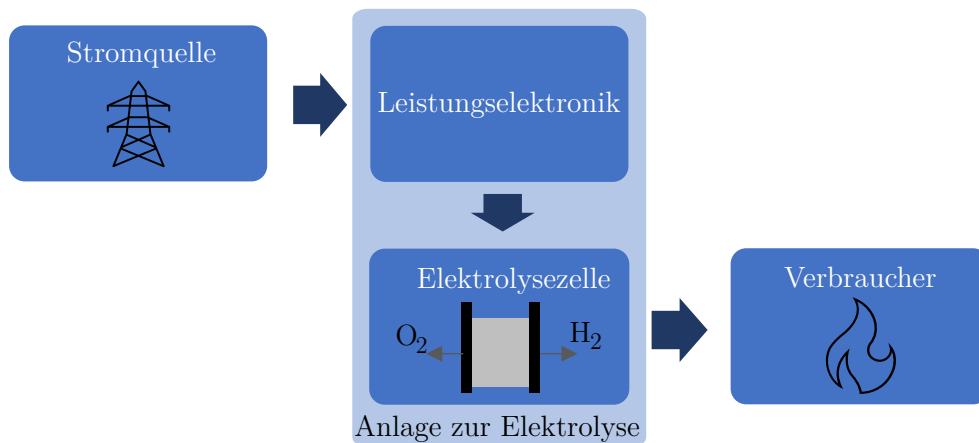
	alkalisch	PEM	Festoxid
Temperatur	90 – 100 °C	50 – 100 °C	600 – 1000 °C
el. Wirkungsgrad	60%	53-58%	35-43%
ges. Wirkungsgrad	80%	70-90%	80%
Vorteile	Preis Technologiereife	Kompaktheit Lebensdauer kurze Anfahrzeit	günstiger Katalysator Effizienz
Nachteile	Empfindlich bei CO <sub>2</sub> korrosives Elektrolyt geringer Betriebsdruck	saures Elektrolyt	Technologiereife Lebensdauer lange Anfahrzeit

### 2.2.6 Benötigte Systemkomponenten

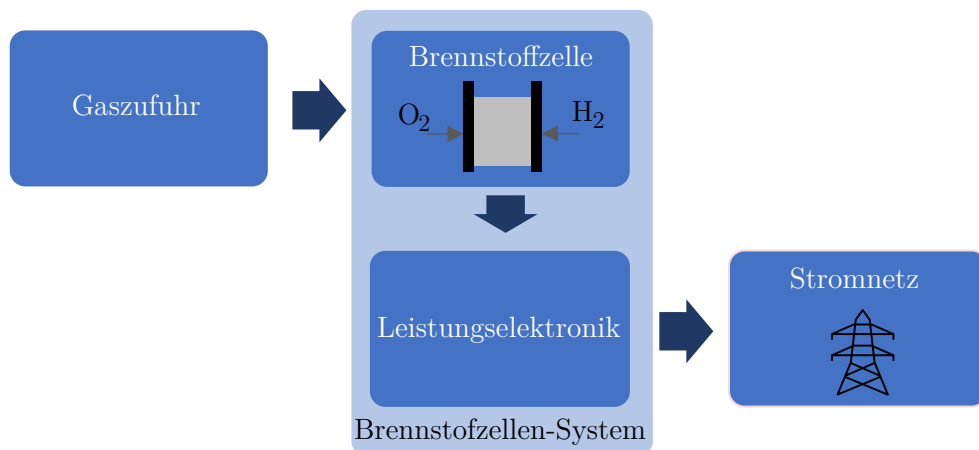
Die zum Betrieb von Elektrolyseuren und Brennstoffzellen benötigten Komponenten werden in dem folgenden Abschnitt erläutert, da sie einen wesentlichen Einfluss auf das Verhalten des Gesamtsystems haben. Abbildungen 2.5 sowie 2.6 liefern dazu einen Überblick.

Im Falle der Elektrolyse wird die Leistungselektronik benötigt, um zwei Aufgaben zu erfüllen: Erstens die Anpassung der Versorgungsleistung auf die elektrischen Anforderungen des Elektrolyseurs und zweitens die Wandlung der Wechselspannung zu Gleichspannung [8]. Stand der Technik sind Thyristor-basierte Gleichrichter, welche sich durch geringe Verluste auszeichnen, allerdings eine Restwelligkeit der Ausgangsgrößen aufweisen. Verbesserungen versprechen in diesem Bereich für die Zukunft Transistor-basierte Gleichrichter [8].

Im Falle der Brennstoffzelle wird die Leistungselektronik benötigt, um die erzeugte Gleichspannung zu Wechselspannung zu transformieren und den elektrischen Anforderungen des Netzes anzupassen. Nach Engler et al. [34] haben sich im Bereich der Wechselrichter Transistor-basierte Systeme etabliert. Häufig werden Niederfrequenz Transformatoren verwendet, welche sich durch eine hohe Zuverlässigkeit auszeichnen, allerdings Nachteile bei dem Gewicht und



**Abbildung 2.5:** Übersicht der benötigten Systemkomponenten zum Betrieb eines Elektrolyseurs [8].



**Abbildung 2.6:** Übersicht der benötigten Systemkomponenten zum Betrieb einer Brennstoffzelle.

der Baugröße aufweisen. Ein Entwicklungsfeld sind daher Hochfrequenztransformatoren, die ein geringeres Gewicht und einen kleineren Bauraum ermöglichen.

## 3 Modellierung des Wasserstoff-Energiesystems

Im folgende Kapitel wird die Modellierung des Wasserstoff-Energiesystems dokumentiert. Dazu werden Anfangs die Modelle des Elektrolyseurs und der Brennstoffzelle vorgestellt. Weiterhin werden Bewertungskriterien für Konzepte des Wasserstoff-Energiesystems ausgearbeitet und anschließend alternative Systemkonzepte präsentiert. Im letzten Abschnitt werden die für die Simulation der Konzepte gewählten Parameter und Randbedingungen hergeleitet.

### 3.1 Implementierung der Wasserstoffkomponenten in Modelica

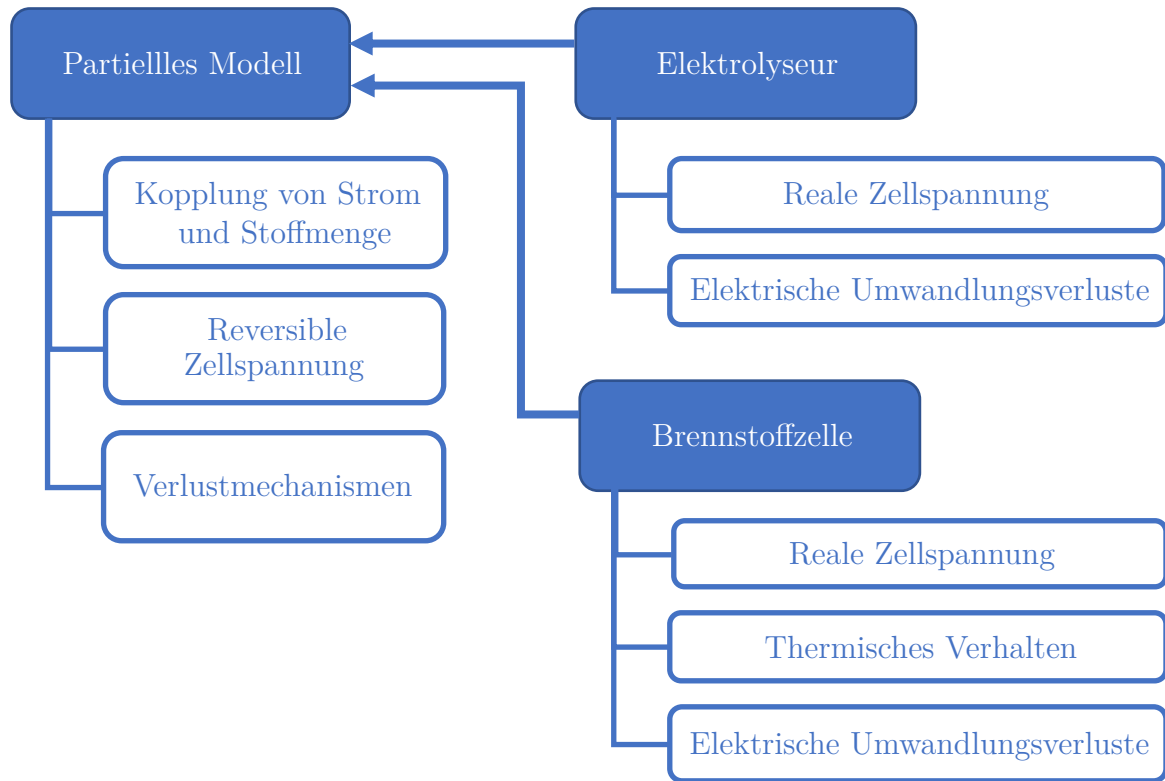
Für die Simulations-gestützte Bewertung der Wasserstoff-Energiesysteme ist ein Modell erforderlich, welches das Verhalten der gesamten Elektrolyseur-Anlage beschreibt. Dazu werden zusätzlich zur Elektrolyse-Zelle die relevanten Systemkomponenten in der Modellierung berücksichtigt. Um die Wiederverwendbarkeit des Modells zu verbessern werden als Eingangsgrößen Kennwerten aus Datenblättern verwendet und wo nötig um Literaturangaben erweitert. Der Fokus liegt dabei auf der Modellierung von alkalischen- und PEM-Zellen, da sie, wie in 2.2.4 sowie 2.2.5, erläutert der aktuelle Standard sind. Es ist ein Detaillierungsgrad angestrebt, der einerseits ein ausreichend genaue Modellierung für die Bewertung der Wasserstoff-Energiesysteme ermöglicht und andererseits zu einer akzeptablen Rechen- und Entwicklungszeit führt. Weiterhin wird der Wärmehaushalt der Brennstoffzelle zur Beschreibung der Kraft-Wärme-Kopplung modelliert.

Nach Schamai [35] ist *Modelica* ideal für die Modellierung von physikalischen Systemen mit Energieaustausch und weiteren zeitkontinuierlichen Vorgängen geeignet. Zu diesen Systemen zählen auch die Wasserstoff-Energiekonzepte, die in dieser Arbeit untersucht werden. *Modelica* ist eine objektorientierte Sprache, mit deren Hilfe Systeme durch gewöhnliche Differentialgleichungen in Kombination mit diskreten Vorfällen beschrieben werden. Das Modell wurde in Modelica 4.0.0 in der Entwicklungsumgebung Dymola 2021x entwickelt.

#### 3.1.1 Modellierung der Elektrolysezelle

In Abbildung 3.2 ist die gewählte Modellarchitektur graphisch dargestellt. Das partielle Modell wird verwendet, da die Beschreibung der idealen Zellspannung und die Approximationen

der Verlustmechanismen für Elektrolyseur und Brennstoffzelle identisch sind.



**Abbildung 3.1:** Architektur des entwickelten Elektrolyseur- und Brennstoffzellen-Modells.

Im partiellen Modell sind daher folgende Zusammenhänge implementiert: Der Zusammenhang von Strom und produzierter Stoffmenge (Gleichung 2.20), die Gleichungen zur Berechnung der idealen Zellspannung (Gleichung 2.7 sowie der Temperatur- und Druckeinfluss) und die Berechnung der Aktivierungsverluste (Gleichung 2.11) und Ohmschen Überspannungen (für PEM-Zellen Gleichung 2.13, sonst 2.12). Über den *Bauart*-Parameter wird im Modell die Technologie der Zelle ausgewählt. Für die drei in 2.2.4 beschriebenen Bauarten sind im Modell verschiedene Werte für die Austauschstromdichte ( $i_0$ ), den Durchtrittsfaktor ( $\alpha$ ), den Elektrodenabstand ( $\delta$ ) und die Leitfähigkeit ( $\sigma$ ) hinterlegt. Abhängig vom *Bauart*-Parameter werden diese zur Berechnung der Verluste genutzt.

Die Modelle für Elektrolyseur und Brennstoffzelle enthalten die Gleichungen zur Berechnung der realen Zellspannung (Gleichung 2.10 beziehungsweise 2.28) sowie die Approximationen der in 2.2.6 erläuterten Umwandlungsverluste. Diese werden im Modell als über den Betriebsbereich konstant angenommen. Das erweist sich unter Beachtung des von Tjarks [8, S. 50] angeführten Verlaufs des Wirkungsgrades eines Gleichrichters insbesondere im oberen

Lastbereich als akzeptable Näherung. Auch auf den von Trubitsyn et al. [36] untersuchten Wechselrichter trifft diese Aussage zu.

Das Brennstoffzellenmodell enthält darüber hinaus die Berechnung der zur Verfügung stehenden Abwärme. Die Anfahrzeit von Elektrolysezellen liegt aus dem Stand-by nach Milanzi et al. [26] bei 10 – 30 s, was im Vergleich zu den für die Simulation verwendeten Zeitschritten (900 s) als vernachlässigbar angenommen wird. Daher werden im Rahmen dieser Arbeit dynamische Vorgänge, die insbesondere durch die Betriebstemperatur der Zelle beeinflusst werden [37], nicht betrachtet.

Zur Modellierung des thermischen Verhaltens wird somit vereinfachend angenommen, dass die Betriebstemperatur stets konstant ist. Daher wird die Energiebilanz aus 2.18 wie folgt vereinfacht:

$$0 = (\dot{n}_{H_2} \cdot c_{p,H_2} + \dot{n}_{Luft} \cdot c_{p,Luft}) \cdot (T_{Umgebung} - T) + I \cdot (U_{tn} - U_{Zelle}) - \dot{Q} \quad (3.1)$$

Der Wärmestrom  $\dot{Q}$  setzt sich aus den Wärmeverlusten  $\dot{Q}_{Verlust}$  und der nutzbaren Abwärme  $\dot{Q}_{Nutz}$  zusammen. Die Wärmeverluste werden über den Wärmeverlustfaktor  $C_{th}$  bestimmt:

$$\dot{Q}_{Verlust} = C_{th} \cdot (T - T_{Umgebung}) \quad (3.2)$$

Die zur Deckung des Heizwärmebedarfs genutzte Abwärme der Brennstoffzelle, wird im Modell in Gaseinsparungen umgerechnet. Angenommen wird dafür, dass der Wirkungsgrad der Gasheizung bei 90 % liegt (Herrmann [38] gibt für Gasheizungen einen Bereich von 80 bis 110 % an).

## 3.2 Entwicklung von Energiesystem-Konzepten

Im folgenden Abschnitt werden anfangs die zur Bewertung der Systemkonzepte genutzten Kriterien erläutert. Zudem werden die betrachteten Konzepte sowie die gewählte Betriebsstrategie erläutert. Weiterhin wird das aktuelle System sowie die betrachteten Erweiterungen beschrieben. Abschließend werden die gewählten Parameter und Randbedingungen angeführt.

### 3.2.1 Identifikation sinnvoller Bewertungskriterien

In Reich and Reppich [39] werden Kriterien zum Vergleich von Energiesystemen angeführt, die eine umfassende Bewertung ermöglichen. Als für ein Unternehmen relevante Kriterien werden in dieser Arbeit Kennwerte zur ökonomische sowie ökologische Bewertung der Konzepte genutzt.

Zur ökonomischen Bewertung wird der Kapitalwert - eine Kennzahl der Dynamischen Investitionsrechnung [40] - als Kriterium verwendet. Fällt der Kapitalwert einer Investition positiv aus, so wird diese als wirtschaftlich sinnvoll bewertet. Der Kapitalwert  $C$  für einen Zeitraum von  $n$  Jahren errechnet sich nach Gleichung 3.3 aus den Anfangsinvestitionen  $I_0$ , den jährlichen Einsparungen  $Z_{ein}$  und Ausgaben  $Z_{aus}$  und dem kalkulatorischen Zinssatz  $r$  [40] (Die jährlichen Einsparungen ergeben sich in dieser Arbeit aus den verminderten Strom- und Gaskosten und der Einspeisevergütung und als Ausgaben werden zusätzliche Wartungskosten gewertet):

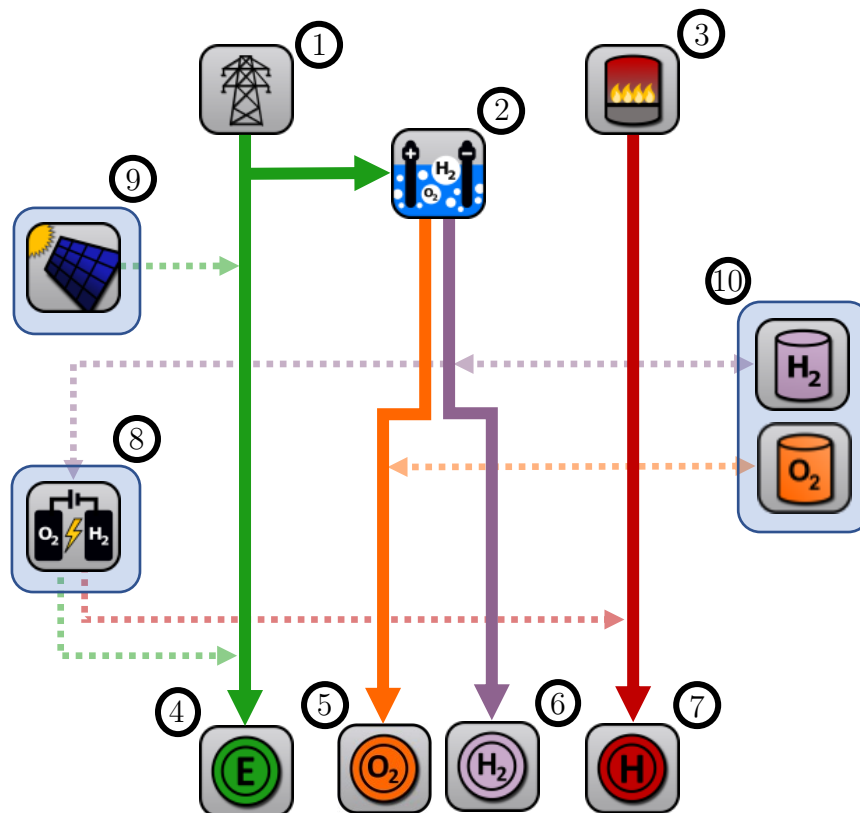
$$C = -I_0 + \frac{(1+r)^n - 1}{(1+r)^n \cdot r} \cdot (Z_{ein} - Z_{aus}) \quad (3.3)$$

Als ökologisches Bewertungskriterium dient in dieser Arbeit der eingesparte  $\text{CO}_2$ -Ausstoß ( $\Delta m_{\text{CO}_2}$ ) nach Gleichung 3.4. Dieser setzt sich einerseits aus den Stromeinsparung  $\Delta P_{el}$  in Verbindung mit dem  $\text{CO}_2$ -Faktor für den Strommix ( $f_{Strom}$ ) und andererseits aus den Gaseinsparungen ( $\Delta Q$ ) und dem  $\text{CO}_2$ -Faktor des Erdgases ( $f_{Gas}$ ) zusammen. Als Stromeinsparungen werden in dieser Arbeit neben dem eingesparten Netzverbrauch auch die Einspeisung gewertet. Die  $\text{CO}_2$ -Faktor geben die Emissionen in  $\text{g}_{\text{CO}_2}/\text{kWh}$  an. Für eine gesamtheitliche Betrachtung werden auch die  $\text{CO}_2$ -Emissionen miteinbezogen, die bei der Produktion der Komponenten entstehen, um die das Wasserstoff-Energiesystem erweitert wird ( $\Delta m_{Prod.}$ ).

$$\Delta m_{\text{CO}_2} = \Delta P_{el} \cdot f_{Strom} + \Delta Q \cdot f_{Gas} - \Delta m_{Prod.} \quad (3.4)$$

### 3.2.2 Systemkonzepte

In Abbildung 3.2 wird das aktuelle Wasserstoff-Energiesystem, sowie die in dieser Arbeit berücksichtigten Systemkonzepte dargestellt. Folgende Anforderungen werden dabei an die Systemkonzepte gestellt: Der Strombedarf(4) und Heizwärmebedarf(6) muss gedeckt werden und die zum Betrieb der Veredelungsanlagen benötigte Menge an Sauerstoff(5) und Wasserstoff(6) muss bereitgestellt werden. Im aktuellen System wird der Strom aus dem Netz(1)



**Abbildung 3.2:** Aktuelles System sowie betrachtete Erweiterungen (1.Netzanschluss 2.Elektrolyseur 3.Gasheizung 4.Strombedarf 5.Wasserstoffbedarf 6.Sauerstoffbedarf 7.Heizwärmebedarf - Erweiterungen: 8.Brennstoffzelle 9.PV-Anlage 10.Gasspeicher).

bezogen, der Wärmebedarf von einer Gasheizung(3) gedeckt und die Prozessgase von einem alkalischen Elektrolyseur(2) produziert.

Als Erweiterung werden 4 Konzepte in Betracht, die in Tabelle 3.1 aufgelistet sind. Bei Konzept 1 wird das bestehende System um eine Brennstoffzelle(8) erweitert, die den Wasserstoffüberschuss zur Kraft-Wärme-Kopplung nutzt. Beim zweiten Konzept wird die Verwendung einer PV-Anlage(9) betrachtet - Konzept 3 enthält sowohl eine PV-Anlage als auch eine Brennstoffzelle. Konzept 4 beinhaltet die Erweiterung mit einer PV-Anlage in Kombination mit einem Gasspeicher(10).

Konzepte 1-3 werden Bedarfs-gesteuert betrieben, was auch der Betriebsstrategie im aktuellen System entspricht. Bei Konzept 4 wird im Falle von Solarstrom-Überschuss eine Einspeicherung in Form von Prozessgasen vorgenommen. Sobald der Solarstrom nicht ausreicht, um die Produktionsstätte samt Elektrolyseur zu versorgen, werden, falls vorhanden, die im Speicher gelagerten Gase den Anlagen zugeführt.

**Tabelle 3.1:** In der Simulationsstudie betrachtete Erweiterungen des Wasserstoff-Energiesystems.

Erweiterungen	
Konzept 1	Brennstoffzelle
Konzept 2	PV-Anlage
Konzept 3	Brennstoffzelle und PV-Anlage
Konzept 4	PV-Anlage und Gasspeicher

### 3.2.3 Parametrierung der Komponenten

Im folgenden Abschnitt werden die gewählten Parameter zur Simulation der Systemkonzepte vorgestellt. Dies beinhaltet einerseits die Parametrierung der Wasserstoffkomponenten als auch der PV-Anlage.

#### Alkalischer Elektrolyseur

Im betrachteten System ist ein alkalischer Elektrolyseur vom Hersteller ErreDue S.p.A. mit der Modellbezeichnung G-32 verbaut. Als voreingestellte Betriebstemperatur ist 60 °C angegeben und der Betriebsdruck liegt standardmäßig bei 4 bar. Für die gesamte Zellfläche liegen keine Angaben vor, daher wird diese anhand der maximal produzierten Stoffmenge und den Literaturangaben zur maximalen Stromdichte von alkalischen Elektrolyseuren abgeschätzt. Die Berechnung dazu ist im Anhang A aufgeführt. Als Elektrolyt dient 20-prozentige Natronlauge, was einer Stoffmengenkonzentration von 6,095 mol/l entspricht [41]. Für den Elektrodenabstand ( $\delta_{alk}$ ), den Durchtrittsfaktor ( $\alpha$ ) und die Austauschstromdichte ( $i_0$ ) werden die von Milewski et al. [21] angegebenen Werte übernommen (s. A). Der Wirkungsgrad des Gleichrichters wird in dieser Arbeit mit 95 % angenommen. Grundlage dafür ist der von Tjarks [8, S. 50] abgebildete Verlauf des Wirkungsgrads eines Gleichrichters über der Leistung. In einem Leistungsbereich von 20 – 100 % liegt der Wirkungsgrad zwischen 94 – 96 %.

**Tabelle 3.2:** Zur Simulation des alkalischen Elektrolyseurs verwendete Parameter.

Betriebstemperatur	$T$	60 °C
Betriebsdruck	$p$	4 bar
Gesamtfläche	$A_{ges}$	10,2 m <sup>2</sup>
Elektrolytkonzentration	$m$	6,095 mol/l
Austauschstromdichte	$i_0$	3,15 A/m <sup>2</sup>
Durchtrittsfaktor	$\alpha$	0,17
Elektrodenabstand	$\delta_{alk}$	0,66 cm
Effizienz des Gleichrichters	$\eta_{GR}$	95 %



### PEM-Brennstoffzelle

Weil PEM-Zellen - wie in 2.2.5 angeführt - die meist verwendete Bauart bei Brennstoffzellen sind, wird diese Bauart für die Systemkonzepte ausgewählt. Für die Betriebstemperatur werden 80 °C angenommen und für den Betriebsdruck wird der Wert des Elektrolyseurs verwendet. Die Zellfläche ist so gewählt, dass die maximal produzierte Stoffmenge des Elektrolyseurs der maximal verwendeten Stoffmenge der Brennstoffzelle gleicht (siehe A). Rashid et al. [30] nennen 100 – 200 µm als übliche Membrandicke, daher ist diese im Modell mit 150 µm abgeschätzt. Die Werte der Parameter  $i_0$ ,  $\alpha$  und  $C_{th}$  sind aus der Arbeit von Webster and Bode [23] entnommen, der Wärmeverlustfaktor  $C_{th}$  wird anhand der Zellfläche skaliert, um den Einfluss der Baugröße auf die Konvektionsfläche zu berücksichtigen (siehe A). Der Wirkungsgrad des Wechselrichters wird auf Grundlage der von Trubitsyn et al. [36] vorgestellten Daten mit 96 % angenommen.

**Tabelle 3.3:** Zur Simulation der PEM-Brennstoffzelle verwendete Parameter.

Betriebstemperatur	$T$	80 °C
Betriebsdruck	$p$	4 bar
Gesamtfläche	$A_{ges}$	2,55 m <sup>2</sup>
Membrandicke	$\delta_{pem}$	150 µm
Austauschstromdichte	$i_0$	$2,16 \times 10^{-4}$ A/m <sup>2</sup>
Durchtrittsfaktor	$\alpha$	0,7353
Elektrischer Widerstand	$R_{ele}$	0,096 Ω/cm <sup>2</sup> [8]
Wärmeverlustfaktor	$C_{th}$	21,939 W/K
Effizienz des Wechselrichters	$\eta_{WR}$	96 %

### PV-Anlage

Als PV-Anlage wird das Modell SE6M60-Series des Herstellers Symphony Energy in der Ausführung SE-M215 verwendet [42]. Ein Simulationsmodell dafür ist in der Aixlib bereits implementiert. Die Peakleistung eines Moduls beträgt 215 W bei einer Fläche von 1,44 m<sup>2</sup>. Auf der verfügbaren Dachfläche des Quarzglasherstellers (537 m<sup>2</sup>) könne somit maximal 372 Module platziert werden. Daraus ergibt sich eine Peakleistung der Anlage von 79,98 kW. Für die Wetterdaten werden Messwerte aus dem Jahr 2020 verwendet. Der Temperaturverlauf ist der Datenbank des Deutschen Wetterdienstes (DWD) entnommen [43] und für die Einstrahlzahlen werden Instituts-eigene Messungen verwendet. Aufgrund fehlender Daten in den Aufzeichnungen des Instituts wurden für die Monate Januar und Februar die von der DWD angegebenen Werte für ein mittleres Testreferenzjahr 2015 verwendet [44].

#### 3.2.4 Randbedingungen

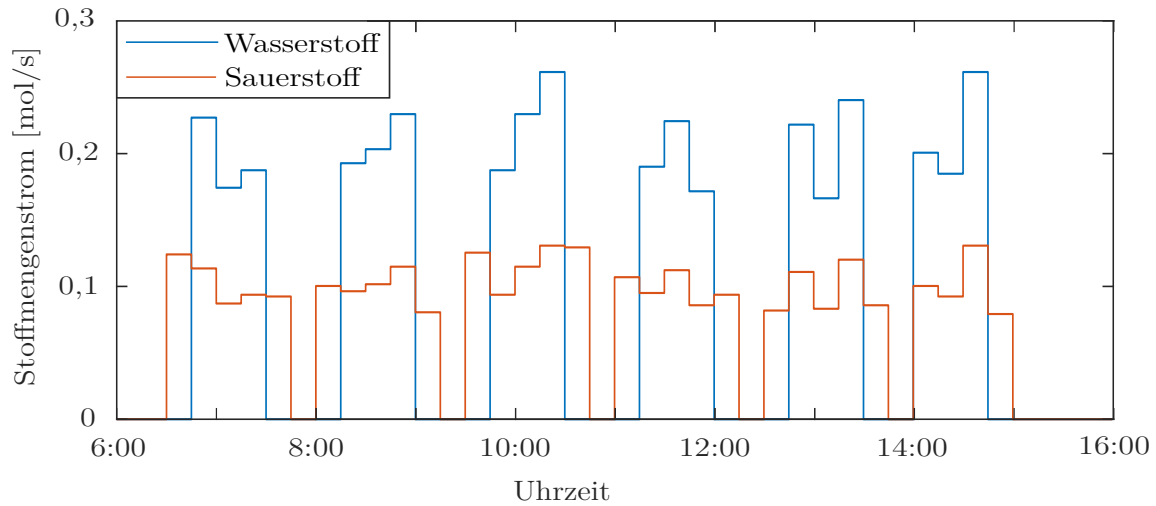
Randbedingungen der Simulationen sind die Bedarfsverläufe von Strom, Heizwärme und Prozessgasen.

Für den Strombedarf wird in der Simulation der gemessene Verbrauch des Quarzglasherstellers im Jahr 2020 verwendet. Weil der Elektrolyseur im Jahr 2020 in den Monaten März bis September nicht im Betrieb war, wird in diesem Zeitraum der simulierte Bedarf des Elektrolyseurs zum gemessenen Stromverbrauch addiert.

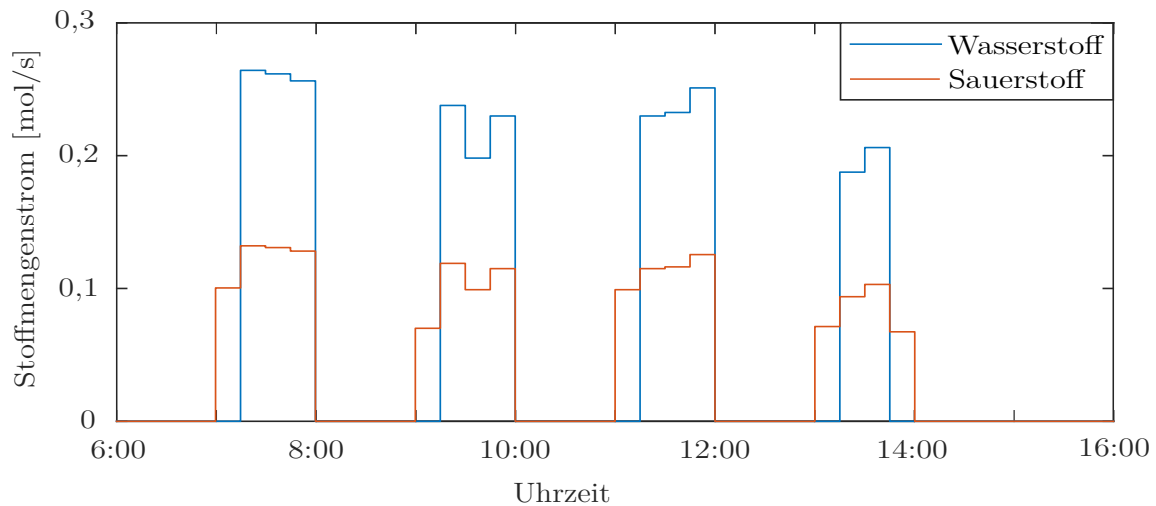
Der Heizwärmebedarf wird aus dem Gasverbrauch des Quarzglasherstellers im Jahr 2020 abgeschätzt. Neben der Gasheizung verbrauchen weitere Anlagen Erdgas. Der Gasbedarf der weiteren Verbraucher wird auf Grundlage der Sommermonate überschlagen, denn für die Monate Juni bis August wird angenommen, dass kein Heizbedarf vorliegt (Ausführlicher beschrieben in B).

Für den Wasserstoff- und Sauerstoffbedarf werden zwei Datensätze genutzt, welche aus den Einkaufsmengen der Gase vor Anschaffung des Elektrolyseurs bestimmt wurden (siehe auch B). Im Datensatz der sich nach den Verbrauchswerten aus 2018 richtet, wird angenommen, dass Werktags für 4 h, 30 min Wasserstoff und für 7 h, 15 min Sauerstoff benötigt wird. Der angenommene Stoffmengenstrom liegt bei durchschnittlich 75 % der Maximalleistung des Elektrolyseurs. Die Daten werden zur Steigerung der Realitätsnähe mit einem Rauschen behaftet, wodurch der Bedarf beim Betrieb zwischen 50 und 100 % schwankt. Es ergibt sich im Vergleich zum realen Jahresverbrauch aus 2018 für den Wasserstoffbedarf eine Abweichung von 1,5 % und für den Sauerstoffbedarf eine Abweichung von 0,2 %. In Abbildung 3.3 ist ein exemplarischer Tagesverlauf des Datensatzes dargestellt.

Bei dem Datensatz für 2019 wird angenommen, dass tägliche für 2 h, 45 min Wasserstoff und für 4 h Sauerstoff benötigt wird. Daraus ergeben sich im Vergleich zum realen Jahresverbrauch von 2019 Abweichungen von 0,7 % beim Sauerstoffbedarf und 0,5 % beim Wasserstoffbedarf. Ein exemplarischer Tagesverlauf des Datensatzes ist in Abbildung 3.4 dargestellt.



**Abbildung 3.3:** An 2018 angelehnter, exemplarischer Verlauf des Wasserstoff- und Sauerstoffbedarfs über einen Arbeitstag.



**Abbildung 3.4:** An 2019 angelehnter, exemplarischer Verlauf des Wasserstoff- und Sauerstoffbedarfs über einen Arbeitstag.



## 4 Simulation der Systemkomponenten und Diskussion der Ergebnisse

Im folgenden Kapitel werden die Simulationsergebnisse vorgestellt. Zur Plausibilisierung der Daten werden die Modelle der Wasserstoffkomponenten im ersten Schritt mit in der Literatur angegebenen Messwerten abgeglichen. Im zweiten Schritt folgt die Präsentation der Simulationsergebnisse samt Berechnung der zur Bewertung herangezogenen Kennwerte. Dabei erfolgt zudem ein Vergleich der Systemkonzepte anhand der Bewertungskriterien.

### 4.1 Validierung der Komponentenmodelle

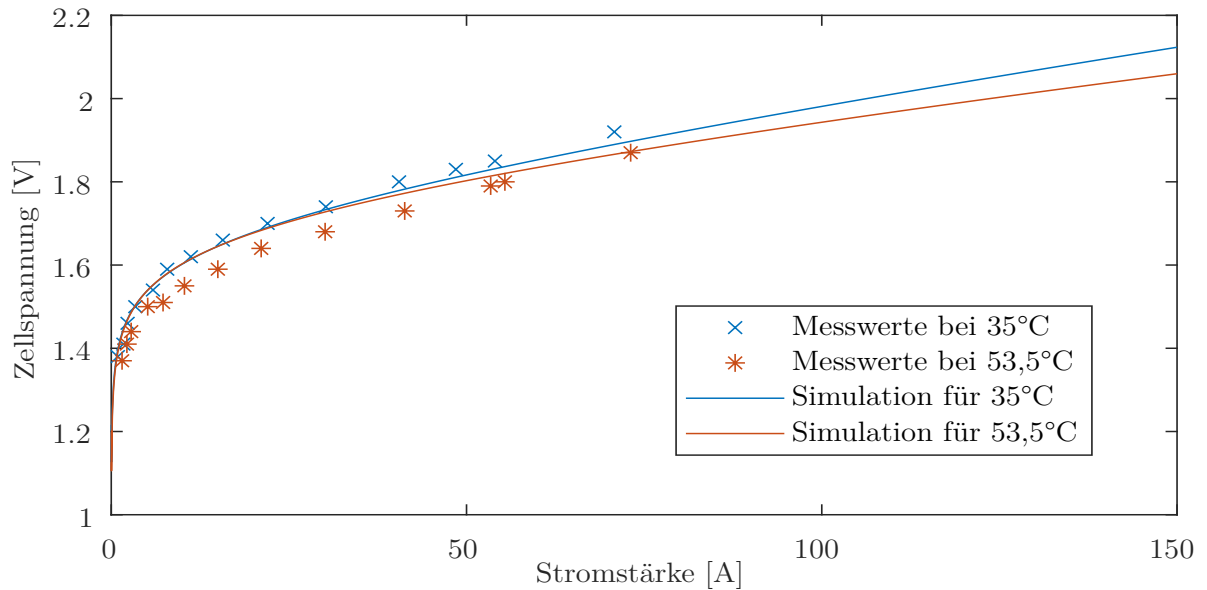
In der folgenden Validierung werden drei Systeme betrachtet: Einerseits ein alkalischer Elektrolyseur und eine PEM-Brennstoffzelle, weil diese beiden Bauarten in den Systemkonzepten genutzt werden. Andererseits ein PEM-Elektrolyseur, da diese Bauart, wie in 2.2.4 angegeben, aufgrund von Vorteilen in der Dynamik der Last und bei der Baugröße aktuell an Relevanz zunehmen.

#### 4.1.1 Komponenten der Systemkonzepte

Zur Validierung des alkalischen Elektrolyseurs werden die von Hammoudi et al. [45] dokumentierten Messwerte genutzt. Betrachtet wird eine Einzelzelle mit einer aktiven Zellfläche von  $0,03 \text{ m}^2$  deren Elektrodenabstand mit 5 mm angenommen wird. Als Elektrolyt dient 30-prozentige Kalilauge (daraus folgt  $m = 6,85 \text{ mol/l}$  [46]). Betrieben wird die Zelle bei einem Druck von 1 bar und es wird eine Temperatur von 30 sowie  $53,5^\circ\text{C}$  betrachtet.

Der von Hammoudi et al. [45] dokumentierte Maximalwert der Stromstärke beträgt 73 A und die minimale Teillast wird, wie in 2.3 angegeben, mit 20 % des Maximalwerts angenommen. Somit kann als minimale Teillast des Elektrolyseurs im realen Betrieb von einer Stromstärke von 14,6 A ausgegangen werden. In diesem Bereich beträgt der Fehler bei einer Temperatur von  $35^\circ\text{C}$  maximal 1,6 %. Für eine Temperatur von  $53,5^\circ\text{C}$  ergibt sich eine maximale Abweichung von 3,5 % (Im Durchschnitt 2,2 %).

Es zeigt sich also, dass das Modell in der Lage ist, die Polarisationskurven alkalischer Elektrolyseure mit hinreichender Genauigkeit zu modellieren. Somit ist es für die Anwendung im Rahmen dieser Arbeit geeignet. Für folgende Arbeiten wird eine Validierung des Modells bei



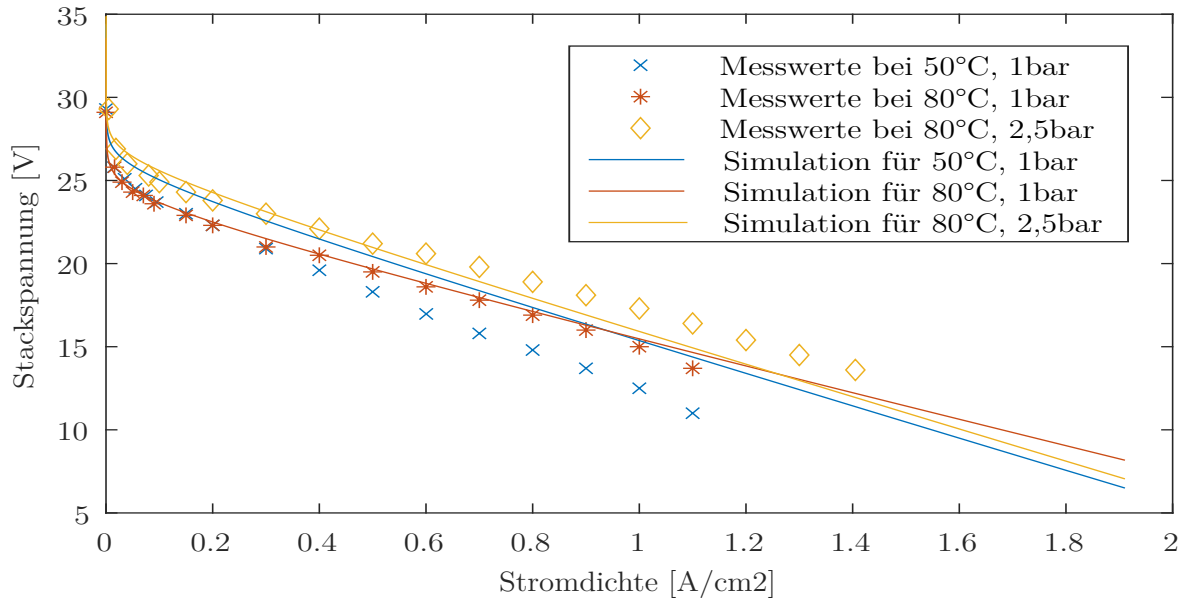
**Abbildung 4.1:** Vergleich des Elektrolyseur-Modells mit Messwerten von Hammoudi et al. [45].

verschiedenen Druckniveaus empfohlen.

Um die Rechenzeit der Simulation gering zu halten wird in dieser Arbeit auf eine Simulation des thermischen Verhaltens der Elektrolysezelle verzichtet, allerdings kann diese bei Bedarf ohne weiteren Entwicklungsaufwand aus dem Brennstoffzellenmodell übernommen werden. Eine weitere Möglichkeit zur Ausweitung des Modells sind dynamische Vorgänge, die in dieser Arbeit aufgrund der großen Zeitschritte der Simulation nicht beachtet wurden (Ausführlichere Begründung in 3.1.1). Um diese zu berücksichtigen, kann die in der Energiebilanz (Gleichung 2.18) enthaltene Instationarität der Zelltemperatur in der Modellierung des thermischen Verhaltens übernommen werden.

Zur Validierung der PEM-Brennstoffzelle werden Messwerte von Chugh et al. [11] genutzt. Es handelt sich um einen Brennstoffzellenstack von 30 in Reihe geschalteten Einzelzellen. Die aktive Zellfläche einer Einzelzelle beträgt  $0,005 \text{ m}^2$  und die Dicke der Membran ist mit  $50,8 \mu\text{m}$  angegeben. Die betrachtete Betriebstemperatur beträgt 50 und  $80^\circ\text{C}$  und der Betriebsdruck bei 1 und  $2,5 \text{ bar}$ .

Chugh et al. [11] dokumentieren einen Stromstärke von bis zu  $1,4 \text{ A/cm}^2$  und die minimale Teillast wird, wie in 2.4 angegeben, für PEM-Zellen mit 10 % des Maximalwerts angenommen. Daraus ergibt sich eine minimale Teillast von  $0,14 \text{ A/cm}^2$  für den realen Betrieb. Oberhalb des genannten Wertes liegt der Fehler bei einer Temperatur von  $50^\circ\text{C}$  und einem Druck von 1 bar



**Abbildung 4.2:** Vergleich des Brennstoffzellen-Modells mit Messwerten von Chugh et al. [11].

zwischen 6,2 und 30,6 %. Für 80 °C und 1 bar ergeben sich Abweichungen von durchschnittlich 2,1 % (Die maximale Abweichung beträgt 7,6 %). Wird der Druck auf 2,5 bar angehoben, steigt der Fehler auf durchschnittlich 5,3 % (Die maximale Abweichung beträgt in dem Fall 11,1 %).

Es zeigt sich somit, dass das Modell die Polarisationskurve von Brennstoffzellen bei hohen Betriebstemperaturen in einem akzeptablen Maß approximiert. Da die zur Simulation der Systemkonzepte eingesetzte Brennstoffzelle bei einer Betriebstemperatur von 80 °C betrieben wird, ist im Bezug auf die Modellierung der Brennstoffzelle von einer ausreichenden Genauigkeit auszugehen.

Die großen Abweichungen bei niedrigen Temperaturen lassen sich durch die Wahl des Durchtrittsfaktors ( $\alpha$ ) und der Austauschstromdichte ( $i_0$ ) begründen. Wie von Falcão and Pinto [14] gezeigt, variieren die in der Literatur angegebenen Werte der beiden Parameter stark. So liegen die Angaben des Durchtrittsfaktors zwischen 2 und 0,5 - die Angaben der Austauschstromdichte schwanken von  $10^{-3}$  bis  $10^{-9}$  A/cm<sup>2</sup>. Dabei werden teilweise getrennte Werte für Anode und Kathode angegeben, was aber auf die Größenordnung des Wertebereichs keinen Einfluss nimmt (Die angegebenen Wertebereiche beziehen sich auf die Anode, da dort höhere Verluste auftreten).

Es wird ersichtlich, dass die experimentell ermittelten Parameter einerseits von dem Aufbau des Modells abhängen, denn die Fitting-Parameter werden sowohl durch die Modellierung der anderen Verluste als auch durch im Modell nicht berücksichtigte weitere Faktoren beein-

flusst. Andererseits spielt der Versuchsaufbau und die untersuchte Zelle eine gewichtige Rolle, da beispielsweise die Betriebstemperatur, der Betriebsdruck oder Materialeigenschaften die resultierenden Fitting-Parameter beeinflussen. Einige Autoren nutzten daher Approximationen, um einen Temperatureinfluss auf den Durchtrittsfaktor oder die Austauschstromdichte im Modell zu berücksichtigen [14, 21]. Für die Modellierung von PEM-Zellen verspricht dies eine Steigerung der Genauigkeit bei niedrigen Temperaturen. Ob diese Maßnahme die Genauigkeit der Modellierung von alkalischen Zellen erhöht ist unklar, da die Validierungsergebnisse des alkalischen Elektrolyseurs keine signifikante Steigerung der Abweichungen bei zu- oder abnehmenden Temperaturen dokumentieren.

Eine weitere Möglichkeit zur Steigerung der Genauigkeit bei der Modellierung der Brennstoffzelle könnte die Beachtung der Konzentrationsüberspannungen sein. Denn diese treten insbesondere im oberen Lastbereich auf, und in diesem sind bei der Validierung zunehmende Abweichungen zu erkennen.

Die Validierung der Systemkomponenten ist somit im Hinblick auf die Genauigkeit der Simulationsergebnisse insgesamt als positiv zu bewerten: Die Elektrolysezelle wird über den abgebildeten Bereich zufriedenstellend modelliert. In dem für die Simulation relevanten Betriebspunkt trifft dies auch auf die Modellierung der PEM-Brennstoffzelle zu. Somit sind die in 4.2 präsentierten Simulationsergebnisse zur vorläufigen Bewertung der Systemkonzepte geeignet. In Zukunft sollte darüber hinaus eine Validierung der Modellierung des thermischen Verhaltens erfolgen.

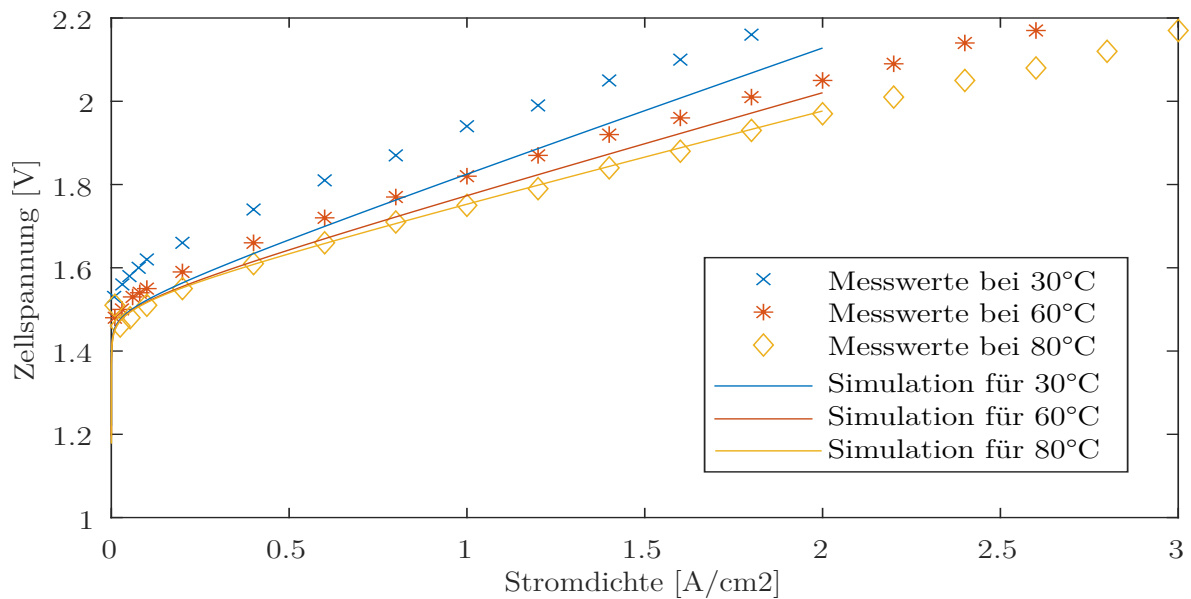
### 4.1.2 PEM-Elektrolyseur

Die Daten zur Validierung der PEM-Elektrolysezelle sind Tjarks [8, S. 36] entnommen. Betrachtet wird eine Einzelzelle mit einer aktiven Zellfläche von  $0,0025\text{ m}^2$  deren Membran mit einer Dicke von  $150\text{ }\mu\text{m}$  abgeschätzt wird (vergleiche Rashid et al. [30]). Es werden Betriebstemperaturen von  $30$ ,  $60$  und  $80\text{ }^\circ\text{C}$  bei einem Druck von  $1\text{ bar}$  untersucht.

Die folgenden Angaben beziehen sich auf Stromdichten oberhalb von  $0,2\text{ A/cm}^2$ , da die minimale Teillast nach Tabelle 2.4 für PEM-Zellen mit  $10\%$  der Maximalen Stromdichte angenommen wird. Bei einer Temperatur von  $30\text{ }^\circ\text{C}$  ergeben sich Abweichungen von  $22,3\%$  bei der minimalen Teillast und  $4,4\%$  bei Maximallast. Für eine Temperatur von  $60\text{ }^\circ\text{C}$  liegt der Fehler über den gesamten Leistungsbereich unter  $2,9\%$ , für  $80\text{ }^\circ\text{C}$  unterhalb von  $0,5\%$ .

Es zeigt sich somit auch für den PEM-Elektrolyseur, dass das Modell im oberen Temperaturbereich in der Lage ist, die Polarisationskurve ausreichend genau abzubilden. Wie auch bei





**Abbildung 4.3:** Vergleich des Elektrolyseur-Modells mit Messwerten von Tjarks [8].

der PEM-Brennstoffzelle liegen bei niedrigen Temperaturen signifikante Abweichungen zu den Messwerten vor. Im Gegensatz zur Brennstoffzelle nehmen diese aber nicht bei hohen, sondern bei niedrigen Lasten zu. Außerdem zeigt ein Vergleich der Messwerte des PEM-Elektrolyseurs und der PEM-Brennstoffzelle, dass sich der Temperatureinfluss auf die Zellspannung in den beiden Fällen deutlich unterscheidet:

Im Falle der Brennstoffzelle (Abbildung 4.2) zeigt sich eine gesteigerte Temperatur erst im oberen Lastbereich, wohingegen sich die Zellspannung bei 0,2 bis 0,3 A/cm² trotz einer Temperaturdifferenz von 30 °C nicht signifikant unterscheidet.

Im Falle des Elektrolyseurs (Abbildung 4.3) ist schon im unteren Lastbereich ein signifikanter Unterschied der Zellspannung für die abgebildeten Temperaturen sichtbar, der mit zunehmender Stromdichte linear ansteigt.

Daraus lässt sich schlussfolgern, dass für den gewählten Elektrolyseur und die Brennstoffzelle eine einheitliche Parametrierung insbesondere über einen größeren Temperaturbereich keine zufriedenstellenden Ergebnisse liefern kann. Ob diese Beobachtung allgemein auf den Vergleich von Elektrolyseuren und Brennstoffzellen anzuwenden ist, bleibt allerdings unklar. In folgenden Arbeiten sollte daher untersucht werden, ob weitere Messreihen den unterschiedlichen Temperatureinfluss auf die Polarisationskurven bestätigen. Dies würde im Modell gegebenenfalls eine getrennte Parametrierung von Brennstoffzellen und Elektrolyseuren erfordern.

### 4.2 Ergebnisse der Simulationen der Systemkonzepte

Die Simulationen wurden mit Zeitschritten von 900 s (= 15 min) durchgeführt. Es wurde der Dymola-Standard-Löser *Dassl* mit einer Toleranz von  $10^{-4}$  verwendet. Als Ergebnisse der Simulation sind drei Kennwerte von Bedeutung: Der jährliche Strombedarf, die Stromeinsparungen und die Gaseinsparungen. Im folgenden werden die Kennwerte des aktuellen Systems sowie der entwickelten Systemkonzepte präsentiert. Die Stromeinsparungen sind in Abbildung 4.4 graphisch wiedergegeben, in Tabelle 4.1 sind die Kennwerte für die 4 Konzepte aufgelistet. Für eine genauere Evaluierung der Konzepte sollten in Zukunft Simulationen mit Messreihen des Prozessgasverbrauchs durchgeführt werden, da der benötigte Stoffmengestrom einen großen Einfluss auf die Effizienz des Elektrolyseurs und der Brennstoffzelle hat und die Ergebnisse somit maßgeblich beeinflusst.

Für das aktuelle System wird ein Jahres-Strombedarf von 959,3 MWh für den an 2018 angelehnten Prozessgasbedarf prognostiziert, mit den Daten für 2019 ergibt sich ein Strombedarf von 915,173 MWh.

#### Konzept 1

Die Verwendung einer Brennstoffzelle zur Nutzung des Wasserstoffüberschusses führt zu Stromeinsparungen von 12,9 beziehungsweise 5,9 MWh pro Jahr im Vergleich zum aktuellen System. Bei alleiniger Verwendung der Brennstoffzelle wird kein Strom ins Netz eingespeist. Dies entspricht den Erwartungen, weil die Ausgangsleistung der Brennstoffzelle aufgrund der Umwandlungsverluste stets kleiner als die Eingangsleistung des Elektrolyseurs ist. Die Gaseinsparungen betragen 14,1 MWh für den Prozessgasverbrauch nach den 2018er Daten, für die 2019er Daten ergeben sich 6,6 MWh.

#### Konzept 2

Bei Installation einer PV-Anlage ergeben sich Stromeinsparungen von 66,3 MWh für beide Verläufe des Prozessgasbedarfs. Die berechnete Einspeisung bei Verwendung einer PV-Anlage beträgt unabhängig vom sonstigen Systemaufbau und dem Prozessgasverbrauch 4,3 MWh. Dies lässt darauf schließen, dass die Stromeinspeisung außerhalb der Arbeitszeit, also beispielsweise in den Abendstunden oder am Wochenende, auftritt.

#### Konzept 3

Wird das System um eine PV-Anlage und eine Brennstoffzelle erweitert ergeben sich jährliche Stromeinsparungen von 84,7 beziehungsweise 75,0 MWh. Die Gaseinsparungen liegen bei 13 beziehungsweise 6,5 MWh.

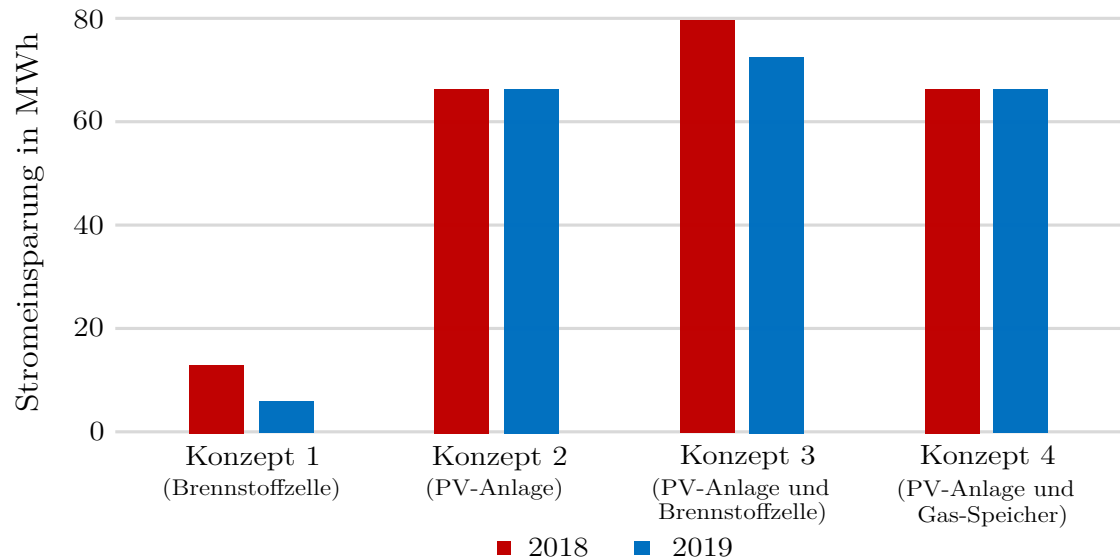
Ein Vergleich der Konzepte 1 bis 3 zeigt, dass sich die PV-Anlage und die Brennstoffzelle nicht gegenseitig beeinflussen: Die Abweichungen einer Berechnung der Endwerte von Konzept 3 als Addition von Konzept 1 und 2 liegen im Verhältnis zu den Simulationsergebnissen für die Stromeinsparungen unter 0,6 % und für die Gaseinsparung unter 1,4 % (Eine Erklärung für die Abweichungen ist die gewählte Toleranz der Simulation). Dieses Verhalten liegt darin begründet, dass die maximale elektrische Leistung der Brennstoffzelle (24,475 kW) und der PV-Anlage (79,980 kW) in Summe kleiner ist als der Strombedarf während der Arbeitszeit (über 200 kW). Somit kommt es während beide Komponenten im Betrieb sind zu keinem Zeitpunkt zu einem Überangebot von erzeugtem Strom, welches ins Netz eingespeist wird. Aus diesem Grund führt die Verwendung beider Komponenten im Vergleich zur Einzel-Betrachtung nicht zu einer Steigerung der Einspeisung oder einer Verminderung der Einsparungen beim Strombedarf.

### **Konzept 4**

Die Simulationsergebnisse bei einer Verwendung einer PV-Anlage in Kombination mit einem Gasspeicher weisen keine signifikanten Unterschiede zu den Ergebnissen ohne Gasspeicher auf. Aus den Simulationsergebnissen geht hervor, dass der Speicher bei der gewählten Betriebsstrategie stets mit weniger als  $10^{-14}$  kg befüllt ist und keine Senkung der Stromeinspeisung ins Netz zu verzeichnen ist. Wie bereits festgestellt besteht der Überschuss von PV-Strom außerhalb der Betriebszeiten. Aus der geringen Beladung des Speichers lässt sich daher schließen, dass die überschüssige Leistung stets geringer ist als die benötigte Leistung bei der minimalen Teillast des Elektrolyseurs und daher keine Einspeicherung des Stromüberschusses in Form von Prozessgasen möglich ist.

Somit bringt die Verwendung des Gasspeichers im Energiesystem keinen Nutzen und findet bei der Berechnung der Kapitalwerte und der CO<sub>2</sub>-Emissionen keine Berücksichtigung.

Eine alternative Betriebsstrategie bei Wasserstoffsystemen mit Gasspeichern ist nach Bocklisch [47] die Nutzung des Gasspeichern als Puffer zur Verminderung der dynamischen Beanspruchung des Elektrolyseurs. Als Vorteil gibt er einerseits eine Effizienzsteigerung an, weil im dynamischen Betrieb zusätzliche Verluste auftreten. Andererseits führt er an, dass dynamische Beanspruchung zur Degradation der Zelleistung beiträgt und die Lebensdauer der Zelle senkt.



**Abbildung 4.4:** Vergleich der Simulationsergebnisse für den Jahresstromverbrauch des aktuellen Systems und der Konzepte samt Angabe der Stromeinsparungen im Vergleich zum aktuellen System.

**Tabelle 4.1:** Vergleich der Stromeinsparungen, Einspeisung und Gaseinsparung der Systemkonzepte (Im erste Block sind die Daten für die Bedarfsverläufe aus 2018 und im zweite die Daten für die Bedarfsverläufe aus 2019 angegeben).

	Stromeinsparungen in MWh	Einspeisung in MWh	Gaseinsparung in MWh
Konzept 1	12,857	-	14,083
Konzept 2	66,296	4,313	-
Konzept 3	79,637	4,313	14,032
Konzept 4	66,296	4,313	-
Konzept 1	5,858	-	6,620
Konzept 2	66,295	4,313	-
Konzept 3	72,489	4,313	6,526
Konzept 4	66,295	4,313	-

**Kapitalwerte der Systemkonzepte**

Die Kapitalwerte werden mithilfe der in C angegebenen Parameter berechnet. In Abbildung 4.5 werden die Kapitalwerte der Systemkonzepte graphisch gegenübergestellt, in Tabelle 4.2 sind die Investitionen sowie jährliche Einnahmen und Ausgaben angegeben.

Für die Investition in eine Brennstoffzelle ergibt sich ein Kapitalwert von 5.847 € für den an 2018 angelehnten Prozessgasbedarf, mit den Daten für 2019 ergibt sich ein Kapitalwert von –15.338 €. Die Investition ist somit anhand des Kapitalwerts als tendenziell negativ zu bewerten. Um die Aussagekraft der Bewertung zu erhöhen, ist es sinnvoll, die Wahrscheinlichkeiten der beiden simulierten Szenarien abzuschätzen und dies in die Bewertung mit einfließen zu lassen. Für den Fall, dass in Zukunft mit steigendem Wasserstoffüberschuss zu rechnen ist, könnte sich die Investition in eine Brennstoffzelle als wirtschaftlich sinnvoll herausstellen.

Einen verbesserten Ansatz könnte die Installation einer Brennstoffzelle mit einer kleineren Zellfläche in Kombination mit einem Wasserstoffspeicher darstellen. Dadurch kann bei einer nahezu gleichbleibenden Stromeinsparung eine deutliche Verminderung der Investitionen erreicht werden, was durch eine überschlägige Berechnung verdeutlicht werden soll:

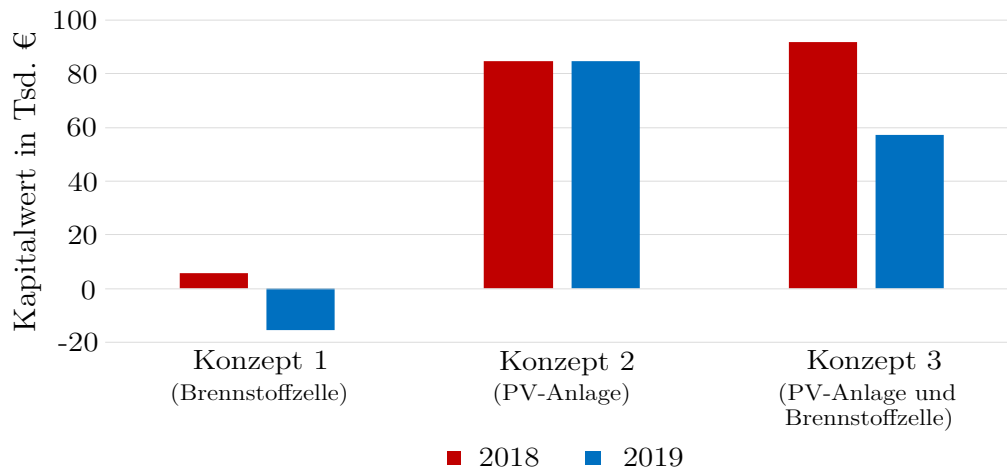
Bei den betrachteten Verläufen des Prozessgasbedarfs beträgt der maximal denkbare Überschuss an Wasserstoff ungefähr 5,3 kg (In maximal 2 h, 45 min pro Tag wird überschüssiger Wasserstoff produziert und der maximale Stoffmengenstrom beträgt 0,2643 mol/s). Wird die Umwandlung des Wasserstoffs nicht zeitgleich, sondern über den Tag verteilt vollzogen, reichen  $\frac{2\text{ h}, 45\text{ min}}{24\text{ h}} = 11,5\%$  der im aktuellen Konzept veranschlagten Maximalleistung aus, um den Wasserstoffüberschuss vollständig zu nutzen. Dadurch sinkt die Investition der Brennstoffzelle auf 5.250 € (siehe C). Investitionen in einen Wasserstoffspeicher können, wie in C angegeben, mit 594 €/kg<sub>H<sub>2</sub></sub> abgeschätzt werden. Somit ergeben sich Gesamt-Investitionen von 8,400 €, was einem Viertel der Investitionen des simulierten Brennstoffzellen-Konzepts entspricht. Da durch den zusätzlichen Betrieb des Speichers mit steigenden Betriebskosten und zusätzlichem Stromverbrauch zu rechnen ist, soll an dieser Stelle auf eine Berechnung des Kapitalwerts verzichtet werden. Allerdings zeigt die Abschätzung, dass durch die Kombination mit einem Gasspeicher mit einer deutliche Verbesserung hinsichtlich des Kapitalwerts zu rechnen ist.

Die Investition in eine PV-Anlage ergibt unabhängig vom verwendeten Bedarfsverlauf einen Kapitalwert von 84.726 €. Die Bewertung der Wirtschaftlichkeit der Investition anhand des Kapitalwerts fällt also positiv aus.

Dies trifft auch auf die Kombination aus PV-Anlage und Brennstoffzelle zu, für die sich

Kapitalwerte von 91.824 € und 70.220 € ergeben. Es ist aber zu beachten, dass verglichen mit Konzept 2 die Mehrinvestition in eine Brennstoffzelle gemessen am Kapitalwert keinen deutlichen Mehrwert mit sich bringt. So erhöht sich der Kapitalwert für das Szenario 2018 bezogen auf die gesteigerten Investitionen nur unwesentlich und im Szenario 2019 sinkt der Kapitalwert durch die Mehrinvestition in eine Brennstoffzelle.

Zusammenfassend lässt sich daher sagen, dass nach Aussage des Kapitalwerts die Investition in eine PV-Anlage lohnenswert ist. Die ökonomische Bewertung der Brennstoffzelle hängt von dem prognostizierten Prozessgasverbrauch ab, fällt aber tendenziell negativ aus. Optimierungen des Brennstoffzellen-Konzepts versprechen aber deutliche Verbesserungen im Hinblick auf die ökonomische Bewertung.



**Abbildung 4.5:** Kapitalwerte der Systemkonzepte.

**Tabelle 4.2:** Kapitalwerte der Konzepte sowie Kosten, die in die Berechnung einfließen (Im erste Block sind die Daten für die Bedarfsverläufe aus 2018 und im zweite die Daten für die Bedarfsverläufe aus 2019 angegeben).

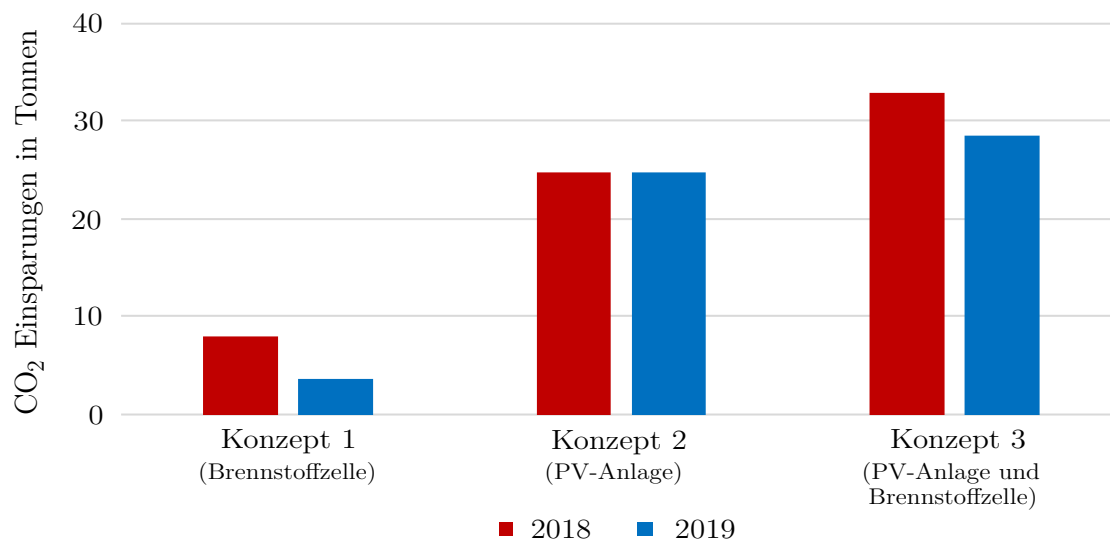
	Investitionen in € $I_0$	Einnahmen in € $Z_{ein}$	Ausgaben in € $Z_{aus}$	Kapitalwert in € $C$
Konzept 1	33.286	3.550,63	259,71	5.846,72
Konzept 2	80.352	15.087,43	1.205,00	84.725,62
Konzept 3	113.638	18.743,31	1.464,71	91.823,88
Konzept 1	33.286	1.627,71	118,33	-15.337,78
Konzept 2	80.352	15.087,43	1.205,00	84.725,62
Konzept 3	113.638	16.785,12	1.323,33	70.219,98

### CO<sub>2</sub>-Einsparungen der Systemkonzepte

Die benötigten Parameter zur Berechnung der CO<sub>2</sub>-Einsparungen sowie ihre Herleitung sind in D aufgelistet. In Abbildung 4.6 werden die Einsparungen graphisch gegenübergestellt, die Bestandteile der Berechnung sind in Tabelle 4.3 aufgelistet.

Für die Verwendung einer Brennstoffzelle ergeben sich CO<sub>2</sub>-Einsparungen von 8,0 t für den an 2018 angelehnten Prozessgasbedarf, mit den Daten von 2019 werden 3,6 t CO<sub>2</sub> eingespart. Die Verwendung einer PV-Anlage im Energiesystem führt zu CO<sub>2</sub>-Einsparungen von 24,8 t, bei einer Kombination von PV-Anlage und Brennstoffzelle liegen die CO<sub>2</sub>-Einsparungen bei 32,9 t beziehungsweise bei 28,5 t.

Alle drei Systemkonzepte versprechen somit eine Senkung der jährlichen CO<sub>2</sub>-Emissionen. Die Einsparungen bei Verwendung der PV-Anlage sind dabei je nach Szenario 310 % beziehungsweise 680 % höher als die Einsparungen bei Verwendung einer Brennstoffzelle.



**Abbildung 4.6:** CO<sub>2</sub>-Einsparungen der Systemkonzepte.

**Tabelle 4.3:** CO<sub>2</sub>-Einsparungen der Systemkonzepte sowie Einsparungen elektrischer Energie, Gaseinsparungen und bei der Produktion der Komponenten entstehende CO<sub>2</sub>-Emissionen (Im erste Block sind die Daten für die Bedarfsverläufe aus 2018 und im zweite die Daten für die Bedarfsverläufe aus 2019 angegeben).

Formelzeichen	Eisp. el. Energie in MWh $\Delta P_{el}$	Gaseinsp. in MWh $\Delta Q$	CO <sub>2</sub> -Em. der Prod. in Tonnen $\Delta m_{Prod.}$	CO <sub>2</sub> -Einsp. in Tonnen $\Delta m_{CO_2}$
Konzept 1	12,957	14,083	0,038	7,992
Konzept 2	70,609	-	3,530	24,784
Konzept 3	83,950	14,032	3,568	32,919
Konzept 1	5,858	6,620	0,756	3,643
Konzept 2	70,609	-	3,530	24,784
Konzept 3	76,802	6,526	3,568	28,542



## 5 Fazit und Ausblick

In der vorliegenden Arbeit wird das Wasserstoff-Energiesystem eines Quarzglasherstellers betrachtet, um Konzepte zur effizienteren Gestaltung des Systems zu identifizieren:

Im ersten Schritt wird ein physikalisches Modell für Elektrolyseure und Brennstoffzellen in Modelica entwickelt. Das Modell wird anhand von Kennwerten aus Datenblättern parametrisiert und ist darüber hinaus in der Lage, Zellen verschiedener Technologien zu modellieren. Aus der Validierung der Modelle geht hervor, dass sie für die im Rahmen dieser Arbeit angestrebte Untersuchungen ausreichend genaue Ergebnisse liefern: Bei der für die Simulation gewählten Betriebstemperatur liegen die Abweichungen der Polarisationskurve des alkalischen Elektrolyseurs bei unter 3,5 %, für die PEM-Brennstoffzelle ergeben sich Abweichungen von durchschnittlich 5,3 %. Für einen PEM-Elektrolyseur werden Abweichungen von unter 0,5 % zu Messwerten aus der Literatur verzeichnet. Bei den beiden PEM-Zellen nimmt die Genauigkeit des Modells unterhalb der gewählten Betriebstemperatur stark ab.

Als Erweiterungen des Wasserstoff-Energiesystems des Quarzglasherstellers werden folgende Komponenten betrachtet: Eine Brennstoffzelle zur Nutzung des Wasserstoffüberschusses durch Kraft-Wärme-Kopplung, eine PV-Anlage und ein Gasspeichers zum Einspeichern von Solarstrom-Überschuss. Zur Bewertung der Systemkonzepte werden der Kapitalwert und die CO<sub>2</sub>-Einsparungen berechnet.

Die ökonomische Bewertung der Brennstoffzelle fällt tendenziell negativ aus: Abhängig vom prognostizierten Prozessgasbedarf liegt der Kapitalwert zwischen -15.388 und 5.847 €. Aus ökologischer Sicht stellt die Installation der Brennstoffzelle eine Verbesserung dar - es ergeben sich CO<sub>2</sub>-Einsparungen von 3,6 bis 8 t. Die Optimierung des Brennstoffzellen-Konzepts verspricht eine verbesserte ökonomische Bewertung bei nahezu gleichbleibenden CO<sub>2</sub>-Emissionen. Die PV-Anlage wird als sinnvoll Investition gewertet, da der Kapitalwert mit 84.726 € klar positiv ausfällt (Der Kapitalwert übersteigt dabei die Anfangsinvestitionen). Auch aus ökologischer Sicht wird die PV-Anlage verglichen mit der Brennstoffzelle positiver eingestuft: Die simulierten CO<sub>2</sub>-Einsparungen sind mit 24,8 t um den Faktor 3 bis 6 höher.

Im Bezug auf die Modellierung der Wasserstoffkomponenten ergeben sich aus dieser Arbeit

für die Zukunft folgende Arbeitsschritte:

- Um dynamische Vorgänge in dem Modell zu implementieren, kann die Instationarität der Zelltemperatur in der Energiebilanz (Gleichung 2.18) berücksichtigt werden. Darüber hinaus ist es sinnvoll, die Modellierung des thermischen Verhaltens der Brennstoffzelle auch in das Elektrolyseur-Modell zu implementieren.
- Eine Modellierung des Temperatureinflusses auf die Durchtrittsfaktor oder die Austauschstromdichte verspricht eine höhere Genauigkeit des Modells für PEM-Zellen bei niedrigen Temperaturen. Weiterhin bleibt zu untersuchen, ob für Elektrolyseure und Brennstoffzellen gleicher Bauart die Werte der Fitting-Parameter unverändert bleiben. Gegebenenfalls sollte das Modell um eine getrennte Parametrierung von Brennstoffzellen und Elektrolyseuren erweitert werden.
- Die Modellierung von Konzentrationsüberspannungen ist zur Verminderung der Abweichungen des Brennstoffzellen-Modells im oberen Lastbereich eine sinnvolle Erweiterung.
- Für folgende Arbeiten wird eine Validierung des Modells bei verschiedenen Druckniveaus empfohlen. Darüber hinaus sollte eine Validierung der Modellierung des thermischen Verhaltens der Brennstoffzelle erfolgen.

Im Hinblick auf die Identifikation sinnvoller Konzepte des Wasserstoff-Energiesystems des Quarzglasherstellers sind in Zukunft folgende Schritte von Bedeutung:

- Aufbauend auf den Simulationsergebnissen dieser Arbeit sollte eine genauere Evaluierung der als sinnvoll bewerteten Systemkonzepte erfolgen. Insbesondere Simulationen mit realen Messreihen des Prozessgasbedarfs steigern dabei die Aussagekraft der Ergebnisse.
- Eine Optimierung des Brennstoffzellen-Konzepts durch die Erweiterung um einen Wasserstoffspeicher verspricht aus ökonomischer Sicht deutliche Verbesserungen. Daher ist in folgenden Arbeiten eine optimierte Auslegung des Brennstoffzellen-Konzepts sowie eine Bewertung desselben auf der Grundlage einer Simulationsstudie durchzuführen.

## Literaturverzeichnis

- [1] Bundesregierung Deutschland. Klimaschutzgesetz: Klimaneutralität bis 2045. URL <https://www.bundesregierung.de/breg-de/themen/klimaschutz/klimaschutzgesetz-2021-1913672>.
- [2] Bundesministerium für Wirtschaft und Energie. Treibhausgasemissionen in Deutschland nach Sektoren. URL <https://www.bmwi.de/Redaktion/DE/Infografiken/Industrie/treibhausgasemissionen-deutschland-nach-sektoren.html>.
- [3] Peter Tabeling. *Softwaresysteme und ihre Modellierung: Grundlagen, Methoden und Techniken*. Springer-Verlag, January 2006. ISBN 978-3-540-29276-0. Google-Books-ID: t4ouBAAAQBAJ.
- [4] Jonas Sjöberg, Qinghua Zhang, Lennart Ljung, Albert Benveniste, Bernard Deylon, Pierre-Yves Glorennec, Håkan Hjalmarsson, and Anatoli Juditsky. *Nonlinear Black-Box Modeling in System Identification: a Unified Overview*. Linköping University, 1995. URL <http://urn.kb.se/resolve?urn=urn:nbn:se:liu:diva-55254>.
- [5] Jan Hauth. Grey-Box Modelling for Nonlinear Systems. 2008. URL <https://kluedo.ub.uni-kl.de/frontdoor/index/index/docId/2045>.
- [6] Øystein Ulleberg. Modeling of advanced alkaline electrolyzers: a system simulation approach. *International Journal of Hydrogen Energy*, 28(1):21–33, January 2003. ISSN 0360-3199. doi: 10/b8s496. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0360319902000332>.
- [7] Ernesto Amores, Jesús Rodríguez, and Christian Carreras. Influence of operation parameters in the modeling of alkaline water electrolyzers for hydrogen production. *International Journal of Hydrogen Energy*, 39(25):13063–13078, August 2014. ISSN 0360-3199. doi: 10/f6gzzj. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0360319914019120>.
- [8] Geert Hauke Tjarks. *PEM-Elektrolyse-Systeme zur Anwendung in Power-to-Gas Anlagen*, volume RWTH Aachen University. RWTH Aachen University, 2017. doi: 10.18154/RWTH-2017-04470. URL <http://publications.rwth-aachen.de/record/689617>. Artwork Size: pages IV, 135 Seiten : Illustrationen, Diagramme ISSN: 1866-1793 Pages: pages IV, 135 Seiten : Illustrationen, Diagramme Publication Title: Dissertation.

- [9] Jesús Rodríguez and Ernesto Amores. CFD Modeling and Experimental Validation of an Alkaline Water Electrolysis Cell for Hydrogen Production. *Processes*, 8(12):1634, December 2020. doi: 10/gjnkf8. URL <https://www.mdpi.com/2227-9717/8/12/1634>. Number: 12 Publisher: Multidisciplinary Digital Publishing Institute.
- [10] Souleman Njoya Motapon, Olivier Tremblay, and Louis A. Dessaint. Development of a generic fuel cell model: application to a fuel cell vehicle simulation. *International Journal of Power Electronics*, 4(6):505, 2012. ISSN 1756-638X, 1756-6398. doi: 10/gj3fcx. URL <http://www.inderscience.com/link.php?id=52427>.
- [11] Sachin Chugh, Chinmay Chaudhari, Kapil Sonkar, Alok Sharma, G.S. Kapur, and S.S.V. Ramakumar. Experimental and modelling studies of low temperature PEMFC performance. *International Journal of Hydrogen Energy*, 45(15):8866–8874, March 2020. ISSN 03603199. doi: 10/gjnx37. URL <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S036031992030077X>.
- [12] Antonio J. Barragan, Juan M. Enrique, Francisca Segura, and Jose M. Andujar. Iterative Fuzzy Modeling of Hydrogen Fuel Cells by the Extended Kalman Filter. *IEEE Access*, 8:180280–180294, 2020. ISSN 2169-3536. doi: 10/gjnk8h. URL <https://ieeexplore.ieee.org/document/9154375/>.
- [13] K. Jiao and M. Ni. Challenges and opportunities in modelling of proton exchange membrane fuel cells (PEMFC). *International Journal of Energy Research*, 41(13):1793–1797, October 2017. ISSN 0363907X. doi: 10/gjnx9v. URL <http://doi.wiley.com/10.1002/er.3798>.
- [14] D. S. Falcão and AMFR Pinto. A review on PEM electrolyzer modelling: Guidelines for beginners. *Journal of Cleaner Production*, 261:121184, 2020. doi: 10/gg47r5. Publisher: Elsevier.
- [15] Jörn Brauns and Thomas Turek. Alkaline water electrolysis powered by renewable energy: A review. *Processes*, 8(2):248, 2020. doi: 10/gjh7mg. Publisher: Multidisciplinary Digital Publishing Institute.
- [16] Matthias Koj. Entwicklung und Charakterisierung von Elektroden für die Sauerstoffentwicklung in der alkalischen Wasserelektrolyse. February 2021. doi: 10.21268/20210202-2. URL [https://dokumente.ub.tu-clausthal.de/receive/clausthal\\_mods\\_00001680](https://dokumente.ub.tu-clausthal.de/receive/clausthal_mods_00001680).
- [17] Pierre Olivier, Cyril Bourasseau, and Pr. Belkacem Bouamama. Low-temperature electrolysis system modelling: A review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 78:280–300, October 2017. ISSN 1364-0321. doi: 10/gbsxvk. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S136403211730432X>.

- 
- [18] Alexander Tremel. Electrolysis—Fundamental Technologies, Requirements and Current Status. In Alexander Tremel, editor, *Electricity-based Fuels*, SpringerBriefs in Applied Sciences and Technology, pages 19–31. Springer International Publishing, Cham, 2018. ISBN 978-3-319-72459-1. doi: 10.1007/978-3-319-72459-1\_2. URL [https://doi.org/10.1007/978-3-319-72459-1\\_2](https://doi.org/10.1007/978-3-319-72459-1_2).
- [19] J. P. Stempien, Q. Sun, and S. H. Chan. Solid Oxide Electrolyzer Cell Modeling: A Review. *Journal of Power of Technologies*, Vol. 93(nr 4), 2013. ISSN 1425-1353. URL <http://yadda.icm.edu.pl/baztech/element/bwmeta1.element.baztech-48815965-a9b4-4185-9caa-ffd04b51a12e>.
- [20] Z. Abdin, C. J. Webb, and E. MacA. Gray. Modelling and simulation of a proton exchange membrane (PEM) electrolyser cell. *International Journal of Hydrogen Energy*, 40(39):13243–13257, October 2015. ISSN 0360-3199. doi: 10.1016/j.ijhydene.2015.07.129. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0360319915019321>.
- [21] Jaroslaw Milewski, Giulio Guandalini, and Stefano Campanari. Modeling an alkaline electrolysis cell through reduced-order and loss-estimate approaches. *Journal of Power Sources*, 269:203–211, December 2014. ISSN 03787753. doi: 10/gjvnbb. URL <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0378775314010027>.
- [22] S. Ahmad Hajimolana, M. Azlan Hussain, W.M. Ashri Wan Daud, M. Soroush, and A. Shamiri. Mathematical modeling of solid oxide fuel cells: A review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 15(4):1893–1917, May 2011. ISSN 13640321. doi: 10/fjt73q. URL <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S1364032110004466>.
- [23] John Webster and Carsten Bode. Implementation of a Non-Discretized Multiphysics PEM Electrolyzer Model in Modelica. pages 833–840, February 2019. doi: 10/gjvtn2. URL [https://ep.liu.se/en/conference-article.aspx?series=ecp&issue=157&Article\\_No=88](https://ep.liu.se/en/conference-article.aspx?series=ecp&issue=157&Article_No=88).
- [24] C. Y. Biaku, N. V. Dale, M. D. Mann, H. Salehfar, A. J. Peters, and T. Han. A semiempirical study of the temperature dependence of the anode charge transfer coefficient of a 6kW PEM electrolyzer. *International Journal of Hydrogen Energy*, 33(16):4247–4254, August 2008. ISSN 0360-3199. doi: 10/fkhj5k. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0360319908007118>.
- [25] Giulio Guandalini, Stefano Campanari, and Gianluca Valenti. Comparative assessment and safety issues in state-of-the-art hydrogen production technologies. *International Journal of Hydrogen Energy*, 41(42):18901–18920, November 2016. ISSN 0360-3199. doi: 10/f89dfv. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0360319916302592>.

- [26] Sarah Milanzi, Carla Spiller, Benjamin Grosse, Lisa Hermann, and Joachim Müller-Kirchenbauer. Technischer Stand und Flexibilität des Power-to-Gas-Verfahrens. August 2018. doi: 10/gjnmdv. URL <https://zenodo.org/record/2620253>. Publisher: Zenodo Version Number: V01.
- [27] Yulin Yan, Q. Fang, L. Blum, and W. Lehnert. Performance and degradation of an SOEC stack with different cell components. *Electrochimica acta*, 258:1254–1261, 2017. doi: 10/gcqc6j. Publisher: Elsevier.
- [28] B. Butz, R. Schneider, D. Gerthsen, M. Schowalter, and A. Rosenauer. Decomposition of 8.5mol.% Y2O3-doped zirconia and its contribution to the degradation of ionic conductivity. *Acta Materialia*, 57(18):5480–5490, October 2009. ISSN 1359-6454. doi: 10/b2tc8h. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1359645409004790>.
- [29] Günter Schiller, Asif Ansar, and Olaf Patz. High Temperature Water Electrolysis Using Metal Supported Solid Oxide Electrolyser Cells (SOEC). *Advances in Science and Technology*, 72:135–143, October 2010. ISSN 1662-0356. doi: 10/dnsghx. URL <https://www.scientific.net/AST.72.135>.
- [30] Md Mamoon Rashid, Mohammed K. Al Mesfer, Hamid Naseem, and Mohd Danish. Hydrogen production by water electrolysis: a review of alkaline water electrolysis, PEM water electrolysis and high temperature water electrolysis. *Int. J. Eng. Adv. Technol*, 4 (3):2249–8958, 2015.
- [31] A. G. Olabi, Tabbi Wilberforce, Enas Taha Sayed, Khaled Elsaid, and Mohammad Ali Abdelkareem. Prospects of Fuel Cell Combined Heat and Power Systems. *Energies*, 13 (16):4104, January 2020. doi: 10/gjnx38. URL <https://www.mdpi.com/1996-1073/13/16/4104>. Number: 16 Publisher: Multidisciplinary Digital Publishing Institute.
- [32] Umberto Lucia. Overview on fuel cells. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 30: 164–169, February 2014. ISSN 13640321. doi: 10/f5wt6. URL <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S1364032113006965>.
- [33] S. Mekhilef, R. Saidur, and A. Safari. Comparative study of different fuel cell technologies. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 16(1):981–989, January 2012. ISSN 1364-0321. doi: 10/d2sbhv. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1364032111004709>.
- [34] Ing A. Engler, J. Bard, and M. Viotto. Wechselrichter für die Netzkopplung von Brennstoffzellen.
- [35] Wladimir Schamai. *Modelica Modeling Language (ModelicaML) : A UML Profile for Modelica*. Linköping University Electronic Press, 2009. URL <http://urn.kb.se/resolve?urn=urn:nbn:se:liu:diva-20553>.

- 
- [36] Aleksey Trubitsyn, Brandon J. Pierquet, Alexander K. Hayman, Garet E. Gamache, Charles R. Sullivan, and David J. Perreault. High-efficiency inverter for photovoltaic applications. In *2010 IEEE Energy Conversion Congress and Exposition*, pages 2803–2810, Atlanta, GA, September 2010. IEEE. ISBN 978-1-4244-5286-6. doi: 10/b57pmg. URL <https://ieeexplore.ieee.org/document/5618163/>.
- [37] R. García-Valverde, N. Espinosa, and A. Urbina. Simple PEM water electrolyser model and experimental validation. *International Journal of Hydrogen Energy*, 37(2):1927–1938, January 2012. ISSN 03603199. doi: 10/dqz2nr. URL <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0360319911021380>.
- [38] J. Herrmann. *Effizienz, Wirtschaftlichkeit und Potential von klein-Blockheizkraftwerken = Efficiency, Economics and Potential of mini Combined Heat and Power Units*. PhD thesis, Universität Augsburg Augsburg, 2006. URL [https://pure.mpg.de/pubman/faces/ViewItemOverviewPage.jsp?itemId=item\\_2143924](https://pure.mpg.de/pubman/faces/ViewItemOverviewPage.jsp?itemId=item_2143924).
- [39] Gerhard Reich and Marcus Reppich. Grundlagen zur Bewertung von Energiesystemen. *Regenerative Energietechnik*, pages 31–60, 2018. doi: 10/gjppq4. URL [https://link.springer.com/chapter/10.1007/978-3-658-20608-6\\_2](https://link.springer.com/chapter/10.1007/978-3-658-20608-6_2). Publisher: Springer Vieweg, Wiesbaden.
- [40] Dirk Müller. Vorlesung "Energiewirtschaft", Dynamische Investitionsrechnung, April 2020.
- [41] Periodensystem-online. Dichtewerttabelle anzeigen - Das Periodensystem online, . URL <http://www.periodensystem-online.de/index.php?id=lists&form=Dichtewerte&sst=5>.
- [42] Symphony Energy Co.LTD. SE6M60 Series - Polycrystalline Solar Module by Symphony Energy Co.LTD. URL <https://energy-xprt.com/products/model-se6m60-series-polycrystalline-solar-module-227605>.
- [43] DWD. Historische Wetterdaten, Deutschland; Wetterstation Aachen-Orsbach (Kennung: 15000), . URL [https://opendata.dwd.de/climate\\_environment/CDC/observations\\_germany/climate/hourly/air\\_temperature/historical/](https://opendata.dwd.de/climate_environment/CDC/observations_germany/climate/hourly/air_temperature/historical/).
- [44] DWD. Klimaberatungsmodul; TRY15 (Bezugskordinaten: 50,7931° N 6,0546° O), . URL <https://kunden.dwd.de/obt/index.jsp>.
- [45] M. Hammoudi, C. Henao, K. Agbossou, Y. Dubé, and M.L. Doumbia. New multi-physics approach for modelling and design of alkaline electrolyzers. *International Journal of Hydrogen Energy*, 37(19):13895–13913, October 2012. ISSN 03603199. doi: 10/f4c8jg. URL <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S036031991201590X>.

- [46] Periodensystem-online. Dichtewerttabelle anzeigen - Das Periodensystem online, . URL <http://www.periodensystem-online.de/index.php?id=lists&form=Dichtewerte&sst=6>.
- [47] Dipl-Ing Thilo Bocklisch. Optimierendes Energiemanagement von Brennstoffzelle-Direktspeicher-Hybridsystemen. April 2010. URL [https://monarch.qucosa.de/landing-page/?tx\\_dlf\[id\]=https%3A%2F%2Fmonarch.qucosa.de%2Fapi%2Fqucosa%253A19281%2Fmets](https://monarch.qucosa.de/landing-page/?tx_dlf[id]=https%3A%2F%2Fmonarch.qucosa.de%2Fapi%2Fqucosa%253A19281%2Fmets).
- [48] Bedienungs- und Wartungsanleitung WASSERSTOFF / SAUERSTOFF GENERATOR Line H04 Modell G24 – G32.
- [49] Regionetz. Gasabrechnung G 685 | Regionetz. URL <https://www.regionetz.de/privatkunden/gasanschluss/gasabrechnung-g-685/>.
- [50] Jan Von Appen, Balthasar Burgenmeister, and Martin Braun. Optimale Dimensionierung von PV-Speicher-Systemen unter Unsicherheit. In *30. Symposium Photovoltaische Solarenergie*, 2015.
- [51] gpaNRW. Kalkulatorischer Zinssatz 2020 | gpaNRW, May 2021. URL <https://gpanrw.de/aktuelles/aktuelle-meldungen/hinweise-zum-kalkulatorischen-zinssatz-2020>.
- [52] E.ON Energie. Ihr Industriestrom 2021: Preisvergleich für Unternehmen, May 2021. URL <https://www.eon.de/de/gk/strom/industriestrom.html>.
- [53] BNA. Bundesnetzagentur - Veröffentlichung von EEG-Registerdaten, May 2021. URL [https://www.bundesnetzagentur.de/DE/Sachgebiete/ElektrizitaetundGas/Unternehmen\\_Institutionen/ErneuerbareEnergien/ZahlenDatenInformationen/EEG\\_Registerdaten/EEG\\_Registerdaten\\_node.html](https://www.bundesnetzagentur.de/DE/Sachgebiete/ElektrizitaetundGas/Unternehmen_Institutionen/ErneuerbareEnergien/ZahlenDatenInformationen/EEG_Registerdaten/EEG_Registerdaten_node.html).
- [54] E.ON Energie. Gewerbegas vergleichen: Günstig, schnell, 100% sicher, May 2021. URL <https://www.eon.de/de/gk/erdgas/gewerbegas.html>.
- [55] Christian Herbert Jungbluth. *Kraft-Wärme-Kopplung mit Brennstoffzellen in Wohngebäuden im zukünftigen Energiesystem*. PhD thesis, Wuppertal Institut für Klima, Umwelt, Energie, April 2012. URL <https://epub.wupperinst.org/frontdoor/index/index/docId/4240>. ISBN: 9783893364695.
- [56] Jacques Schill. *Vergleich verschiedener Methoden zur Speicherung von Wasserstoff*. Thesis, Wien, 2018. URL <https://repositum.tuwien.at/handle/20.500.12708/7649>. Accepted: 2020-06-29T17:24:54Z Journal Abbreviation: Comparison of different methods for hydrogen storage.
- [57] Elke Örtl. *Entwicklung der spezifischen Kohlendioxid-Emissionen des deutschen Strommix in den Jahren 1990 - 2019*. Umweltbundesamt,



- April 2020. URL <https://www.umweltbundesamt.de/publikationen/entwicklung-der-spezifischen-kohlendioxid-6>.
- [58] U. B. A. Redaktionsassistentz 2. *CO<sub>2</sub>-Emissionsfaktoren für fossile Brennstoffe*. Umweltbundesamt, September 2016. URL <https://www.umweltbundesamt.de/publikationen/co2-emissionsfaktoren-fuer-fossile-brennstoffe>.
- [59] Dr Harry Wirth. Aktuelle Fakten zur Photovoltaik in Deutschland - Fraunhofer ISE. URL <https://www.ise.fraunhofer.de/de/veroeffentlichungen/studien/aktuelle-fakten-zur-photovoltaik-in-deutschland.html>.
- [60] Marco Miotti, Johannes Hofer, and Christian Bauer. Integrated environmental and economic assessment of current and future fuel cell vehicles. *The International Journal of Life Cycle Assessment*, 22(1):94–110, January 2017. ISSN 0948-3349, 1614-7502. doi: 10/f9kncx. URL <http://link.springer.com/10.1007/s11367-015-0986-4>.



## **Anhang**



## A Parametrierung der Modelle

### Alkalischer Elektrolyseur

Vom Hersteller ist die maximale Wasserstoffproduktion mit 21,33 Nmc/h angegeben [48, S. 50], dies entspricht 0,2643 mol/s. Über den Zusammenhang der von  $i$  und  $\dot{n}_{H_2}$  (Gleichung 2.20) und der maximalen Stromdichte von 0,5 A/cm<sup>2</sup> wird daher eine Zellfläche von 10,2 m<sup>2</sup> angenommen.

Die Elektrolyt-Konzentration ist mit 20 % angegeben [48, S. 36], was bei Natronlauge 6,095 mol/l entspricht [41]

Für den Parameter  $\alpha$  wurde der von Milewski et al. [21] für die Kathode angegebene Wert verwendet. Weil Milewski et al. [21] die Aktivierungsverluste mit dem Faktor 2,3026 multipliziert, ist der verwendete Wert für  $\alpha$  wie folgt bereinigt:

$$\begin{aligned}\frac{1}{\alpha} &= \frac{2,3026}{\alpha_{milewski}} \\ \alpha &= \frac{\alpha_{milewski}}{2,3026} \\ &= \frac{0,39}{2,3026} = 0,17\end{aligned}$$

### PEM-Brennstoffzelle

Die Zellfläche der Brennstoffzelle wurde aus der Zellfläche des Elektrolyseurs und dem Verhältnis der maximalen Stromdichte abgeleitet:

$$\begin{aligned}\dot{n}_{H_2, Brennstoffzelle} &= \dot{n}_{H_2, Elektrolyseur} \\ A_{Brennstoffzelle} &= A_{Elektrolyseur} \cdot \frac{i_{max, pem}}{i_{max, alk}} \\ &= 10,2 \text{ m}^2 \cdot \frac{2 \text{ A/cm}^2}{0,5 \text{ A/cm}^2} \\ &= 2,55 \text{ m}^2\end{aligned}$$

Nach den Simulationsergebnisse liegt die maximale elektrische Leistung der Brennstoffzelle bei 24,475 kW.

Der Parameter  $C_{th}$  ist Webster and Bode [23] entnommen und wurde über die Zellfläche

skaliert:

$$\begin{aligned}C_{th} &= C_{th,webster} \cdot \frac{A}{A_{webster}} \\&= 14,97 \text{ W/K} \cdot \frac{2,55 \text{ m}^2}{1,74 \text{ m}^2} \\&= 21,94 \text{ W/K}\end{aligned}$$

## B Systemkonzepte

### Gasbedarf

Für die Monate Juni bis August wird angenommen, dass keine Heizwärme benötigt wird. Der maximale Gasverbrauch eines Tages in diesem Zeitraum liegt bei  $18,8 \text{ m}^3 \cdot 11,4 \text{ kWh/m}^3 = 214,32 \text{ kWh/m}^3$  (Brennwert 2020 nach Gasabrechnung G 685 - Regionetz [49]).

Von dem Tagesgasverbrauch wird dieser Wert abgezogen und das Ergebnis als zum Heizen benötigte Gasmenge pro Tag angenommen (Weil der Elektrolyseur und die Brennstoffzelle ausschließlich während der Arbeitszeit (ca. 6.30-16.30) betrieben werden, wird ausschließlich die Gasmenge während der Arbeitszeit in Betracht gezogen).

### Prozessgasverbrauchswerte

Wasserstoff und Sauerstoff wurden vom Kunden in Bündeln je 12 Flaschen mit einem Volumen von 50 l und einem Druck von 300 bar gekauft (In Tabelle B.1 sind die Einkaufsmengen für die Jahre 2018 und 2019 angegeben). Nach dem idealen Gas Gesetz ergeben sich daraus die angegebenen Stoffmengen bei der Standardtemperatur von 298,15 K.

**Tabelle B.1:** Gekaufte Menge an Wasserstoff und Sauerstoff für die Jahre 2018 und 2019.

	Anzahl an Bündeln	Stoffmenge
Wasserstoff 2018	105	775 420 mol
Sauerstoff 2018	86	635 106 mol
Wasserstoff 2019	66	487 407 mol
Sauerstoff 2019	47	347 093 mol

Zur Berechnung des Jahressauerstoffbedarfs der Datensätze wird die tägliche Bedarfszeit mit der Anzahl der Arbeitstage im Jahr (mit 245 angenommen) und der durchschnittlichen Stoffmengenproduktion ( $0,2643 \text{ mol/s} \cdot 75 \% / 2 = 0,0991 \text{ mol/s}$  für Sauerstoff und  $0,2643 \text{ mol/s} \cdot 75 \% = 0,1982 \text{ mol/s}$  für Wasserstoff) multipliziert.

**Tabelle B.2:** Berechnung des Jahressauerstoff- und wasserstoffverbrauchs für Datensätze 1 und 2.

	tägliche Bedarfszeit	Jahresverbrauch	Abweichung zum Realwert
Datensatz 2018 $H_2$	4 h, 30 min	786 775 mol	1,5 %
Datensatz 2018 $O_2$	7 h, 15 min	633 775 mol	0,2 %
Datensatz 2019 $H_2$	2 h, 45 min	480 795 mol	0,5 %
Datensatz 2019 $O_2$	4 h	349 669 mol	0,7 %



## C Parameter zur Berechnung des Kapitalwerts

**Tabelle C.1:** Parameter der Kapitalwertberechnung.

Kalkulationszeitraum	$n$	20 a [50]
Kalkulatorischer Zinssatz	$r$	5,56 % [51]
Strompreis	$z_{\text{netzbezug}}$	22,26 ct/kWh [52]
Einspeisevergütung	$z_{\text{einspeisung}}$	7,65 ct/kWh [53]
Gaspreis	$z_{\text{gas}}$	4,89 ct/kWh [54]
Investitionskosten der PV-Anlage	$I_{PV}$	80.352 € Von Appen et al. [50]
Jährliche Wartungskosten der PV-Anlage	$Z_{PV}$	1.205 € Von Appen et al. [50]
Investitionskosten der Brennstoffzelle	$I_{BZ}$	33.286 € [55]
Jährliche Betriebskosten der Brennstoffzelle	$z_{BZ}$	2,02 ct/kWh [55]
Speicherkosten pro Kilogramm Wasserstoff	$z_{\text{Speicher}}$	891 €/kg [56]

Der Betrachtungszeitraum wird, wie auch bei Von Appen et al. [50] auf 20 Jahren angesetzt. Als kalkulatorische Zinssatz wird der in [51] für das Jahr 2020 als Obergrenze angegebene Wert übernommen. Der Strom- und Gaspreis sind Energie [52] (für einen Jahresbedarf von 866,860 kWh) und Energie [54] (für einen Jahresbedarf von 27,224 kWh) entnommen. Die Einspeisevergütung ergibt sich aus den Angaben der Bundesnetzagentur [53] für Solarstromanlagen mit einer Peakleistung bis zu 40 kWh (Installation ab dem 01.07.2021).

Von Appen et al. [50, S.3] geben als Investitionskosten für PV-Anlagen bezogen auf die installierte Fläche: 150 €/m<sup>2</sup> an. Mit 372 Module a 1,44 m<sup>2</sup> ergeben sich Investitionskosten von 150 €/m<sup>2</sup> · 1,44 m<sup>2</sup> · 372 = 80,352 €. Die jährliche Wartungskosten liegen nach Von Appen et al. [50] bei 1,5 % der Investitionskosten.

Die Investitionskosten der Brennstoffzelle betragen nach Jungbluth [55, S. 74] 1360 €/kW bei einer elektrischen Peakleistung von 24,475 kW (Maximalwert der Brennstoffzellen-Ausgangsleistung der Simulation). Die Betriebskosten gibt er mit  $z_{BZ} = 2,02 \text{ ct/kWh}$  an (Nach den Simulationsergebnissen beträgt die Jahresleistung der Brennstoffzelle 12.857 kWh für 2018 beziehungsweise 5.858 kWh für 2019).

Speicherkosten für Wasserstoff liegen nach Schill [56] zwischen 10 bis 30 €/kWh bezogen auf den Brennwert. Daraus ergeben sich Speicherkosten von  $\frac{15 \text{ €/kWh} \cdot \Delta H_R^0}{M_{H_2}} = 594 \text{ €/kg}_{H_2}$ .

Da bei Konzept 4 ein Speicher für H<sub>2</sub> und O<sub>2</sub> im Stoffmengenverhältnis 2 : 1 benötigt wird, werden spezifische Speicherkosten von  $z_{\text{Speicher}} = 1,5 \cdot \frac{15 \text{ €/kWh} \cdot \Delta H_R^0}{M_{H_2}} = 891 \text{ €/kg}_{H_2}$  angenommen.

Für die Überschlagsrechnung des optimierten Brennstoffzellen-Konzepts wird von einer Maximalleistung von  $24,475 \text{ kW} \cdot 11,5 \% = 2,8 \text{ kW}$  gerechnet. Nach Jungbluth [55, S. 74] ergeben sich dafür spezifischen Investitionskosten von 1.875 €.

## D Parameter zur Berechnung der CO<sub>2</sub>-Einsparungen

**Tabelle D.1:** Parameter der CO<sub>2</sub>-Einsparungen.

CO <sub>2</sub> Faktor Strommix	$f_{Strom}$	401 g/kWh [57]
CO <sub>2</sub> Faktor Erdgas	$f_{Gas}$	201,24 g/kWh [58]
CO <sub>2</sub> PV-Strom	$m_{PV}$	50 g/kWh [59, S. 48]
CO <sub>2</sub> Brennstoffzelle	$m_{BZ}$	38,8 kg/a [60]

Für den CO<sub>2</sub> Faktor des Deutschen Strommix wurden Daten aus 2019 verwendet [57]. Die spezifischen CO<sub>2</sub>-Emissionen von Erdgas lagen in Deutschland zwischen 2005-2014 bei konstant 55,9 tonne-CO<sub>2</sub>/TJ [58] was umgerechnet 201,24 g h/kW ergibt.

Für die Herstellung der PV-Anlage und der Brennstoffzelle wurden Angaben für die Emissionen von CO<sub>2</sub>-Äquivalent verwendet. Im Falle der PV-Anlage wurden die durchschnittlichen Emissionen von Deutschem PV-Strom verwendet. Die Emissionen bei der Herstellung von Brennstoffzellen liegen nach Miotti et al. [60] bei 2,47 t bei einer Anlage mit einer elektrischen Leistung von 80 kW. Die spezifischen CO<sub>2</sub>-Emissionen betragen demnach 30,9 kg/kW, wonach die in den Systemkonzepten eingesetzt Brennstoffzelle bei der Herstellung 756,3 kg-CO<sub>2</sub>-Äquivalent verursacht. Für die Berechnung der CO<sub>2</sub>-Einsparungen wird dieser Wert auf die angenommene Lebensdauer (20 a) aufgeteilt.

## **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, 29. Mai 2021

Tobias Jonathan Boschmann