

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, April 2021

Tobias Jonathan Boschmann

Matrikelnummer: 379947

Betreuer:

Hannah Krütfeld, M. Sc.

Univ.-Prof. Dr.-Ing. Dirk Müller

Diese Arbeit wurde vorgelegt am:

E.ON Energy Research Center | ERC

Institute for Energy Efficient Buildings and Indoor Climate | EBC

(Lehrstuhl für Gebäude- und Raumklimatechnik)

Mathieustraße 10, 52074 Aachen

Zusammenfassung

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

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

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

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

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

Abstract

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

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

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

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

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

Inhaltsverzeichnis

Nomenklatur	VII
Abbildungsverzeichnis	XI
Tabellenverzeichnis	XIII
1 Einleitung	1
1.1 Motivation	1
1.2 Zielsetzung	1
2 Grundlagen	3
2.1 Grundlagen der Wasserelektrolyse	3
2.1.1 Elektrochemische Betrachtung	4
2.1.2 Polarisationskurve und Betriebsbereiche von Elektrolyseuren	6
2.1.3 Technologien der Wasserelektrolyse	8
2.1.4 Grundlagen von Brennstoffzellen	10
2.2 Modellierung von Elektrolyseuren und Brennstoffzellen	12
2.2.1 Grundlagen der Modellierung	12
2.2.2 Stand der Technik der Modellierung von Elektrolyseuren	13
2.2.3 Stand der Technik der Modellierung von Brennstoffzellen	14
2.3 Systembedingungen	14
3 Methode	15
3.1 Modelle der Wasserstoffkomponenten	15
3.1.1 Modellierung des Elektrolyseurs	15
3.1.2 Modellierung der Brennstoffzelle	17
3.2 Entwicklung von Energiesystem-Konzepten	17
4 Anwendung	19
4.1 Modelle der Wasserstoffkomponenten	19
4.1.1 Modellierung des Alkalischen Elektrolyseurs	19
4.1.2 Modellierung der Brennstoffzelle	19
4.2 Entwicklung von Energiesystem-Konzepten	19

5	Präsentation und Diskussion der Simulationsergebnisse	21
5.1	Validierung der Komponentenmodelle	21
5.1.1	Elektrolyseur	21
5.1.2	Brennstoffzelle	21
5.2	Systemkonzepte	21
5.2.1	Ergebnisse der Systemkonzept-Simulationen	21
5.2.2	Diskussion der Simulationsergebnisse	21
6	Erkenntnisse	23
6.1	Erkenntnisse zur Modellierung der Wasserstoffkomponenten	23
6.2	Erkenntnisse zur Simulation der Systemkonzepte	23
	Literaturverzeichnis	24

Nomenklatur

Formelzeichen und Einheiten

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

Griechische Formelzeichen

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

Indizes und Abkürzungen

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

Fortsetzung auf der nächsten Seite

Indizes und Abkürzungen

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

Abbildungsverzeichnis

2.1	Ladungsträger bei der Wasserelektrolyse [Tjarks, 2017]	4
2.2	Abhängigkeit der Reaktionsenthalpie und der freien Enthalpie von der Temperatur nach Tremel [2018]	5
2.3	Mögliche Bereiche der Polarisationskurven verschiedener Elektrolyse-Technologien nach Tremel [2018]	7
2.4	Überdeckung der Eigenschaften von System und Modell nach Tabeling [2006]	12

Tabellenverzeichnis

2.1	Standardbildungsenthalpien und Standardentropien für 25 °C [Koj, 2021] und 700 °C [?] sowie stöchiometrische Koeffizienten aus 2.1	4
2.2	Vergleich der gängigen Technologien zur Wasserelektrolyse nach ??	10

1 Einleitung

1.1 Motivation

Ich bin sehr motiviert.

1.2 Zielsetzung

Ich habe ein klares Ziel.

2 Grundlagen

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

2.1 Grundlagen der Wasserelektrolyse

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 [Tjarks, 2017]. Allerdings muss der Ionenaustausch zwischen Anode und Kathode möglich sein und dies wird durch ein Elektrolyt erreicht.

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



Die allgemeine Reaktionsgleichung ist dabei unabhängig vom Elektrolyt, wohingegen sich die Oxidations- und Reduktionsgleichungen unterscheiden. Die Oxidation findet an der Anode statt und hat Sauerstoff als Produkt. An der Kathode wird durch die Reduktion Wasserstoff gebildet. Es gibt drei mögliche Ladungsträger bei der Wasserelektrolyse: Hydroxidionen, Protonen oder Oxidionen [Tjarks, 2017]. Zu den verschiedenen Ladungsträgern werden in 2.1.3 bis 2.1.3 technische Verfahren angeführt und erläutert.

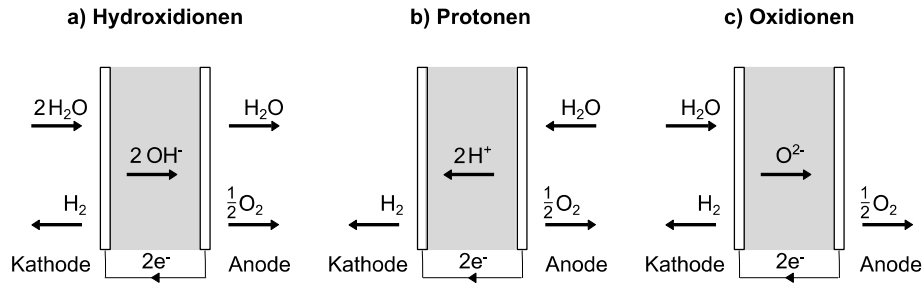


Abbildung 2.1: Ladungsträger bei der Wasserelektrolyse [Tjarks, 2017]

2.1.1 Elektrochemische Betrachtung

Die benötigte Energie bei einer Redoxreaktion entspricht der Reaktionsenthalpie ΔH_R und lässt sich aus den Bildungsenthalpien ($\Delta_f H_i$) und stöchiometrischen Koeffizienten (ν_i) der Edukte und Produkte bestimmen [Falcão and Pinto, 2020; Brauns and Turek, 2020]:

$$\Delta H_R = \sum \nu_i \Delta_f H_i \quad (2.2)$$

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

$$\Delta G_R = \Delta H_R - T \Delta S_R \quad (2.3)$$

$$\Delta S_R = \sum \nu_i S_i \quad (2.4)$$

Für die Wasserelektrolyse (2.1) bei Standardbedingungen ($T_0 = 25^\circ\text{C}$ und $p_0 = 101.325\text{ kPa}$) ergibt sich mit den Daten aus Tabelle 2.1 die Reaktionsenthalpie zu $\Delta H_R^0 = 285.25\text{ kJ mol}^{-1}$ und die freie Enthalpie zu $\Delta G_R^0 = 236.59\text{ kJ mol}^{-1}$.

h-700 = 247,12; g-700 = 193,66

Tabelle 2.1: Standardbildungsenthalpien und Standardentropien für 25°C [Koj, 2021] und 700°C [?] sowie stöchiometrische Koeffizienten aus 2.1

Komponenten i	$\Delta_f H_i^0$ [kJ/mol]	$\Delta_f H_i(T = 700^\circ\text{C})$ [kJ/mol]	S_i^0 [J/(molK)]	$S_i(T = 700^\circ\text{C})$ [J/(molK)]	ν_i [-]
H ₂ O	-285,25	70,12	-216,35	231,81	-1
O ₂	0	205,25	21,78	242,64	1/2
H ₂	0	130,7	19,88	165,43	1

Reversible Zellspannung Mit der Faraday Konstante ($F = 96\,485.3 \text{ C mol}^{-1}$) 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 [Falcão and Pinto, 2020].

$$U_{tn}^0 = \frac{\Delta H_R^0}{zF} = 1.478 \text{ V} \quad (2.5)$$

$$U_{rev}^0 = \frac{\Delta G_R^0}{zF} = 1.226 \text{ V} \quad (2.6)$$

Dabei ist zu beachten, dass sowohl die Reaktionsenthalpie als auch die freie Enthalpie eine starke Temperaturabhängigkeit aufweisen, was sich auch auf die Spannungen auswirkt (2.2).

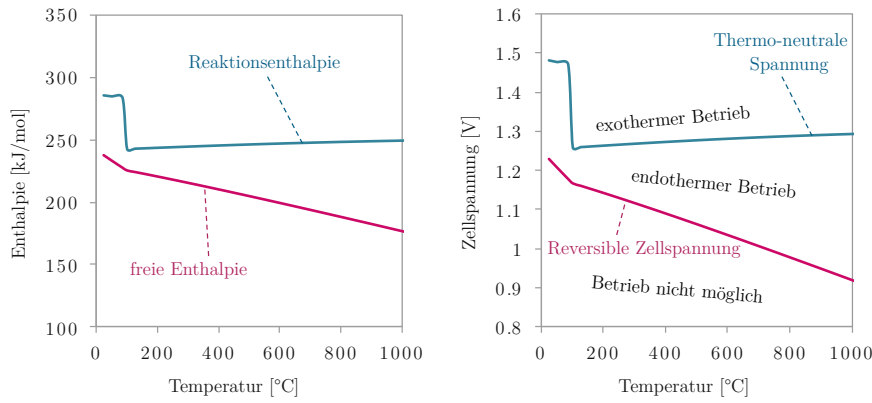


Abbildung 2.2: Abhängigkeit der Reaktionsenthalpie und der freien Enthalpie von der Temperatur nach Tremel [2018]

Überspannungen

Die reale Zell-Spannung U_{real} 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. Nach Olivier et al. [2017] ist die Zellspannung im realen Betrieb aufgrund der Verluste stets größer als die thermoneutrale Spannung, das System wird also exotherm betrieben und es muss Wärmeenergie abgeführt werden (2.2).

Als maßgeblichen Verluste, auch Überspannungen genannt, werden üblicherweise drei Phänomene betrachtet: Aktivierungsverluste (U_{Akt}), Ohmsche Verluste (U_{Ohm}) und Konzentrationsüberspannung (U_{Diff}) [Falcão and Pinto, 2020]. 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 2.1.2 näher erläutert wird.

Daher werden Diffusionsströme in dieser Arbeit als vernachlässigbar klein angenommen.

$$U_{real} = U_{rev} + U_{Akt} + U_{Ohm} + U_{Diff} \quad (2.7)$$

Aktivierungsverluste

Aktivierungsverluste kommen durch die elektrochemischen Vorgänge an den Oberflächen der Elektroden und ihrer Kinetik zustande. Dabei treten zwei Phänomene auf: Einerseits chemische (wegen des chemischen Gleichgewichtszustands der Ionen an der Grenzfläche zwischen Elektrode und Elektrolyt) und andererseits elektrische (aufgrund des Ladungstransports durch das elektrische Feld an der Grenzfläche) [Stempien et al., 2013].

Ohmsche Verluste

Ohmsche Verluste werden durch elektrische sowie ionische Widerstände und Kontaktwiderständen zwischen den Komponenten verursacht. Ionischen Widerstände, welche sich in der Membran (bei alkalischer und PEM-Elektrolyse) und an den Elektrodenoberflächen lokalisieren lassen, dominieren üblicherweise die Ohmschen Verluste [Stempien et al., 2013]. Elektrische Widerstände treten in den Elektroden und an der Kontaktierung der Zelle auf und lassen sich somit durch den Aufbau der Zelle beeinflussen [Tjarks, 2017].

Diffusionsüberspannungen

Diffusionsüberspannungen treten auf, wenn eine Überpopulation von Produktgasen an den Elektroden entsteht. Die Gase bilden Blasen auf den Elektrodenoberflächen und verringern dadurch die Fläche, an welcher die Teilreaktionen stattfinden können [Abdin et al., 2015]. Diffusionsüberspannungen treten somit verstärkt bei hohen Stromdichten auf und bewirken daher einen sinkenden Wirkungsgrad bei steigender Stromdichte [Biaku et al., 2008].

2.1.2 Polarisationskurve und Betriebsbereiche von Elektrolyseuren

Die Abhängigkeit der realen Zellspannung U_{real} eines Elektrolyseurs von der Stromdichte bildet die Polarisationskurve graphisch ab. Diese wird von vielen Einflussfaktoren - 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 ?? hergeleitete reversible Zellspannung und Gleichung 2.7.** 2.3 vergleicht die Polarisationskurven der in ?? erläuterten technischen Verfahren.

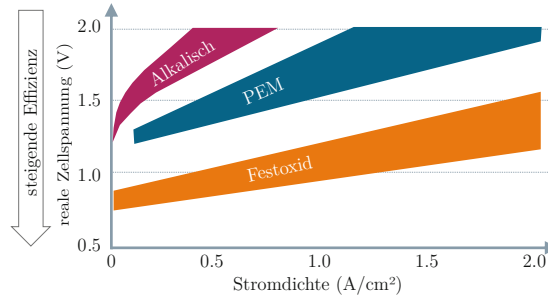


Abbildung 2.3: Mögliche Bereiche der Polarisationskurven verschiedener Elektrolyse-Technologien nach Tremel [2018]

Des weiteren lässt sich die Polarisationskurve auch zur Bestimmung des Betriebspunkts 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 einen direkten Zusammenhang zwischen dem Elektronenfluss und der Stoffmenge an produziertem Wasserstoff (\dot{n}_{H_2O}).

$$P_{el}(i) = U_{real}(i) \cdot i A_{zelle} \quad (2.8)$$

$$\dot{n}_{H_2O} = \frac{i A_{zelle}}{zF} \quad (2.9)$$

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

$$\eta = \frac{H_u \cdot \dot{n}_{H_2O}}{P_{el}} = \frac{H_u}{U_{real}(i) \cdot zF} \quad (2.10)$$

Somit zeigt sich, dass es zur Steigerung der Effizienz erstrebenswert ist, den Elektrolyseur bei einer niedrigen Spannungen zu betreiben [Biaku et al., 2008]. Aus 2.3 wird ersichtlich, dass dies bei einer niedrigen Stromdichte der Fall ist. Allerdings bleibt zu bedenken, dass dadurch auch der Produktgasstrom verringert wird, weshalb ein Kompromiss zwischen Wirkungsgrad und einer größeren aktiven Zellfläche - und damit verbunden höheren Investitionskosten und größerem Bauraum - zu finden ist.

Weiterhin stellt die Gasreinheit der Produktströme eine untere Betriebsgrenze für die Stromdichte dar. Aufgrund von Diffusion der Produktgase durch die Membran (bei Alkalischer und PEM-Elektrolyse) bzw. das Elektrolyt (bei SO-Elektrolyse), kommt es zu einer Mischung von Sauerstoff und Wasserstoff. Da beide Produktgase ab einer Verunreinigung von 4 Volumen-% explosive Mischungen bilden können, wird üblicherweise bei 2 Volumen-% Verunreinigung ein Notstop des gesamten Elektrolyseur-Systems eingeleitet [Brauns and Turek, 2020]. Zwei physikalische Abhängigkeiten sind dabei bedeutsam:

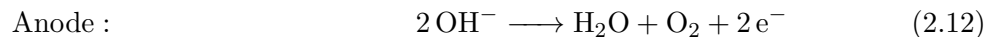
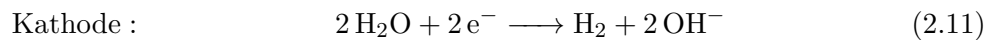
Einerseits nimmt die Verunreinigung der Produktgase bei hohem Druck zu, da dann auch der für die Diffusion maßgebliche Konzentrationsgradient eines Gases in der Membran/dem Elektrolyt steigt. Andererseits sinkt die Verunreinigung bei steigender Stromstärke, weil die produzierte Stoffmenge mit der Stromdichte linear ansteigt, der Diffusionsstrom aber wegen gleichbleibender Konzentrationsverläufe nahezu konstant ist. Somit wird die Verunreinigung bei einer höheren Stromdichte stärker verdünnt [Brauns and Turek, 2020].

Grigoriev et al. [2011] gibt an, dass die Verunreinigung der Produktgase insbesondere durch die Rekombination von Wasserstoff und Sauerstoff verringert werden kann. Somit kann durch bestimmte Maßnahmen der Betriebsbereich in Richtung niedrigerer Stromstärken vergrößert werden.

2.1.3 Technologien der Wasserelektrolyse

Im folgenden sollen die drei maßgeblichen Verfahren zur Wasserelektrolyse näher erläutert werden.

Alkalischer Elektrolyseur Die alkalische Elektrolyse ist eine ausgereifte Technik und der derzeitige Standard für groß dimensionierte Elektrolyseure [Tremel, 2018]. Anlagen mit einer Leistung Wasserstoffproduktion von bis zu 130 MW sind derzeit im Betrieb und die minimale Teillast liegt nach [Guandalini et al., 2016] bei ungefähr 20%. Als Elektrolyt dient üblicherweise zwischen 25 und 30 prozentige Natron- (NaOH) oder Kalilauge (KOH) [Tremel, 2018]. Grund für die hohe Konzentration ist, dass der Base-Gehalt der Lösung maßgeblich deren Leitfähigkeit beeinflusst. Als Ladungsträger in der Lösung fungieren Hydroxidionen. Es werden metallische Elektroden verwendet, welche gelegentlich zur Steigerung der Aktivität mit Edelmetallen beschichtet werden. Folgende Reaktionen laufen an der Kathode und Anode ab:



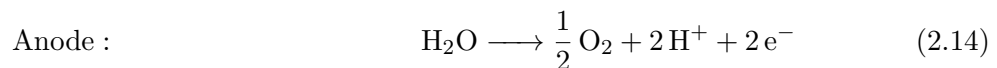
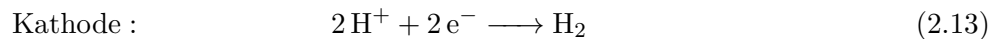
Um die produzierten Gase von einander getrennt zu halten, wird zwischen Anode und Kathode ein Diaphragma positioniert. Dies hat neben Performance- auch Sicherheitsgründe, da elementarer Wasserstoff hochentzündlich ist. Aus diesem Grund sind Elektrolyseure auch in ihrer Dynamik eingeschränkt: Bevor das 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 ? kann das dynamische Verhalten von Elektrolyseuren erheblich verbessert werden, wenn sie während

Standzeiten im Standby betrieben werden.

Ein weiterer Nachteil aktueller technischer Anlagen der alkalischen Elektrolyse ist, dass die maximale Stromdichte verglichen mit anderen Elektrolyseuren niedrig ausfällt (Tremel [2018] gibt Stromdichten von $0,2 - 0,5 \text{ A cm}^{-2}$ an).

Protonen Austausch Membran (PEM) Elektrolyseur PEM-Elektrolyseure werden seit 1950 entwickelt und derzeit im 1 MW Bereich vertrieben. Ein Vorteile der Technologie sind die hohen erreichbaren Stromdichten von bis zu $0,5 \text{ A cm}^{-2}$. Zudem können PEM-Elektrolyseure sehr dynamisch betrieben werden und ein Betrieb bei bis zu 10% minimaler Teillast ist möglich [Tremel, 2018].

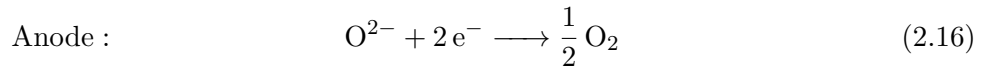
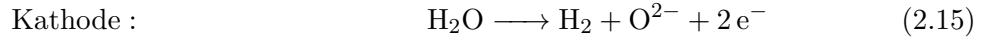
Als Ladungsträger fungieren Protonen und als Elektrolyt dient eine in destilliertem Wasser positionierte Protonen-Austausch-Membran (**P**roton **E**xchange **M**embran). Dies vereinfacht den Betrieb verglichen mit den mit stark basischer Lösung befüllten, alkalischen Elektrolyseuren erheblich. Die Protonenleitfähigkeit der Polymer-Membran wird durch Sulfonsäurebindende Seitengruppen, sogenannte Idomere, erreicht [Tjarks, 2017]. Für die Dicke der Membran muss dabei ein Kompromiss zwischen Langlebigkeit und Durchlässigkeit gefunden werden [Falcão and Pinto, 2020]. Die Säure des Elektrolyts, so wie das Erstreben hoher Reaktionsgeschwindigkeiten führt zu hohen Kosten bei den Elektrodenmaterialien: Die Kathode besteht meist aus mit Platin beschichtetem Kohlenstoff, als Anode werden häufig als Oxid vorliegendes Iridium oder Ruthenium verwendet. Folgende Reaktionen laufen an der Kathode und Anode ab:



Feststoffoxid Elektrolyseur Feststoffoxid(SO) Elektrolyseure sind seit 1980 in Entwicklung [Isenberg, 1981] ? hier besser Übersicht angeben?. Sie haben den Vorteil, dass sie Temperaturen von $700 - 1000^\circ\text{C}$ 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 [Tremel, 2018]. Zudem steigt mit der Temperatur auch die Reaktionsgeschwindigkeit, weshalb keine teuren Katalysator-Materialien verwendet werden müssen [Yan et al., 2017].

Ein Nachteil der gesteigerten Betriebstemperatur sind die höheren Ansprüche an die Temperaturbeständigkeit der Elektroden und des Elektrolyts. Als Elektrolyt wird meist Zirkoniumdioxid (ZrO_2) verwendet, welches zur Steigerung Leitfähigkeit mit Yttriumoxid (Y_2O_3) stabilisiert wird [Butz et al., 2009]. Das Elektrolyt wird zwischen zwei porösen Elektroden

(Beispielsweise eine Nickeloxid Anode und eine LSCF-Kathode [Schiller et al., 2010]) positioniert, was den Austausch der Oxidionen ermöglicht. Es existieren SO-Elektrolyseure, welche auf dem Transport von Protonen basieren, allerdings soll aufgrund ihrer geringen Bedeutung in dieser Arbeit nicht weiter darauf eingegangen werden [Stempien et al., 2013].



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 [Stempien et al., 2013]. Weiterhin bleibt ein zu lösendes Problem der Leistungsverlust und der Abbau der Elektrodenmaterialien, was die Lebensdauer der Zellen signifikant einschränkt [Yan et al., 2017].

Tabelle 2.2: Vergleich der gängigen Technologien zur Wasserelektrolyse nach ??

	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 ⁻²	2 A cm ⁻²	
max. Lastgradient	33 %/s	100 %/s	
Vorteile	Preis Technologiereife Lebensdauer	Kompaktheit Betriebsbereich Lastgradient Gasreinheit	Wirkungsgrad günstiger Katalysator hoher Betriebsdruck
Nachteile	Gasreinheit korrosives Elektrolyt geringer Betriebsdruck	Kosten saures Elektrolyt	Technologiereife Lebensdauer

2.1.4 Grundlagen von 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, es wird aus Wasserstoff und Sauerstoff Wasser gebildet. Der Aufbau von Brennstoffzellen gleicht dem, von Elektrolyseuren: Es werden zwei Elektroden, ein Elektrolyt sowie eine Gasdichte Membran benötigt. Daher werden einige Zellen sowohl als Brennstoffzelle als auch als Elektrolyseur eingesetzt [Yan et al., 2017]. Ein Vorteil der Brennstoffzelle ist dabei, dass sowohl reiner Sauerstoff als auch Umgebungsluft zur Kombination mit Wasserstoff verwendet werden kann [?].

Die in 2.1.1 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. Weil die in 2.1.1 beschriebenen Verlustmechanismen durch Diffusionsvorgänge und ohmsche Widerstände hervorgerufen werden, treten sie auch bei Brennstoffzellen auf [?]. Allerdings werden die Verlustterme von der reversiblen Zellspannung subtrahiert:

$$U_{real} = U_{rev} - U_{Akt} - U_{Ohm} - U_{Diff} \quad (2.17)$$

Wie auch bei Elektrolyseuren existieren für die Umsetzung von reinem Wasserstoff Alkalische, PEM und Festoxid Brennstoffzellen [?]. Auf weitere Technologien, welche Methan, Erdgas oder vergaste Kohle als Energieträger verwenden soll in dieser Arbeit nicht näher eingegangen werden. 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 2.1.3, bei den Brennstoffzellen die PEM-Technologie deutlich verbreiteter ist. So gibt [?] 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 [?] ist dies bei 95% aller vertriebenen Brennstoffzellen der Fall. Die Vorteile von Brennstoffzellen sind dabei der geringe Geräusch und Schadstoffemission [?]. Für mobile Anwendungen eignen sich insbesondere PEM-Brennstoffzellen, weil diese bei einer höheren maximalen Stromdichte betrieben werden können als Alkalische und Festoxid-Zellen, was Vorteile im Bezug auf den benötigten Bauraum und das Gewicht mit sich bringt.

Eine weiteres Anwendungsgebiet von Brennstoffzellen ist aufgrund des exothermen Betriebs die Kraft-Wärmekopplung. [?] gibt 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 [?] für den Einsatz von Festoxid-Brennstoffzellen spricht.

2.2 Modellierung von Elektrolyseuren und Brennstoffzellen

2.2.1 Grundlagen der Modellierung

Nach Tabelaing [2006, 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.

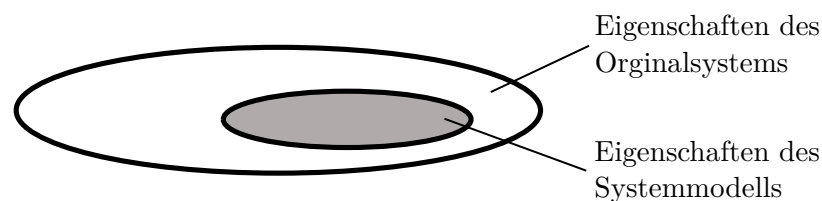


Abbildung 2.4: Überdeckung der Eigenschaften von System und Modell nach Tabelaing [2006]

Nach [?] liegt die Schwierigkeit in der Modellierung in erster Linie in der Identifikation einer zur Anwendung geeigneten Modell Struktur. 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 gehörigen Ausgangsgrößen ab [Hauth, 2008, S. 3]. In der Realität liegen verwendete Modelle zwischen den beiden genannten Idealfällen, es handelt sich also meist um Grey-Box Modelle. Dies lassen sich wiederum in zwei Untergruppen unterteilen: Bei physikalischen Grey-Box Modellen wird physikalisches Vorwissen genutzt und mit experimentell gewonnenen Parameter ergänzt. Bei Semi-physikalischen Grey-Box Modellen wird Vorwissen über das Systemverhalten genutzt, um eine Modellstruktur für ein Modell mit Black-box Charakter zu entwickeln.

[?] gibt 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 allerdings zu benennen, dass mit steigender Systemkomplexität die Entwicklungs- und Rechenzeit erheblich zunimmt [Hauth, 2008, S. 4].

Modelica ist eine Objektorientierte Sprache, welche mithilfe von Compilern in C übersetzt wird. Es können dabei Systemen gewöhnlicher Differentialgleichungen in Kombination mit diskreten Vorfällen modelliert werden. Schamai [2009] schließt daraus, dass Modelica ideal für die Modellierung von physikalischen Systemen mit Energieaustausch und weiteren zeit-kontinuierlichen Vorgängen geeignet ist.

???In den Methodenteil???

2.2.2 Stand der Technik der Modellierung von Elektrolyseuren

Im folgenden soll ein kurzer Überblick über Aktuelle Forschungsergebnisse zur Modellierung von Elektrolyseuren geliefert werden. Es werden dabei vorrangig Modelle von Alkalischen Elektrolyseuren vorgestellt, weil im Wasserstoff-Energiesystem des Kunden dieser Typ verbaut ist. Weiterhin ist zu beobachten, dass die Modelle der verschiedenen Bauarten hohe Ähnlichkeiten aufweisen und somit die Betrachtung des Standes der Technik in der Modellierung einer Bauart einen aussagekräftiges Überblick liefert.

Ulleberg [2003] liefert ein semi-physikalisches Modell eines Alkalische Elektrolyseurs zur Bestimmung der Polarisationskurve. Dabei wurden als Einflussparameter die Betriebstemperatur und der Druck berücksichtigt. Die reversible Zellspannung wird dabei mit Hilfe der Nernstgleichung (ref. in Methoden Teil) modelliert und für die Überspannungen wird eine Kombination aus logarithmischem (für die Aktivierungsverluste) und linearem Verlauf (für die ohmschen Verluste) angenommen. Amores et al. [2014] erweitert dieses Modell um die Einflüsse der Elektrolyt-Konzentration und des Abstands der Elektroden zum Diaphragma. Die Parameter wurden dabei mithilfe eines Matlab Fitting-Codes aus experimentell gewonnenen Messwerten bestimmt.

Tjarks [2017] erstellt ein physikalisches Modell eines PEM-Elektrolyseurs für die Untersuchung von Power-to-Gas Anwendungen. Dabei werden physikalische Gesetze verwendet, um Aktivierungs- und Diffusionsvorgänge sowie elektrische Widerstände zu beschreiben. Weiterhin wird die Polarisationskurve mithilfe von Fittingparametern Messwerten einer Versuchsreihe angenähert. Eine Besonderheit des Modells ist die Berücksichtigung des Thermomanagements des Elektrolyseurs zur Berechnung der benötigten Heiz- bzw. Kühlleistung.

Rodríguez and Amores [2020] modelliert neben den elektrochemischen Vorgängen in einem Alkalischen Elektrolyseur auch die, den Stofftransport im Elektrolyt beschreibenden, Strömungsvorgänge. Dabei werden die Vorgänge der Blasenbildung und Strömung von Gasen im Elektrolyt mithilfe einer CFD-Simulation berücksichtigt. Die Abweichungen der Polarisationskurve von Messwerten lag unter 1%, wobei zu bedenken ist, dass die Methode eine genaue

Kenntnis der Zellgeometrie, der Strömungseigenschaften des Elektrolyts und der Porosität sowie Tortuosität des Diaphragmas erfordert.

2.2.3 Stand der Technik der Modellierung von Brennstoffzellen

Barragan et al. [2020] präsentiert ein Black-Box Model zur Echtzeitregelung von Brennstoffzellen. Das Modell basiert auf der Fuzzy Methode, welche aus Paaren von Eingangs- und Ausgangsdaten Merkmale ableitet. Zu bestimmenden Ausgangswerte werden abgeschätzt, indem abhängig davon, in welchem Maß die Eingangswerte die Merkmale erfüllen, Ausgangsdaten überlagert werden. 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 vorteilhaft für die Langzeit-Regelung von Brennstoffzellen, weil laufend Input-Output Daten in die Modellierung einfließen.

2.3 Systembedingungen

-Erläutern weiterer Komponenten, die zum Betrieb des Elektrolyseurs benötigt werden

Abb. ähnlich 2.6 pem deutsch erstellen

Gleichrichter erläutern mit Abb.

Elektrolyseur mit Gleichspannung betreiben

Schaltbare Gleichrichter zur Vorgabe der Betriebsbedingungen I und U

Gastrocknung

mit Wasserdampf gesättigte Produktgase -> Wasserausscheidung

-PV-Anlage erläutern

Dynamik herausstellen

grundlegendes Funktionsprinzip

3 Methode

3.1 Modelle der Wasserstoffkomponenten

3.1.1 Modellierung des Elektrolyseurs

Inhalt:

-für mein Modell gewählte Gleichungen

(Temp. und Druck Abhängigkeit der idealen Spannung, Überspannungen für die drei Technologien)

-Modellierung des Temperaturverhaltens

-Wichtig: Dynamik des Elektrolyseurs!!

(PEM nach Tjaarks keine Einschränkung, AEC dynamisch schlecht -> wie modellieren?!, Idee: über C_p T/dt aber C_p Bestimmen für jeden Elektrolyseur nötig!

-Berücksichtigung weiterer Systemkomponenten im Modell

reversible Zellspannung Abhängigkeit der reversiblen Zellspannung von Druck und Temperatur.

$$U_{rev} = U_{rev}^0 + \Delta U_{rev}(p) + \Delta U_{rev}(T) \quad (3.1)$$

Nernst-Gleichung - Abhängigkeit der reversiblen Zellspannung U_{rev} von den Partialdrücken der Produkte (p_{H_2} für Wasserstoff und p_{O_2} für Sauerstoff) sowie der Aktivität des Wassers (a_{H_2O})

Festoxid Elektrolyse: gasförmiges Wasser-> Partialdruck des Wassers (p_{H_2O})

$$\Delta U_{rev}(p) = \frac{RT}{nF} \ln \left(\frac{p_{H_2} \sqrt{p_{O_2}}}{a_{H_2O}} \right) \quad (3.2)$$

$$\Delta U_{rev}(p) = \frac{RT}{nF} \ln \left(\frac{p_{H_2} \sqrt{p_{O_2}}}{p_{H_2O}} \right) \quad (3.3)$$

$$(3.4)$$

Temperatur:

$$\Delta U_{rev}(T) = 8.5 \cdot 10^{-4} \cdot (T - 298) \quad (3.5)$$

Aktivierungsverluste Für PEM und Alk:

$$U_{Akt} = \frac{T \cdot R}{z \cdot \alpha_k \cdot F} \cdot \ln(i/i_0) \quad (3.6)$$

$$(3.7)$$

Ohmsche Verluste σ_{Alk} aus ?

σ_{PEM} aus ? oder ?

σ_{SO} aus ?

$$U_{Ohm} = \frac{\delta}{\sigma} \quad (3.8)$$

$$\sigma_{Alk} = -2.04m - 0.0028m^2 + 0.005332mT + 207.2 \frac{m}{T} + 0.001043m^3 - 3 \cdot 10^{-3}m^2T^2 \quad (3.9)$$

$$\sigma_{PEM} = (0.005139 \cdot \lambda - 0.00326) \cdot \exp(1268 \cdot (1/303 - 1/T)) \quad (3.10)$$

$$\sigma_{SO} = 3.34 \cdot 10^4 + \exp(-10300/T) \quad (3.11)$$

$$(3.12)$$

R(T) bestimmen?

Diffusionsüberspannung Für PEM und Alk:

$$U_{Diff} = -R \cdot T / (z \cdot F) \cdot \log(1 - i/i_{max}) \quad (3.13)$$

Modellierung der Thermodynamik

Annahmen: stationär, T(Betrieb) = T(Austritt), i.G. u. i.Flüssigkeiten

$Q > 0$ (Wärmeüberschuss) (weil bei $i > 0 \rightarrow U_{rev} > U_{tn}$ d.h. thermische Energie durch Verlustmech.)

Für PEM und Alk:

$$dU/dt = \dot{n}(h_{ein} - h_{aus}) + P_e l - \dot{Q} \quad (3.14)$$

$$0 = \dot{n}_{H_2O,in} \cdot c_{p,H_2O} \cdot (T_{H_2O,in} - T) - I \cdot (U_{Zell} - U_{tn}) - \dot{Q} \quad (3.15)$$

Für SOEC, Wasser gasförmig -> i.G.

3.1.2 Modellierung der Brennstoffzelle

-für mein Modell gewählte Gleichungen

3.2 Entwicklung von Energiesystem-Konzepten

-Bewertungskriterien ausarbeiten

-Systemrandbedingungen festlegen

(H-Bedarf, Input-Temperaturen, Wärmebedarf, Stromkosten...)

-Konzepte entwickeln

-Festlegen von Parametern für Elektrolyseur, Brennstoffzelle usw. für die Simulation (Welche Leistungsklasse etc.)

4 Anwendung

4.1 Modelle der Wasserstoffkomponenten

4.1.1 Modellierung des Alkalischen Elektrolyseurs

-Gewählte Parameter und Annahmen für die Simulation aufführen und begründen
(Membrandicke, Λ usw., Temperaturführung;)

$T_{\min}=20^{\circ}\text{C}$; $\rightarrow 50-60^{\circ}\text{C}$ normal; Wahl von T_{\max} !

$A \cdot Z$ ellanzahl aus n_{\max} und i_{\max} ableiten

Alkalischer Elektrolyseur:

-20 % NaOH.

- $n_{\max}\text{O}_2 = 18,2 \text{ Liter/Stunde}$

- $P_{\text{el-ges-max}} = 108 \text{ kW}$

- $I_{\max} = 165 \text{ A}$

-dicke: 100-200 μm ??

Thermische Kapazität in Elektrolyseur Modelica

\rightarrow Man könnte C_p über die Leistung skalieren

4.1.2 Modellierung der Brennstoffzelle

-Gewählte Parameter und Annahmen für die Simulation aufführen und begründen
(Membrandicke, Λ usw., Temperaturführung;)

4.2 Entwicklung von Energiesystem-Konzepten

-Systemrandbedingungen festlegen

(H-Bedarf, Input-Temperaturen, Wärmebedarf, Stromkosten...)

-Festlegen von Parametern für Elektrolyseur, Brennstoffzelle usw. für die Simulation (Welche Leistungsklasse etc.)

5 Präsentation und Diskussion der Simulationsergebnisse

5.1 Validierung der Komponentenmodelle

5.1.1 Elektrolyseur

- Vgl. der Polarisationskurven mit Literaturdaten
- ggf auf Dynamik eingehen
- Stärken und Schwächen des Modells benennen

5.1.2 Brennstoffzelle

- Vgl. der Polarisationskurven mit Literaturdaten
- ggf auf Dynamik eingehen
- Stärken und Schwächen des Modells benennen

5.2 Systemkonzepte

5.2.1 Ergebnisse der Systemkonzept-Simulationen

- Vorstellung der Simulationsergebnisse

5.2.2 Diskussion der Simulationsergebnisse

- Bewertung und Vergleich der Konzepte
- Stärken und Schwächen sowie Verbesserungsmöglichkeiten herausarbeiten

6 Erkenntnisse

6.1 Erkenntnisse zur Modellierung der Wasserstoffkomponenten

-Zusammenfassung der Ergebnisse
(Modellbewertung mit Schwächen u. Stärken; Vergleich der Konzepte)

6.2 Erkenntnisse zur Simulation der Systemkonzepte

-Ausblick aus Diskussion zusammenfassen
(Verbesserungspotentiale des Modells; mögliche Änderungen der Konzepte)

Literaturverzeichnis

- 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>.
- 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/f6gzxj. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0360319914019120>.
- 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/>.
- 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>.
- 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.
- 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>.
- 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.
- S. A. Grigoriev, V. I. Porembskiy, S. V. Korobtsev, V. N. Fateev, F. Auprêtre, and P. Millet. High-pressure PEM water electrolysis and corresponding safety issues. *International journal of hydrogen energy*, 36(3):2721–2728, 2011. doi: 10/ctvxzt. Publisher: Elsevier.

- 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>.
- Jan Hauth. Grey-Box Modelling for Nonlinear Systems. 2008. URL <https://kluedo.ub.uni-kl.de/frontdoor/index/index/docId/2045>.
- A. O. Isenberg. Energy conversion via solid oxide electrolyte electrochemical cells at high temperatures. *Solid State Ionics*, 3-4:431–437, August 1981. ISSN 0167-2738. doi: 10/cs8rrj. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0167273881901272>.
- 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.
- 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>.
- 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.
- 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>.
- 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>.
- 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>.
- Peter Tabeling. *Softwaresysteme und ihre Modellierung: Grundlagen, Methoden und Techniken*. Springer-Verlag, January 2006. ISBN 978-3-540-29276-0. Google-Books-ID: t4ouBAAAQBAJ.
- 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.
- 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.
- 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>.
- 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.

Anhang

wird hier der gesamte Code abgebildet??

Eigenständigkeitserklärung

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

Aachen, 7. April 2021

Tobias Jonathan Boschmann