

Schlussbericht, 26. Juli 2004

# Projekt

## Numerische Modellierung von PE-Brennstoffzellen mit FE Methode

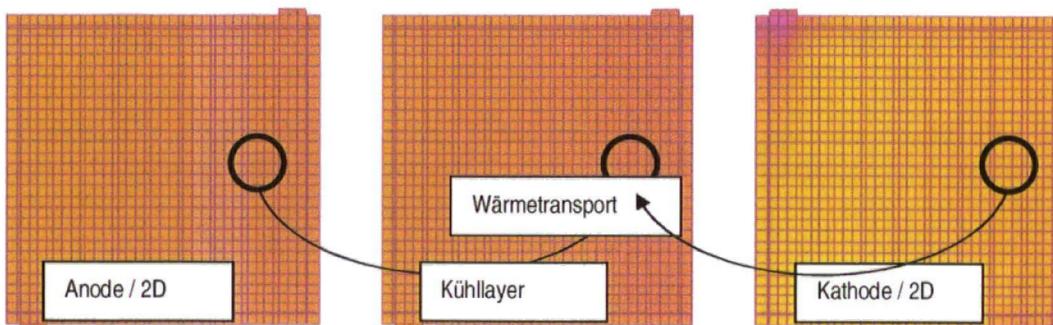
Autor und Koautoren	Dr. F. Büchi <sup>1)</sup> Prof. Dr. M. Roos <sup>2)</sup>
beauftragte Institution	<sup>1)</sup> PSI, Paul Scherrer Institut, Labor für Elektrochemie <sup>2)</sup> ZHW, Zürcher Hochschule Winterthur, CCP Center for Computational Physics
Adresse	<sup>1)</sup> 5232 Villigen PSI, <sup>2)</sup> Wildbachstrasse 21, 8401 Winterthur
Telefon, E-mail, Internetadresse	<sup>1)</sup> 056 310 24 11, <a href="mailto:felix.buechi@psi.ch">felix.buechi@psi.ch</a> , <a href="http://www.psi.ch">www.psi.ch</a> <sup>2)</sup> 052 267 77 97, <a href="mailto:markus.roos@zhwin.ch">markus.roos@zhwin.ch</a> , <a href="http://www.zhwin.ch">www.zhwin.ch</a>
BFE Projekt-/Vertrag-Nummer	100366/150456
Dauer des Projekts (von – bis)	1.10.03 – 30.4.04

### Zusammenfassung:

Die Wärmegeneration und -transport wurden in den transversalen 1 D Ansatz aus dem 1+1 D Modell von Freunberger implementiert. Dieser Ansatz wurde in der FE Umgebung von NMSESES verwendet um die jeweils in 2D ausgeführten Ebenen der Anode und Kathode zu koppeln, zwischen welchen eine weitere 2D Kühlsschicht simuliert werden kann.

Dieses Konzept des 2+1 D-Modells erlaubt die Simulation von (technischen) Zellen mit deutlich kleinerem Rechenaufwand als dies mit 3D Modellen der Fall ist. Dies öffnet Modellmöglichkeiten (Parameterstudien mit technischen Zellen, Mehrzellenstapel) welche bisher nicht möglich waren, und daher auch international grosse Beachtung finden können.

Die Umsetzung im gekoppelten 2+1 D Finite-Element Modell ist noch nicht abgeschlossen, jedoch wurden alle wichtigen Simulationsaspekte dafür einzeln demonstriert. Im nächsten Schritt sind diese zu integrieren, die Kinderkrankheiten des Modells zu eliminieren, die Robustheit der Numerik zu steigern und Validierungsmessungen durchzuführen.



## 1 Projektziele

Der Wasserhaushalt in Polymerelektrolyt Brennstoffzellen (PEFC) ist einer der wichtigsten Parameter beim Einsatz heute bereitstehender Materialien. Die beiden gegenläufigen Prozesse, das Austrocknen der Membran beim Betrieb mit zu trockenem Oxidationsmittel (Luft oder Sauerstoff), resp. das Fluten der porösen Schicht und/oder des Flussfeldes mit entstehendem Wasser reduzieren den Wirkungsgrad heutiger PEFC. Es existiert meist nur ein schmaler Parameterbereich für effizienten Betrieb, welcher zudem empfindlich auf äußere Einflüsse, wie Laständerungen, Temperaturvariationen, etc. reagiert und die Regelung von PEFC-Stapeln aufwändig macht.

Um ein besseres Verständnis dieses Teilprozesses zu erreichen, wird ein numerisches Modell des Wassertransports solcher Zellen erarbeitet. Das übergeordnete Ziel ist die Integration des 1+1-D Modells von Freunberger in den Rahmen von NM SESES so, dass die freie Gestaltung von Flussfeldern, die Integration von nicht-isothermen Prozessen und die Verfeinerungen der Wechselwirkungsmodelle ermöglicht wird.

Dazu ist einerseits zur grundlegenden Abschätzung der Resultate die Integration eines Temperaturprofils in das 1+1 Modell notwendig, andererseits neben dem Aufbereiten des Ist-Zustandes mit Mitteln von NM SESES auch eine moderate Anpassung des FE-Tools selber verbunden, da heute noch nicht alle notwendigen Wechselwirkungstypen auf User-Ebene verfügbar sind.

Erwartetes Ergebnis:

Numerisches Modell, welches die Stromdichte-, Partialdruck- und Temperaturverteilung in einer Zelle technischer Größe berechnen.

## 2 Durchgeführte Arbeiten und erreichte Ergebnisse

### 2.1 Analyse der 1D-Wärmegeneration und –leitung

Als Grundlage zur Berechnung der Temperaturverteilung müssen die thermischen Quellen und Senken sowie die Leitfähigkeiten der Materialien bekannt sein. Es wurde deshalb ein 1D-Wärmetransportmodell zur Abschätzung der Temperaturverteilung im Zellquerschnitt erstellt.

Die Erhaltungsgleichungen für den Wärmetransport in der Brennstoffzelle werden von der Konvektions–Diffusions–Gleichung :

$$\nabla \rho \mathbf{u} C_p T - \nabla (k_{eff} \nabla T) = q \quad (1)$$

ausgehend für die einzelnen Domänen formuliert und nehmen folgende Form für den eindimensionalen Fall normal auf die Membran an:

$$k_c \frac{d^2 T}{dz^2} = \frac{j^2}{\sigma_c} \quad \text{solide Platte (2)}$$

$$\frac{k_c}{2} \frac{d^2 T}{dz^2} = \frac{j^2}{\sigma_c} + \alpha A(T - T_g) \quad \text{Kanäle (3)}$$

$$\left( \sum_{j=1}^3 \rho_{jg} w_{jg} C_{p,jg} + \rho_l w_l C_{p,l} \right) \frac{dT}{dz} - [(1-\varepsilon) k_e] \frac{d^2 T}{dz^2} = \frac{j^2}{(1-\varepsilon)\sigma_c} + q_{gl} \quad \text{Elektroden (4)}$$

$$\rho_l w_l C_{p,l} \frac{dT}{dz} - [\varepsilon k_l + (1-\varepsilon) k_m] \frac{d^2 T}{dz^2} = \frac{j^2}{\sigma_m} \quad \text{Membran (5)}$$

Hierin bezeichnet  $j/2/\sigma$  jeweils die Wärmequelle durch Stromfluss. In Gl. 3 ist die konvektive Wärmeübertragung an das Prozessgas in den Kanälen berücksichtigt und angenommen, dass die Stege die halbe Elektrodenfläche bedecken; in Gl. 4 ist die Wärmeleitung in Gas und Flüssigkeit gegenüber der im Kohlenstoff vernachlässigt. Der den Phasenwechsel in der Elektrode beschreibende Quellterm  $q_{gl}$  wurde in der Rechnung zum Vermeiden einer mit der lokalen Gastemperatur gekoppelten Rechnung durch Phasenwechsel an der Reaktionsschicht ersetzt.

Für alle zwischen 2 Kühlflussfeldern liegenden Domänen einer Einzelzelle (Bipolarplatten, Kanalstruktur, Gasdiffusions-elektroden, Membran) wurde also ein stationärer Wärmetransport angesetzt und eindimensional gelöst. Hierbei wurden die elektrochemischen Reaktionen, Joule'sche Wärme, Phasenwechsel und Wärmeübertragung an die Gasströme berücksichtigt. Die Phasenübergänge von Wasser haben dabei einen prominenten Einfluss auf das Temperatur-Profil (siehe Abbildung1).

Tabelle 1: Bedeutung der Symbole

Symbol	Bedeutung	Symbol	Bedeutung
C <sub>p</sub>	Wärmekapazität für p = const., J/(mol·K)	u	Konvektionsgeschwindigkeit u = (u/v/w), m/s
F	Faradaykonstante, C/mol	ε	Porosität
k	Wärmeleitfähigkeit, W/(m·K)	η <sub>act</sub>	Aktivierungsüberspannung, V
j	Stromdichte, A/m <sup>2</sup>	ρ	Dichte, kg/m <sup>3</sup>
T	Temperatur, K	σ	Leitfähigkeit, S/m
q	Wärmestromdichte, W/m <sup>2</sup>	()g	gasförmig
α	Wärmeübergangskoeffizient, W/(m <sup>2</sup> K)	()l	füssig
ΔS	Reaktionsentropie, J/mol	()c	Kohlenstoff

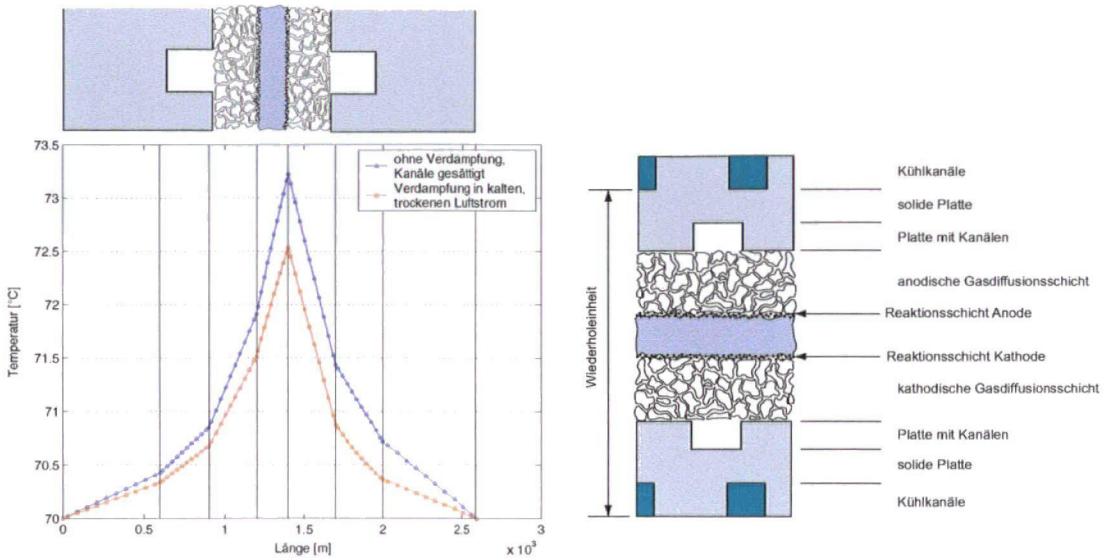


Abb. 1: Links: Einfluss der Gasteufe und Temperatur auf die Temperaturverteilung. Bei nicht gesättigter Luft senkt die Verdampfungswärme als zusätzliche Senke das Temperaturprofil. Rechts: Erläuterung des Schichtaufbaus in transversaler Richtung.

Die kathodische Reaktionswärme bestimmt als dominante Wärmequelle die Temperaturüberhöhung an der Kathode. Das Temperaturprofil ist deshalb in transversaler Richtung stark von der Stromdichte abhängig (siehe Abbildung 2).

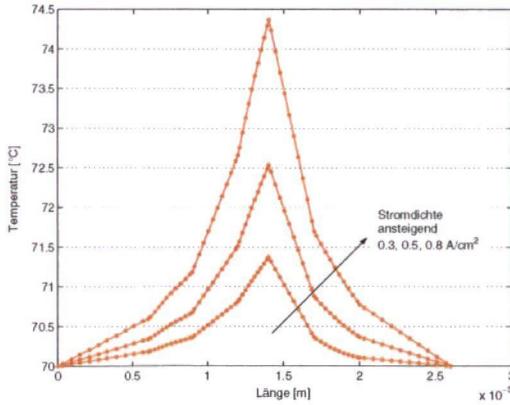


Abb. 2: Abhängigkeit der transversalen Temperaturüberhöhung von der lokalen Stromdichte.

Die 1D-Analyse dient als Grundlage zur Unsetzung des Wärmegeneration und -leitungsverhaltens der gesamten Zelle. Verschiedene Faktoren, unter anderem die absolute Temperatur, bestimmen die Stromdichte und dadurch die Wärme-produktion entlang eines Kanals in der zweiten Dimension.

## 2.2 Analyse der Temperatureinflusses im 1+1 D-Modell

Der am PSI entwickelte 1+1 D Modellansatz [1] welcher sehr gut zur Berechnung einfacher, linearer Zellgeometrien entlang des Kanals geeignet ist, und bisher für isotherme Berechnungen vorhanden war wurde, basierend auf der in Abschnitt 2.1. beschriebenen Analyse von Wärmeegeneration und –Transport, mit den Temperaturwechselwirkungen eines parallel zum Kanal fliessenden Kühlmittels erweitert. Ähnliche „low-dimesion“ Modellansätze sind in der Literatur beschrieben [2 - 4] und zeigen, dass mit diesem Vorgehen wichtige Informationen über die Eigenschaften von Zellen erhalten werden können.

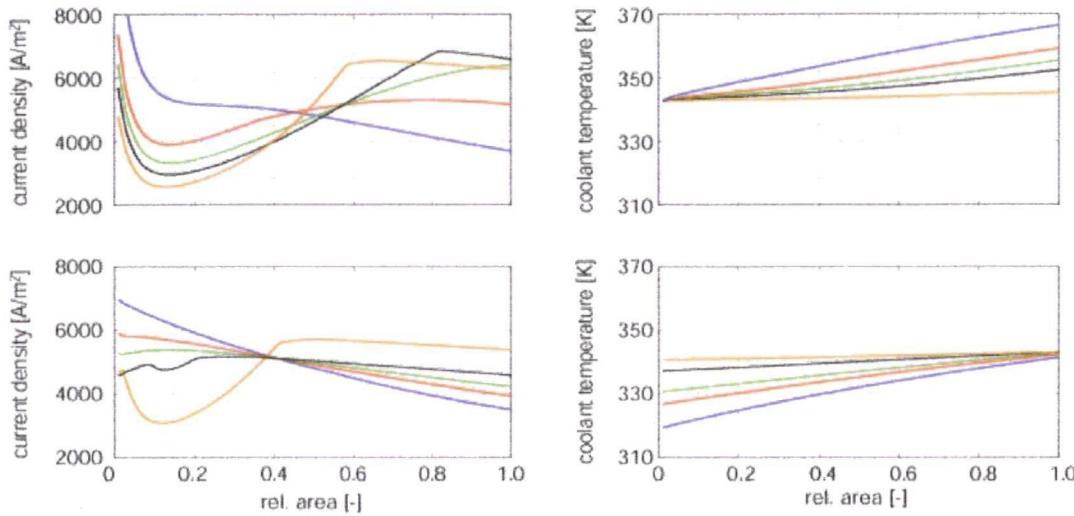


Abb. 3: Einfluss der Kühlstrategie auf die Stromdichteverteilung. Gase und Kühlmittel fliessen von links nach rechts. Luft Taupunkt 50 °C, Wasserstoff 70 °C, Zelltemperatur ca. 70 °C (siehe Temperaturverteilung); Links: Stromdichteverteilung für eine mittlere Stromdichte von 0.5 A/cm<sup>2</sup>; rechts: Temperatur des parallel fliessenden Kühlmittels. Alle Kurvenscharen für Kühlmittelflüsse von 0.03, 0.05, 0.06, 0.08, 0.3 kg/m<sup>2</sup> s.

Abbildung 3 zeigt, dass die Kühlstrategie, d.h. Regulierung des Kühlmittelflusses auf Zellein- oder Ausgang, sowie die Rate des Kühlmittelflusses einen prominenten Einfluss auf die Stromdichteverteilung haben. Daraus ist ersichtlich, dass der Thermohaushalt einen wesentlichen Einfluss auf die Stromdichteverteilung ausübt wie dies auch andere Modellrechnungen zeigen [5]. Ein gezielter Temperaturgradient über die Zelle kann zu einem Ausgleich der Inhomogenitäten in der Stromdichteverteilung führen.

## 2.3 Umsetzung des Modells in NM SESES

Die natürliche Erweiterung des 1+1 D-Modells ist ein 2+1 D-Modell, welches die Transportphänomene in der Zellebene (2D) getrennt für das Kathoden- und Anodenflussfeld beschreibt, gekoppelt durch die elektrochemischen Effekte in der dazu senkrechten Richtung (1D), welche ebenfalls via Diskretisierung numerisch behandelt werden. In Analogie dazu kann zusätzlich ein wasser-durchflossener KühlLayer als Ebene zwischen dem Kathoden- und Anodenbereich simuliert werden. Bei der Umsetzung waren Herausforderungen in Bezug auf den Simulationsansatz zu meistern:

- Kopplung der Anoden- und Kathodendomänen via 1D Interaktion
- Effiziente Implementierung der 1D Interaktion
- Konvergenzbeschleunigung der gesamten 2+1D-Simulation
- Bestimmung effektiver Parameter für in-plane Transportphänomene, wie Wärmeleitung, Strömung und Diffusion

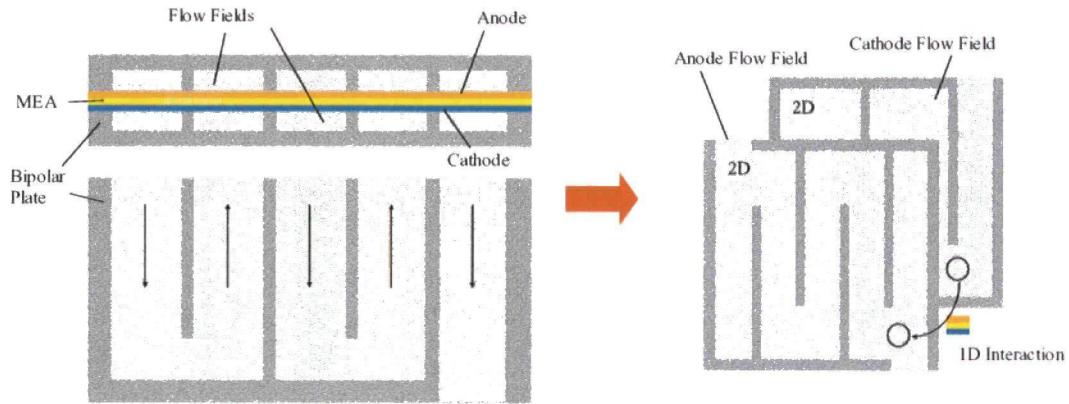


Abb. 4: Aufteilung einer PEFC Zelle (links in Auf- und Seitenriss) in zwei separate 2D Domänen (rechts), welche über die MEA gekoppelt sind.

### Modellierung der Reaktionen

Das FE-Modell besteht aus zwei getrennten 2D-Domänen, dargestellt in den Abb. 4 und 5. Die beiden Teile sind über die elektrochemische Reaktion miteinander gekoppelt, sowie durch Wasserdiffusion durch die Membrane aufgrund unterschiedlicher Partialdrucke im Anoden-, resp. im Kathodenflussfeld. Im Modell werden die Transportprozesse in den Flussfeldern mit Hilfe der FE-Methode in 2D simuliert, die Kopplung erfolgt via nichtlokale Wechselwirkung, beschrieben durch benutzerdefinierte chemische Reaktionen. Dazu wird z.B. in der Anodendomäne Wasserstoff mit der durch die elektrochemische Reaktion vorgegebenen, örtlich variablen Rate konsumiert und entsprechend auf der Kathode Wasser(dampf) erzeugt, samt Konsumation der stöchiometrisch korrekten Menge Sauerstoff. Analog dazu wird auch der passive Wasserdurchgang beschrieben, wiederum als Erzeugungs- und Konsumationsrate entsprechend der Diffusionsrate. Diese Teilprozesse wiederum sind gekoppelt mit dem elektroosmotischen Wasserdrag.

Nach Spezifikation der Reaktionsraten, welche von allen physikalischen Feldern in Anoden- und Kathodendomäne abhängen dürfen, sowie der Transportkoeffizienten können die 2D Prozesse mit Hilfe der FE-Methode in NM SESES [6] simuliert werden.

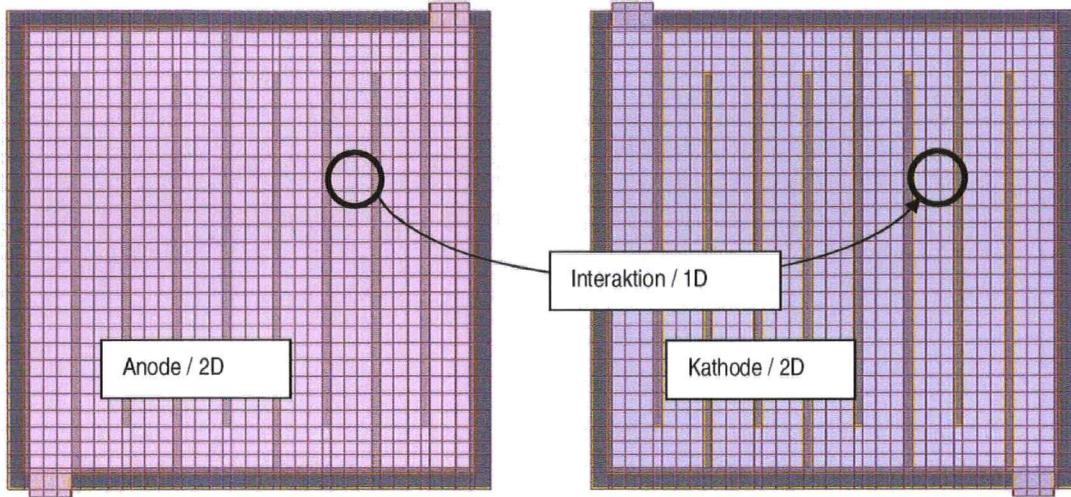


Abb. 5: Mäandermodell der PEFC-Zelle in NM SESES: die Anode (links) ist mit der Kathode (rechts) über die elektro-chemische Wechselwirkung gekoppelt.

### 1D-Wechselwirkung als C-Programm

Im Prinzip könnten die Reaktionsraten als Funktionen wie z.B.

$$R_{\text{elchem}} = F(x_{H_2O}^a, x_{H_2O}^c, x_{H_2}^a, x_{O_2}^c, T^a, T^b, P, \dots) \quad (6)$$

direkt in NM SESES durch den Benutzer spezifiziert werden (also ohne eigentliche C-Kodierung). Es ist aber so, dass aufgrund der sehr komplexen Verhältnisse einer PEFC-Zelle, keine befriedigende Parametrisierung, also kein geeigneter Funktionsausdruck existiert, welcher für den ganzen technisch nutzbaren Betriebsbereich diesen Zusammenhang analytisch ausdrückt. Genau wie im vorher diskutierten 1+1 D-Ansatz wird diese Reaktionsrate aus einem separaten 1D Transportmodell numerisch berechnet. Um den schon bestehenden Ansatz zu verallgemeinern, insbesondere um zusätzliche Effekte später hinzufügen zu können, wurde ein allgemeines 1D-Transportmodell mit potentiell beliebig vielen transportierten physikalischen Größen erstellt. So sind auch der Diffusionsprozess von Gaskomponenten und die Zweiphasenströmung von Wasser-Wasserdampf [4] in Reichweite.

Das Transportmodell, das in der gegenwärtigen Fassung vorliegt, ist im Detail in [7] dargestellt und als Anhang diesem Schussbericht beigefügt. Es erlaubt die Charakterisierung des Membranmaterials mit Hilfe empirisch bestimmter Materialparameter. Spezielle erwähnenswert – weil für effizientes Rechnen wichtig – ist dessen numerische Implementierung. Das System von gewöhnlichen Differenzialgleichungen 2. Ordnung für die Konzentrationen der chemischen Stoffe, der Temperatur und des elektrischen Potentials muss als Randwertproblem gelöst werden, weil aus der übergeordneten 2D-Rechnung die Stoffkonzentrationen, Temperaturen, etc. je auf der Anoden- und Kathodenseite vorliegen. Gesucht sind die sich einstellenden Stromdichten (für Stoffe, Ladung und therm. Energie), wiederum auf beiden Rändern, welche dann zur oben erwähnten Reaktionsraten, z.B. Gl. 6 führen. Dabei führen die Erhaltungssätze (z.B. Massenerhaltung, Stöchiometrie) zu Beziehungen unter den gesuchten Größen, welche zur Effizienzsteigerung im Verfahren berücksichtigt werden. Das Randwertproblem in 1D wird mit der sogenannten Shooting Methode [8] gelöst, ein iteratives Verfahren, welches eine geschätzte Lösung numerisch verbessert, bis Konvergenz erreicht ist. Zur Beschleunigung dieses Ansatzes wurde er mit dem Newton-Raphson-Verfahren gekoppelt, welches meist zu quadratischer Konvergenz führt und so Effizienz garantiert.

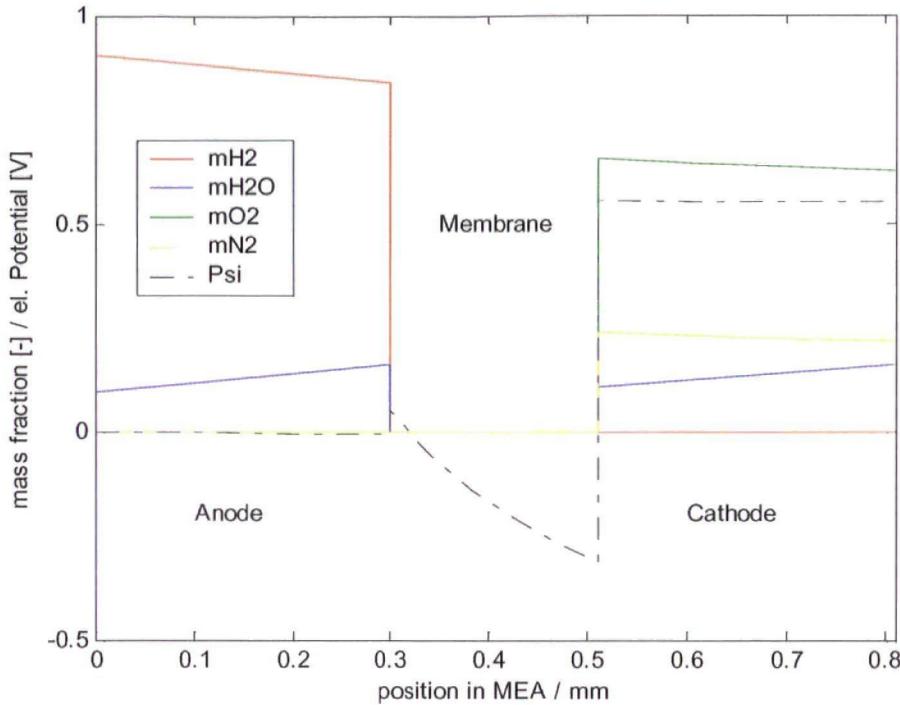


Abb 6: Das C-Programm der 1D-Wechselwirkung ermöglicht eine Ausgabe der Feldverteilung über den Querschnitt der MEA, bestehend aus Anode (samt Diffusionslayer), Reaktionszone, Membran und Kathode.

Das numerische Verfahren ist in C programmiert und kann als so genannte DLL (Dynamic Link Library) zusammen mit dem FE-Tool benutzt werden. Ein Ingenieur kann das NM SESES Modell einer PEFC-Zelle schliesslich anwenden, ohne die Details der C-Implementierung zu kennen, ein grosser Vorteil in der Praxis. Der Algorithmus ist so schnell, dass ein einzelner 1D-Wechselwirkungspunkt in wenigen Mikrosekunden CPU-Zeit abgearbeitet werden kann. Dies gelang mit verschiedenen Beschleunigungsverfahren, z.B. Zwischenspeicherung von vorangegangenen Lösungswerten, Wiederverwendung von Newton-Raphson-Ableitungsmatrizen [8]. Da diese Interaktionsberechnung für jedes finite Element immer wieder von neuem durchgeführt werden muss, ist diese Optimierung von entscheidender Wichtigkeit.

Neben seinen Möglichkeiten in Bezug auf Genauigkeit und Einbezug weiterer Transportprozesse liefert das 1D-Programm auch Information zum inneren Zustand der MEA. In Abb. 6 ist der Verlauf der Konzentrationen (Massenbrüche) und des el. Potentials für einen Ort nahe dem Brennstoffeinlass dargestellt. Durch Inspektion dieser Feldverläufe ist man in der Lage, die Funktion einer Zelle sowohl in Bezug auf den eigentlichen PEM Prozess (1D) als auch auf das Gesamtverhalten (2D-Transport in den Flussfeldern) zu untersuchen.

### Vereinfachtes 1D-Modell in NM SESES

Zum effizienteren Erstellen von NM SESES Modellen mit neuen Flussfeldstrukturen, alternativen Kühlkonzepten, etc. wurde neben dem 1D-Interaktionsmodell auch ein vereinfachtes Modell innerhalb von NM SESES auf der Basis approximativer, analytischer Ratenausdrücke entwickelt. Dieses kann aus den oben genannten Gründen nicht für alle sinnvollen Betriebsbedingungen Anspruch auf Gültigkeit erheben, ist aber wegen der kürzeren Rechenzeiten in der Lage, schnell einen Überblick über die das Zellenverhalten zu liefern. Zudem kann es benutzt werden, um ein Modell für den Einsatz mit der aufwändigeren C-Implementation vorzubereiten. Auch dieser Ansatz berücksichtigt alle wichtigen Effekte (Elektrochemie, Drag und Wasserdiffusion in der MEA).

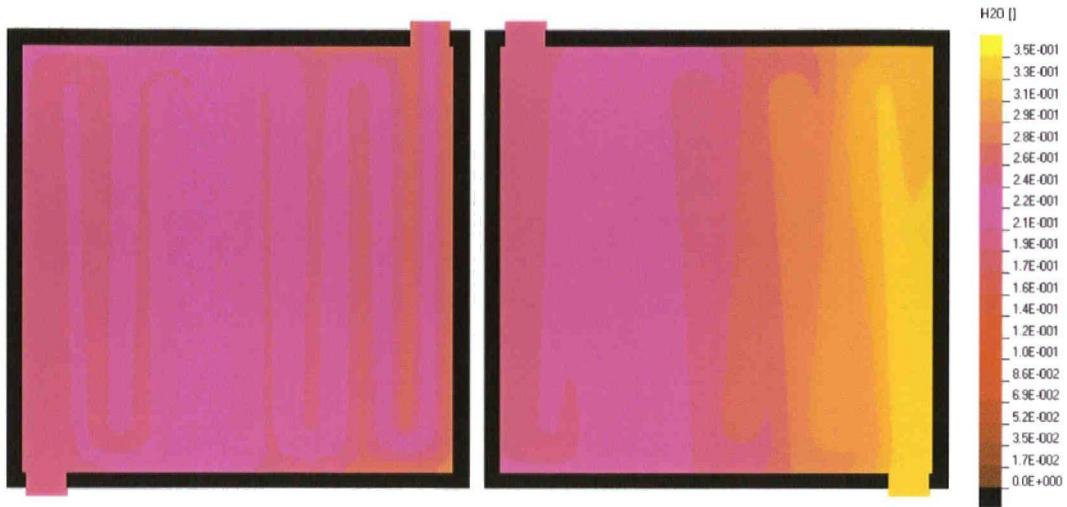


Abb 7: Wasserkonzentrationsverteilung in Anode (links) und Kathode (rechts)

### Simulationsalgorithmus

Die Modellierung in 2+1 D-Modellen unterscheidet sich von gewöhnlichen Systemen in 2D durch das Vorhandensein nichtlokaler Wechselwirkungstermen, Abb. 5. Diese koppelt die Felder an nichtlokalen Orten innerhalb der Modellierungsdomäne und führt zu Konvergenzprobleme, falls die Kopplungsterme stark und / oder nichtlinear sind. Beides trifft für die PEFC Zelle zu, so dass auch in dieser Hinsicht knifflige Probleme zu lösen waren. Das Programmpaket NM SESES erlaubt die freie Gruppierung der physikalischen Felder in verschiedene Gruppen im Lösungsalgorithmus. Damit resultierte ein massgeschneidertes Gauss-Seidel-Verfahren, kombiniert mit der Methode der Unterrelaxation, welches sowohl robust als auch genügend effizient ist. Die Felder Temperatur, Konzentrationen, Drucke, Geschwindigkeiten und das el. Potential werden in der 2D-Rechnung abwechselnd im Anoden- und Kathodenraum berechnet. Abbildung 7 zeigt ein typisches Resultat, die Wasserkonzentration (als Molenbruch) in Anode und Kathode für eine Testzelle.

### Effektive Transportparameter

Um die parallelen Kanäle der Bipolarplatte im 2D Modell als poröse Struktur simulieren zu können, muss deren Permeabilität als effektiver Parameter anstelle der eigentlichen Geometrie spezifiziert werden. Diese Größe wird berechnet, indem die 3D-Struktur eines repetitiven Elements in NM SESES modelliert wird. Das Modell liefert anschliessend die effektiven Parameter durch Volume Averaging [9]. Mit demselben Ansatz werden auch effektive Parameter für den Wärmetransport ermittelt. Dies ist von Bedeutung, da aufgrund der parallelen Kanäle die spezifische Wärmeleitfähigkeit entlang der Kanäle bedeutend grösser ist als in Querrichtung. Aufgrund der Erfahrungen mit SOFC-Brennstoffzellen ist dieses Vorgehen unproblematisch, wobei aber auf eine Automatisierung der Rechenschritte zur Reduktion von Fehlern geachtet werden muss. Ein 3D-Modell für die Berechnung effektiver Parameter für ein Flussfeld ist in Figur 8 dargestellt.

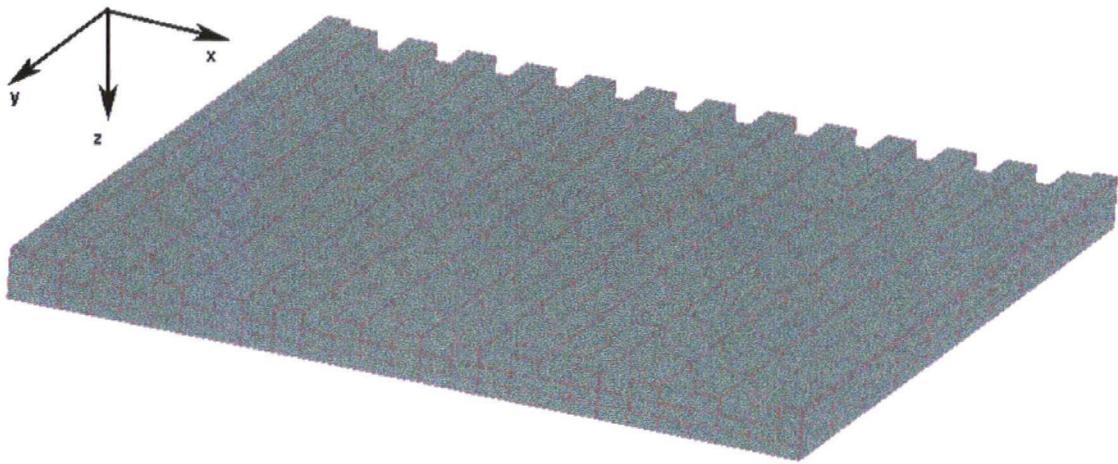


Abb. 8: 3D-Modell eines repetitiven Ausschnitts der Bipolarplattenstruktur. Das Modell wird verwendet, um effektive Parameter für Strömung und Wärmeleitung zu liefern, welche anschliessend ins 2D-Modell eingefügt werden.

### KühlLayerstrukturen

Der 2+1 D-Ansatz für PEFC-Zellen, d.h. die Aufteilung in Anoden- und Kathodendomäne kann verallgemeinert werden und auch einen KühlLayer mit einschliessen (Abb. 9). Tatsächlich ist der Einbau dieser Kühlung notwendig, damit überhaupt realistische, nicht-isotherme Simulationen möglich werden.

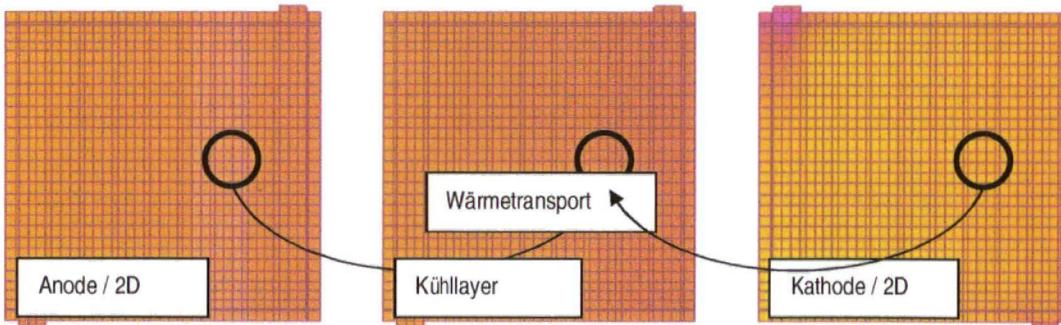


Abb. 9: 2+1D-Ansatz zur Modellierung eines Kühlayers: Wärmetransport beschrieben durch korrespondierende Wärmequell- und senkrate. Die Graphik zeigt die Temperaturverteilung (je für den jeweiligen Layer gemittelt): die Kathode erwärmt sich stärker, da bei der elektrochemischen Reaktion der grösste Teil der Verlustwärme dort freigesetzt wird. (Temperaturbereich: 353-357 K)

Das Kühlfeld, welches von Wasser in einer quasi-porösen Struktur durchflossen wird, ist über einen Wärmequellenterm mit dem Anoden- und Kathodenbereich verbunden. Dieser Quellterm hängt von den korrespondierenden Temperaturen in Anode, Kathode und KühlLayer ab, sowie von einem Übergangsfaktor. Dieser wird wiederum mit Hilfe der Volume-Averaging-Methode aus einem separaten 3D-Modell berechnet. Im vorliegenden Fall wurde dieser Faktor jedoch geschätzt. Die Auswirkungen des Kühlfeldes sind enorm. Selbst bei kleinen Übergangskoeffizienten wird die Temperaturverteilung sehr homogen, die Temperaturunterschiede sind im Bereich von 5-10 K, je nach Stromdichte.

### Aktueller Stand

Das Ziel, ein Simulationstool zu schaffen, welches in komfortabler Weise erlaubt, Messungen an realen Zellen und sogar Stapeln numerisch nachzuvollziehen, wurde noch nicht vollständig erreicht. Alle wichtigen Simulationsaspekte dafür wurden jedoch einzeln demonstriert. Im nächsten Schritt sind diese zu integrieren, die Kinderkrankheiten des Modells zu eliminieren und die Robustheit der Numerik zu steigern.

## 3 Nationale Zusammenarbeit

Das Projekt ist eine Zusammenarbeit zwischen dem, Paul Scherrer Institut, Labor für Elektrochemie (PSI) und der Zürcher Hochschule Winterthur, CCP Center for Computational Physics (ZHW).

## 4 Internationale Zusammenarbeit

Im Bereich der Modellierung sind folgende Internationale Kontakte vorhanden:

Prof. Lindbergh, KTH, Stockholm, Schweden

Prof. van Zee, Dept. of Chem. Engineering, University of South Carolina, USA

## 5 Bewertung 2003/04 und Ausblick 2004/05

Die durchgeföhrten Arbeiten mit der Implementierung von Wärmegeneration und –transport in den transversalen 1 D Ansatz und die Umsetzung im gekoppelten 2+1 D Finite-Element Modell in NMSESES. Trotz des relativ bescheidenen Umfanges des Projektes konnten wichtige Fortschritte erzielt werden und zeigen dass das gewählte Konzept richtig ist. Alle wichtigen Simulationsaspekte wurden einzeln demonstriert, und damit die wichtige Basis für eine flexible Modellumgebung geschaffen.

Der mit dem 2+1D Konzept erforderliche numerische Aufwand ist deutlich geringer als dies für 3D-Modelle der Fall ist. Es erscheint daher möglich mit diesem Ansatz z.B. Parameter-Studien technischer Zellen mit vernünftigem Rechenaufwand durchzuführen. Solche Daten sind für die Entwicklung von höchstem Interesse und daher auch ein prioritärer Wunsch von Industriepartnern.

Des weiteren wird so über eine Erweiterung des Modells die Tür zur Berechnung von Mehrzellenstapeln geöffnet. Dies ist bisher, aufgrund der Rechenintensität der 3D-Modelle, ein weltweit noch nicht erreichtes Ziel.

Um die beschriebenen Möglichkeiten auszuschöpfen sind die folgenden nächsten Schritte notwendig:

- Elimination der Kinderkrankheiten
- Experimentelle Verifikation in ganzen Zellen
- Integration der Zweiphasenströmung innerhalb des 1D-Interaktions-Modells um bessere Übereinstimmung mit den experimentellen Bedingungen bei hohen Wasserdampfkonzentrationen zu erhalten
- Verbessertes experimentelles Verständnis der effektiven Transportparameter
- Automatisierung der Rechenmodelle, um eine engineeringtaugliche Simulationsumgebung zu realisieren

## 6 Referenzen

- [1] S.A. Freunberger, Diploma Thesis, Paul Scherrer Institut, Switzerland and TU Vienna, Austria (2002)
- [2] A.A. Kulikowski, *Electrochim. Acta*, 49, 617 (2004)
- [3] G.J.M. Janssen, *J. Electrochem. Soc.*, 148, A1313 (2001)
- [4] A.Z. Weber, J. Newman, *J. Electrochem. Soc.*, 151 (2) A326-A339 (2004)
- [5] N. Djilali, D. Lu, *Int. J. Therm. Sci.* 41, 49-40 (2002)
- [6] E. Anderheggen, J.G. Korvink, M. Roos, G. Sartoris, H.U. Schwarzenbach, NM SESES user manual, download at: [www.nmtec.ch](http://www.nmtec.ch) (2004)
- [7] M. Roos, PEM Interaction 1D, interner Bericht ZHW (2004), Anhang zu diesem Bericht
- [8] W.H. Press, S.A. Teukolsky, W.A. Vetterling, *Numerical Recipes in C*, Cambridge University Press (1993)
- [9] M. Roos, E. Batawi, U. Harnisch, Th. Hocker, Efficient simulation of fuel cell stacks with the volume averaging method, *J. Power Sources* 118, p. 86-95 (2003)