# Simulationskonzept für ein Brennstoffzellenfahrzeug

Clemens Moeser, Gangadhar Pothuraju, Oliver Hegen, Andreas Kötter
*Research & Innovation / Capgemini Engineering Deutschland S.A.S. & Co. KG*
Hein-Saß-Weg 30, 21129 Hamburg, Deutschland
andreas.koetter@capgemini.com

*Kurzfassung* – **Die PEM-Brennstoffzelle bietet für den Fahrzeug-Antrieb eine Alternative zum derzeitigen batterieelektrischen Antrieb. Durch den Einbau eines Brennstoffzellen-Stacks als zusätzliche Energiequelle kann die Größe der Batterie im Fahrzeug reduziert werden. Die Batterie dient in diesem Fall nur als Zwischenspeicher, unterstützend bei hohen dynamischen Lasten sowie für den Start des Brennstoffzellen-Stacks. Dies vermindert den Bedarf an kritischen Rohstoffen und die Lebensdauerproblematik. Die Energie für die Fortbewegung kommt aus dem Wasserstoff und damit aus der Brennstoffzelle. Durch das schnelle Betanken mit Wasserstoff eignet sich dieser Hybridantrieb auch für längere Strecken.**

**In dem öffentlich geförderten Projekt HZwo-DigiTwin wird dieses Antriebskonzept bestehend aus Brennstoffzellen-Stack und Batterie nachhaltig weiterentwickelt. Dafür steht die Brennstoffzellentestplattform HZwo-OSCar zur Verfügung. Parallel dazu werden mehrere Simulationsmodelle auf verschiedenen Ebenen entwickelt. Ziel ist neben Aufbau und Validierung der Digitalen Zwillinge die Darstellung von ersten Ergebnissen wie zum Beispiel Leistungskurve und $H_2$-Verbrauch. Durch den Einsatz Digitaler Zwillinge wird das Verhalten eines realen Systems in der digitalen Welt modelliert und dadurch der Zeit- und Kostenaufwand für den Technologieentwicklungsprozess reduziert.**

**Die Simulationsmodelle umfassen (i) die PEM-Brennstoffzelle, (ii) die Balance of plant (BOP) für den Brennstoffzellen-Stack, sowie (iii) den Antrieb des Demonstrators.**

**Eine einzelne Brennstoffzelle wird in einem 3D-CFD-Modell simuliert. Dieses ist in Aufwand und Größe limitiert, weshalb ein reduziertes 1D-Modell erstellt und mit dem 3D-CFD-Modell optimiert wird. Auf dessen Basis wird anschließend zusammen mit den BOP-Aggregaten und dem Antrieb ein Gesamtmodell des Brennstoffzellen-Elektrofahrzeugs (FCEV) aufgebaut.**

**Die entwickelten Simulationsmodelle bilden das Betriebsverhalten der Testplattform HZwo-OSCar ab und dienen als Grundlage für u.a. Lebensdaueruntersuchungen, klimatische Einflussfaktoren und Betriebsstrategien.**

***Stichworte – Engineering, Wasserstoff, Brennstoffzelle, Digitaler Zwilling, Simulation***

## NOMENKLATUR

| | |
|---|---|
| FC | Brennstoffzelle/engl. Fuel Cell |
| PEMFC | Protonenaustauschmembran-Brennstoffzelle / engl. Proton Exchange Membrane Fuel Cell |
| MEA | Membran-Elektroden-Anordnung / engl. Membrane Electrode Assembly |
| BPP | Bipolarplatte |
| GDL | Gasdiffusionsschicht / engl. Gas Diffusion Layer |
| MPL | Mikroporöse Schicht / engl. Microporous Layer |
| CL | Katalytische Schicht / engl. Catalytic Layer |
| BOP | Balance of plant |
| CFD | Numerische Strömungsmechanik Strömungsmechanik / engl. Computational Fluid Dynamics |
| FCEV | Brennstoffzellen-Elektrofahrzeug / engl. Fuel Cell Electric Vehicle |

## I. EINLEITUNG

Die deutsche Automobilindustrie befindet sich aktuell an einem Scheideweg. Durch die im EU-Klimaziel-Plan „Fit for 55“ formulierten Zielsetzungen müssen 55% der Treibhausgasemissionen bis zum Jahr 2030 gegenüber 1990 gesenkt werden [1]. Auch der Verkehrssektor, der im Jahr 2020 für rund 19,8% der Gesamtemissionen Deutschlands verantwortlich war (siehe ABBILDUNG *1*) muss sich im Zuge der Energiewende verändern [2].

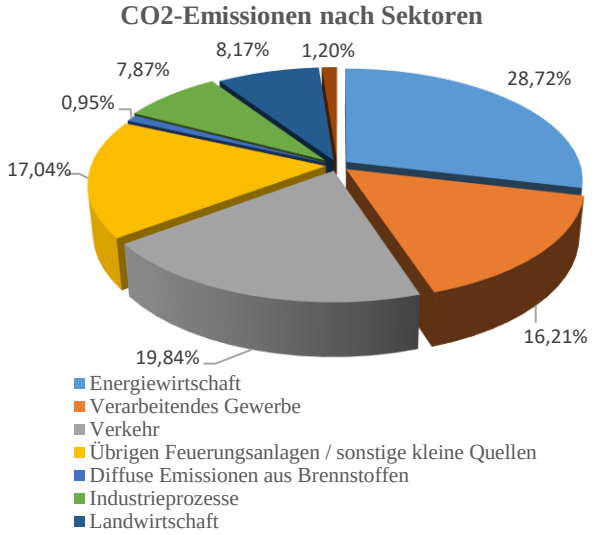


ABBILDUNG 1: $CO_2$-EMMISSIONEN IN DEUTSCHLAND NACH SEKTOREN IM JAHR 2020 [2].

DOI: 10.24405/15215

Neben der Elektromobilität gilt die Brennstoffzelle als vielversprechender Baustein, um eine Transformation zu einer nachhaltigen Mobilität zu gewährleisten. In ihr wird Wasserstoff, idealerweise grüner Wasserstoff, hergestellt auf Basis erneuerbarer Energien, mit Sauerstoff elektrochemisch umgesetzt [3, 4]. Dabei entsteht Wasser, Wärme und Strom, durch den z. B. ein Elektromotor angetrieben werden kann. Aufgrund der enormen Anforderungen an Flexibilität und kurzfristiger Leistungssteigerung in Fahrzeugen eignet sich dafür vor allem die Protonenaustauschmembran-Brennstoffzelle (PEMFC) [5]. Weitere Vorteile sind der feste Elektrolyt sowie die hohe Stromdichte. Jedoch reagiert die PEMFC sehr empfindlich auf bereits geringe Verschmutzungen, z. B. durch CO, $NH_3$ oder schwefelhaltigen Verbindungen. Weiterhin können extreme Einsatzbedingungen, z.B. starke dynamische Lasten, zu Degradationen und Lebensdauerminderungen führen [6, 7]. Deshalb ist für den nachhaltigen Einsatz der PEMFC in einem Fahrzeug eine optimierte Auslegung und Betriebsführung unerlässlich. Um diese zu erstellen, ist ein digitales Abbild des Brennstoffzellenfahrzeuges notwendig, für dessen Entwicklung und Auslegung Simulationstoolketten notwendig sind. Digitale Zwillinge beschreiben dabei als virtuelle Modelle einzelne Bauteile und Prozesse. Damit können sowohl Brennstoffzelle, BOP, als auch der Antriebsstrang in verschiedenen Einsatzbereichen nachgebildet werden.

Je nach Komplexität und Simulationsziel werden für die einzelnen Komponenten entsprechend geeignete Simulationsmodelle erstellt.

In einem ersten Schritt wird ein komplexes, analytisches 3D-Modell der PEMFC erstellt. Dieses beschreibt alle fundamentalen Prozesse, wie

- Elektrochemie
- Fluiddynamik und Diffusion
- Thermodynamik

Das Modell ist aufgrund seiner Komplexität sehr rechenintensiv und somit nicht geeignet für den Aufbau eines FC-Stacks oder für den Ausbau zu einem Antriebsstrangmodell.

Deshalb wird parallel ein, an Freiheitsgraden reduziertes, 1D-FC-Modell entwickelt, indem einzelne Parameter nicht berücksichtigt werden oder durch Tabellenwerte substituiert sind.

Dieses 1D-Modell ist die Basiskomponente für das BOP-Modell.

In ihm wird die singuläre PEMFC vervielfältigt und zu einem Stack verbunden. Anschließend erfolgt die Ergänzung mit für die Funktion notwendigen Nebenaggregaten sowie Versorgungs- und Entsorgungseinheiten. Für den Antriebsstrang werden zusätzliche Elemente wie Stromspeicher (Batterie), Stromumwandlung (DC-Konverter), Elektromotor und eine Last implementiert.

Eine schrittweise Übersicht der zu verwendenden Simulationsmodelle zeigt Abbildung 2.

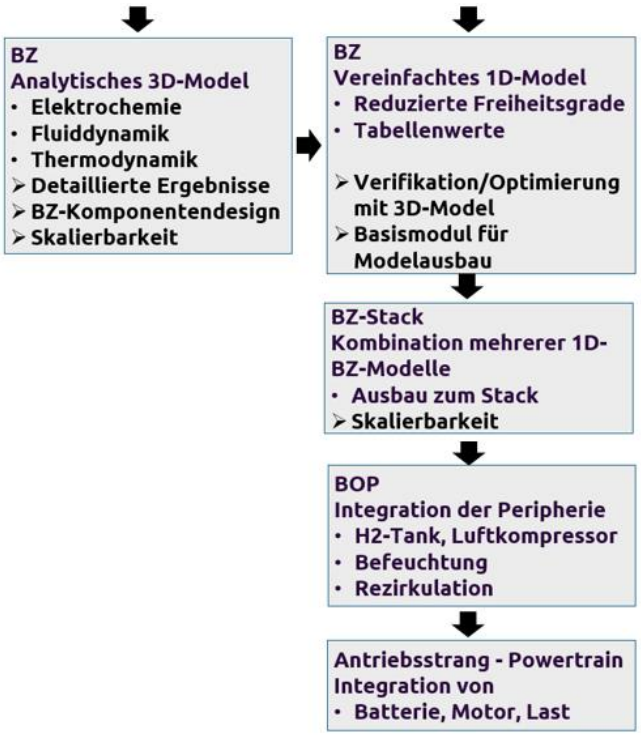


Abbildung 2: Übersicht der simulations-modelle.

## II. Brennstofzellen 3-D-Model

Für die Brennstoffzelle wird ein 3D Solid/Fluid Modell erstellt. Es ist besonders gut geeignet für die Auslegung des Designs der PEMFC sowie ihrer einzelnen Komponenten hinsichtlich

- Dimensionierung (Abmessungen Membran-Elektroden-Anordnung MEA, Gaskanäle, Kühlung)
- Material (Elektroden, Membrane, etc.)
- Strömungsbedingungen
- thermischem Verhalten und Kühlung

Das Modell beinhaltet neben der zentralen Membran, die folgenden Komponenten (jeweils für Kathode und Anode)

- Gasdiffusionsschicht (GDL)
- Mikroporöse Schicht (MPL)
- Katalytische Schicht (CL)
- Bipolarplatte (BPP)
- Kühlkanal

Die Geometrie des Modells wird mit ANSYS SpaceClaim® aufgebaut. Enthalten sind die Strukturelemente, Fluidkanäle, Kühlung sowie alle Kopplungen.

Anschließend wird mit ANSYS Mechanical® ein Mesh erstellt. Das Model wird auf ein skalierbares Teilsegment begrenzt, um den Simulationsaufwand und die Berechnungszeiten zu limitieren, da es zellintensiv (hohe Anzahl an Elementen) sowie rechenintensiv (hohe Anzahl an zu lösenden Gleichungen) ist. Der Modellierungsaufwand ist abhängig von der Komplexität der Gasführung in den BPP, der Implementierung der Kühlung, sowie der notwendigen hohen Auflösung in der MEA bei sehr geringen Abmessungen. In der MEA erfolgt die Simulation der Elektrochemie. Die dafür

notwendige Auflösung resultiert in einer sehr hohen Anzahl an Elementen.

Mit dem erstellten Modell kann die PEMFC mit allen Parametern simuliert werden. Abgebildet werden

- Elektrochemie - Stromherstellung durch Oxidation von kontinuierlich zugeführtem Wasserstoff
- Fluiddynamik der Gase $H_2$ und Luft
- Thermalhaushalt – Kühlung der PEMFC und Stabilisierung der Arbeitstemperatur
- Geometrie

Ein generisches Bild der Brennstoffzelle zeigt ABBILDUNG 3.

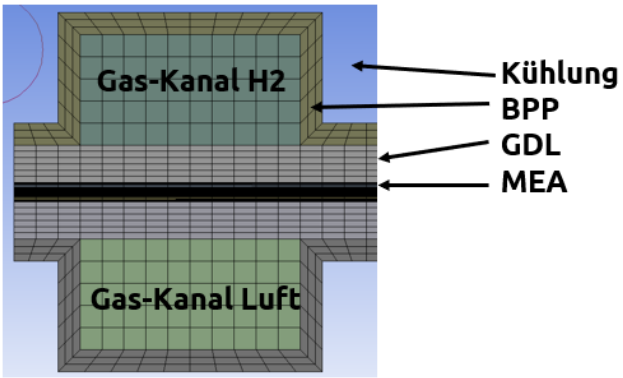


ABBILDUNG 3: GENERISCHE FE-MODEL EINER PEMFC

Die Simulation erfolgt mit ANSYS FLUENT® nach der Finit-Volume Methode. Als Ergebnis wird die Leistung der PEMFC aus Spannung und Stromstärke in eine Polarisationskurve ermittelt, exemplarisch in ABBILDUNG 4 dargestellt.

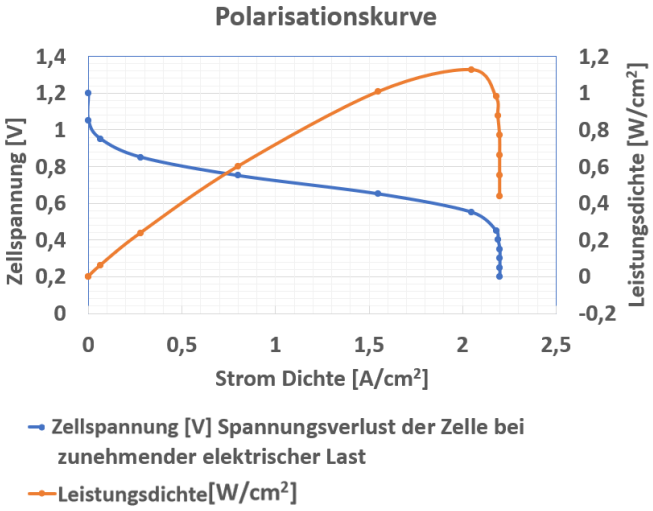


ABBILDUNG 4: POLARISATIONSKURVE EINER PEMFC ERMITTELT MIT EINEM 3D MODEL

## III. PEMFC 1D-SIMULINK-SIMSCAPE MODELL

Auf Basis dieser detaillierten Abbildung der PEMFC wird ein 1D-Simscape-Modell entwickelt. Parameter wie Fluiddynamik oder einzelne geometrische Dimensionierungen werden in diesem nicht berücksichtigt. Zusätzlich ergeben sich durch die Verwendung von Tabellenwerten als Arbeitsparameter weitere deutliche Reduktionen der Freiheitsgrade und damit viel kürzere Simulationszeiten.
Das entwickelte Model der PEMFC berechnet die Gesamtspannung über die Zelle im Wesentlichen mittels der Nernst Zellspannung sowie der Spannungsverluste hinsichtlich der

- Diffusions- bzw. Konzentrationsverlusten
- Ohm'scher Spannung
- Aktivierungsverlusten

ABBILDUNG 5 zeigt exemplarisch zwei PEMFC SIMSCAPE Modelle

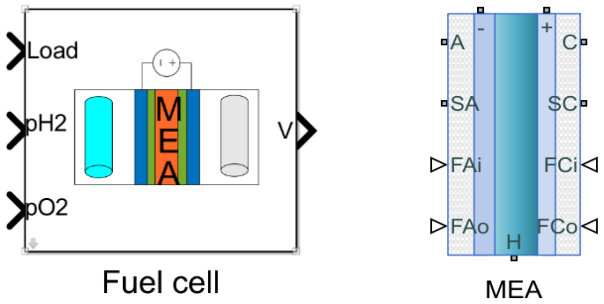


ABBILDUNG 5: PEMFC SIMSCAPE MODEL – CAPGEMINI ENGINEERING UND MATHWORKS® [8]

Eine Brennstoffzelle liefert nur einen geringen Energieoutput. Deshalb werden mehrere Brennstoffzellen zu einem Stack zusammengefasst, mit denen höhere Leistungsanforderungen erfüllt werden können.
Die Versorgung der Zelle bzw. des Stacks mit $H_2$ und Sauerstoff erfolgt mit festen Parametern. Auch mit diesen Modellen können Polarisationskurven und Leistungskurven ermittelt werden.

## IV. BALANCE OF PLANT PEMFC 1D-SIMULINK-SIMSCAPE MODELL

Der PEMFC-Stack wird mit Zusatzaggregaten wie Versorgungs- und Entsorgungselementen zu einem BOP-Modell erweitert:

- Wasserstofftank
- Luft- bzw. Sauerstoffquelle
- Gasleitungen
- Kompressor für die Bereitstellung des Sauerstoffs
- Gasrückführung für Wasserstoff (vollständige Nutzung von $H_2$)
- Regelung der Prozessparameter
  - Massenfluss Wasserstoff

- Massenfluss Luftsauerstoff
- Temperaturen
- Feuchtigkeitsparameter

Fahrwiderstände, die der erzeugten elektrischen Leistung entgegenwirken, werden durch eine elektrische Last abgebildet. Ein Beispiel für eine BOP zeigt ABBILDUNG 6.

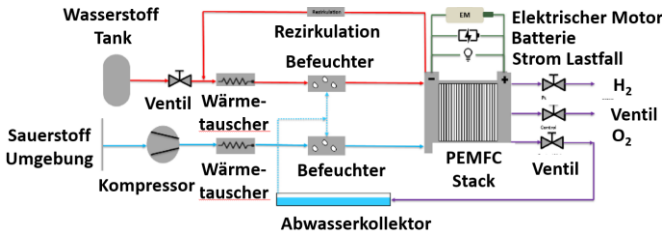


ABBILDUNG 6: BOP EINER BRENNSTOFFZELLENEINHEIT

Ermittelt werden mit diesem Model beispielsweise erzeugter und verbrauchter Laststrom, Polarisations- und Leistungskurven, Temperaturen, Drücke sowie Verbrauchswerte für Wasserstoff und Sauerstoff.

## V. DAS MODELL DES ANTRIEBSSTRANGS

Das bestehende Model wird zu einem Antriebsstrang-Model erweitert. Zusätzlich zur BOP werden implementiert:

- Eine Batterie

  Die Batterie wird für den Startvorgang sowie als Zwischenspeicher bei hohen Lastanforderungen benötigt.

- Elektromotor(en)

  Der Elektromotor ist die anzutreibende Last

- DC/DC Wandler

  Anpassung der Spannung

Ein exemplarische Simulationsmodel zeigt **Fehler! Verweisquelle konnte nicht gefunden werden.**.

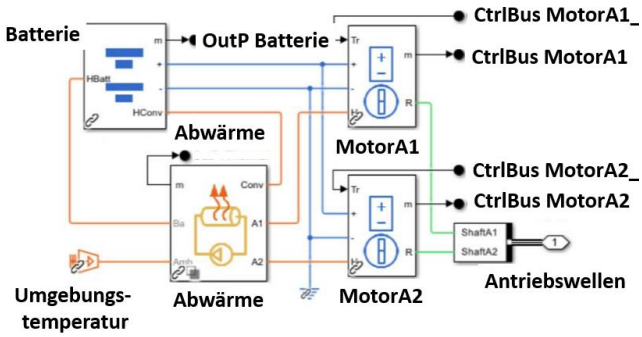


ABBILDUNG 7: SIMULATIONSMODEL DES ANTRIEBSSTRANGES - MATHWORKS [8]

## VI. BETRIEBSFÜHRUNGSOPTIMIERUNG

Mit allen digitalen Zwillingen, 3D-PEMFC, 1D-PEMFC, BOP und Antriebsstrang werden geeignete Arbeitsparameterfelder ermittelt, in denen ein optimaler und nachhaltiger Einsatz der PEMFC möglich ist. Solche Optimierungsprozesse gestalten sich als enorm aufwendig. Jedoch können dadurch Betriebsstrategien entwickelt werden, die das System selbst unter extremen Konditionen schützen und somit irreversible Schäden vermeiden.

## VII. SIMULATIONSERGEBNISSE

Ergebnisse für 3-D und 1-D Modelle sind exemplarisch:

- Polarisationskurven der PEMFC
- Leistung (Spannung und Stromdichte)
- Druck im Wasserstofftank (ABBILDUNG 88)
- Verbrauch $H_2$ und $O_2$ (ABBILDUNG 88)
- Erzeugte Energie (ABBILDUNG 88)
- Wirkungsgrad

Bei den BOP- und Antriebsstrangmodellen sind die ermittelten Ergebnisse erheblich von den Versorgungsaggregaten der PEMFC sowie den angelegten Lasten abhängig.

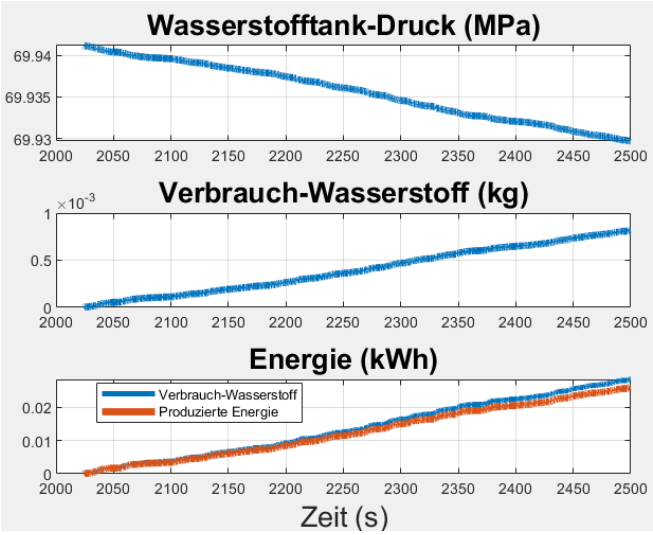


ABBILDUNG 8: SIMULATIONSMODEL DES ANTRIEBSSTRANGES

## VIII. VALIDIERUNG

Auf Basis der erhaltenen Ergebnisse des komplexen 3D-Modells kann mit steigendem Detailgrad das 1D-Modell optimiert werden, z. B. durch Anpassung der verwendeten Werte. Zusätzlich erfolgt eine Validierung der einzelnen Modelle durch die Brennstoffzellentestplattform HZwo-OSCar des Instituts Chemnitzer Maschinen- und Anlagenbau e.V. verglichen (siehe ABBILDUNG )

ABBILDUNG 9: HZWO-OSCAR BRENNSTOFFZELLEN-TESTPLATTFORM DES INSTITUT CHEMNITZER MASCHINEN- UND ANLAGENBAU E.V. [9]

## IX. ZUSAMMENFASSUNG

Das hier beschriebene Konzept ist eine schrittweise Anleitung zum Aufbau eines digitalen Brennstoffzellenfahrzeuges. Dieses setzt sich zusammen aus den digitalen Zwillingen für die PEMFC in komplexer und vereinfachter Form, das BOP sowie den Antriebsstrang. Dadurch gelingt es die Aggregate sowie deren Parameter vorab optimal aufeinander abzustimmen und sinnvolle Betriebsstrategien zu entwickeln. Diese können mittels der HZwo-OSCar Brennstoffzellentestplattform getestet und validiert werden.

## X. DANKSAGUNG

Wir danken dem Bundesministerium für Wirtschaft und Klimaschutz für die Förderung des Verbundvorhabens „HZwo – DigiTwin – Skalierbarer Digitaler Zwilling zur flexiblen Betriebsführung von PEM-Brennstoffzellen und Elektrolyseuren (Förderkennzeichen 03EN5032) Teilvorhaben: Ganzheitliche System- und Technologie-betrachtung“ (Förderkennzeichen 03EN5032D). Weiterhin möchten wir uns bei allen Projektpartnern des Verbundprojektes HZwo-DigiTwin bedanken und freuen uns auf die weitere Zusammenarbeit.

HZwo-DigiTwin

GEFÖRDERT VOM

Bundesministerium für Wirtschaft und Klimaschutz

## LITERATUR

[1] R.d.E.Union, „Fit für 55,“ [Online]. Available: https://www.consilium.europa.eu/de/policies/green-deal/fit-for-55-the-eu-plan-for-a-green-transition. [Zugriff am 25 Juli 2023].

[2] Umweltbundesamt, „Emissionsquellen,“ [Online]. Available: https://www.umweltbundesamt.de/themen/klima-energie/treibhausgas-emissionen/emissionsquellen#energie-stationar. [Zugriff am 30 Juli 2023].

[3] P. Kurzweil, Brennstoffzellentechnik 3. Auflage, Wiesbaden: Springer Vieweg, 2016.

[4] L. Carette, K. A. Friedrich und U. Stimming, „Fuel Cells - Fundamentals and Applications,“ *Fuel Cells,* Bd. 1, Nr. 1, pp. 5 - 39, 2001.

[5] E. T. H. Z. ETH, „Technologie der PEM-Brennstoffzelle,“ [Online]. Available: https://www.powerpac.ethz.ch/technologie/technologie0.pdf. [Zugriff am 30 Juli 2023].

[6] F. A. de Bruijn, G. Janssen und V. A. T. Dam, „Review: Durability and Degradation Issues of PEM Fuel Cell Components,“ *Fuel Cells,* Bd. 08, Nr. 1, pp. 3-22, 2008.

[7] V. O. Mittal, R. H. Kunz und J. M. Fenton, „Membrane Degradation Mechanisms in PEMFCS,“ *ECS Transactions,* Bd. 3, pp. 507-517, 2006.

[8] The MathWorks, Inc. (2022), „MATLAB,“ The MathWorks, Inc. (2022). MATLAB version: 9.13.0 (R2022b). Accessed: January 01, 2023. Available: , [Online]. Available: https://www.mathworks.com.. [Zugriff am 09 08 2023].

[9] Bildquelle: Institut Chemnitzer Maschinen- und Anlagenbau e.V., 2022.