

Daniel SCHAFFER, B.Sc.

# CFD-Simulation einer segmentierten SOFC-Einzelle

**MASTERARBEIT**

zur Erlangung des akademischen Grades

Diplom-Ingenieur

Masterstudium Wirtschaftsingenieurwesen-Maschinenbau

eingereicht an der

**Technischen Universität Graz**

Betreuer

Univ.-Prof. DI Dr.techn. Christoph Hochenauer  
Institut für Wärmetechnik

Beurteiler

Univ.-Prof. DI Dr.techn. Christoph Hochenauer  
Institut für Wärmetechnik

Graz, im April 2016

## EIDESSTÄTLICHE ERKLÄRUNG AFFIDAVIT

Ich erkläre an Eides statt, dass ich die vorliegende Arbeit selbstständig verfasst, andere als die angegebenen Quellen/Hilfsmittel nicht benutzt, und die den benutzten Quellen wörtlich und inhaltlich entnommenen Stellen als solche kenntlich gemacht habe. Das in TUGRAZonline hochgeladene Textdokument ist mit der vorliegenden Masterarbeit identisch.

***I declare that I have authored this thesis independently, that I have not used other than the declared sources/resources, and that I have explicitly indicated all material which has been quoted either literally or by content from the sources used. The text document uploaded to TUGRAZonline is identical to the present master's thesis.***

---

Datum / Date

---

Unterschrift / Signature

# KURZFASSUNG

Titel: CFD-Simulation einer segmentierten SOFC-Einzelzelle

Autor: Daniel Schaffer

1. Stichwort: Solid Oxide Fuel Cell
2. Stichwort: AVL FIRE®
3. Stichwort: Elektrochemie

Die Solid Oxide Fuel Cell (SOFC) stellt eine aussichtsreiche Technologie für den Ausbau dezentraler Energieversorgungsnetze, aber auch zur Energiewandlung in alternativen Kraftwerken, dar. Gegenüber anderen Brennstoffzellen bietet sie den besonderen Anreiz, durch interne Reformierung elektrische Energie nicht nur aus Wasserstoff, sondern auch aus einer Reihe von Kohlenwasserstoffen gewinnen zu können. Neben hohen elektrischen Wirkungsgraden lassen sich auch hohe Systemwirkungsgrade erzielen, da aufgrund der erforderlichen hohen Betriebstemperaturen auch die Abwärme genutzt werden kann.

Zur Reduktion der Entwicklungszeit strebt die AVL List GmbH an, die Ergebnisse teurer Prüfstandstests mittels CFD-Simulation vorabschätzen zu können. Die Simulation bietet auch die Möglichkeit, physikalische Größen zu ermitteln, die am Prüfstand nicht messbar sind. Als Werkzeug soll die hauseigene CFD-Software AVL FIRE® dienen.

In dieser Arbeit wird ein bestehender Versuchsaufbau modelliert, um mittels bereits vorhandener Daten das Modell validieren zu können. Das Herzstück des betrachteten Versuchsaufbaus bildet eine segmentierte SOFC, die vier separate Kathoden auf einer Anode und einem Elektrolyten trägt. Jedes der vier Segmente kann gezielt beheizt werden, um Temperatureinflüsse untersuchen zu können.

Die virtuelle Rekonstruktion setzt sich einerseits aus der Nachbildung der Geometrie des Prüfandaufbaus und andererseits aus der Einbindung der physikalischen Gesetzmäßigkeiten zusammen.

Die Modellgeometrie basiert auf einem Hexaeder-Netzgitter, welches unter Berücksichtigung verschiedener Kriterien manuell erstellt wird. Die manuelle Erstellung erfordert dabei einige Vereinfachungen der peripheren Modellgeometrie.

Anschließend werden Materialparameter, Anfangs- und Randbedingungen definiert. Die Fluidmechanik wird von Parametern aus der FIRE®-eigenen Datenbank bestimmt. Für das thermische Modell müssen Wärmeleitfähigkeiten, Emissionsgrade, Wärmeübergangskoeffizienten, spezifische Wärmekapazitäten und zugeführte Wärmeströme ermittelt werden. Den zentralen Bereich bildet schließlich die Elektrochemie, die durch elektrische und ionische Leitfähigkeiten sowie Austauschstromdichten und Transferkoeffizienten bestimmt wird.

Mit dem eingestellten CFD-Modell werden verschiedene Versuche nachgebildet. Das thermische Modell wird überprüft, indem verschiedene Segmente beheizt und die resultierenden Temperaturprofile mit den Prüfstandsdaten verglichen werden.

Als Kriterium für die korrekt eingestellte Elektrochemie dient die Spannung-Strom-Kurve, die aus einzelnen Betriebspunkten bei unterschiedlichen elektrischen Lasten ermittelt wird.

Die Ergebnisse zeigen bereits eine gute Korrelation mit den Messdaten, lassen jedoch auch ein gewisses Optimierungspotenzial erkennen.

Bisher wurde nur der Wasserstoffbetrieb simuliert. Die vorliegende Arbeit bildet die Grundlage für weiterführende Arbeiten, deren Ziel die bereits angesprochene Verwendung kohlenwasserstoffhaltiger Brenngase und deren interne Reformierung darstellen wird.

# ABSTRACT

Title: CFD-simulation of a segmented single SOFC

Author: Daniel Schaffer

1<sup>st</sup> keyword: Solid Oxide Fuel Cell

2<sup>nd</sup> keyword: AVL FIRE<sup>®</sup>

3<sup>rd</sup> keyword: electrochemistry

The Solid Oxide Fuel Cell (SOFC) is a promising technology both for the development of decentralised energy supply systems and alternate power plants. As big advantage over other types of fuel cell it allows for the use of hydrocarbon fuels by internal reforming to generate electrical power. While the SOFC offers high electrical efficiency, the system's efficiency can be raised by utilising the waste heat caused by high operating temperatures.

In order to reduce development times, AVL List GmbH strives to predict the results of expensive test bench experiments by means of CFD-simulation. A special incentive is the possibility to calculate physical quantities that can not be determined by measurement at the test bench. The CFD-software AVL FIRE<sup>®</sup> shall be used to set up the simulation.

This thesis concentrates on the simulation of a number of test bench-experiments conducted previously, so the generated data can be used for evaluating the simulation results. The centerpiece of the test bench assembly is a segmented SOFC, which incorporates four separate cathodes placed on a single anode and electrolyte. Each segment can be heated separately to monitor the impact of temperature.

The virtual reconstruction consists of the geometric replication of the test bench assembly and the implementation of physics.

The geometry is based on a hexahedron mesh. While generating the mesh manually, several criteria have to be considered and some simplifications have to be made to peripheral mesh sections.

Once the mesh is set up, material parameters, initial and boundary conditions are defined. Fluid dynamics are defined by parameters provided by a databank incorporated in AVL FIRE<sup>®</sup>. For controlling the thermal model, thermal conductivities, emissivities, heat transfer coefficients, specific heat capacities and heat fluxes need to be assessed. Finally, electrochemistry is the central topic of interest. It is determined by electric and ionic conductivities, exchange current densities and transfer coefficients.

The completed CFD model is then used to replicate various experiments. The thermal properties are validated by heating different combinations of the four segments and comparing simulation data to the measured temperature profiles.

The criterion for validation of the electrochemical settings is the voltage-current-curve. It has to be generated by calculating several operating points at varying electric loads.

The results show a generally good correlation with measurement data but also potential for further optimisation.

The simulations conducted so far used hydrogen as fuel; the future goal will be prediction of the SOFC's behaviour and internal reforming when using hydrocarbon fuels.

## VORWORT

Diese Arbeit entstand im Auftrag der AVL List GmbH in Graz, Österreich, im Zeitraum von Juli 2015 bis März 2016.

Zuallererst möchte ich mich bei der AVL List GmbH für die Chance bedanken, die Arbeit in diesem interessanten und professionellen Umfeld auf einem mir völlig neuen Gebiet schreiben zu dürfen. Besonders Herrn DI Dr. techn. Martin Hauth bin ich dabei zu Dank verpflichtet, der mir die Arbeit anbot und mich während der acht Monate bei AVL immer freundlich, professionell und stets geduldig betreute.

Für die Übernahme der universitären Betreuung, fachliche und formelle Ratschläge sowie die Korrektur und Beurteilung der Arbeit möchte ich Herrn Univ.-Prof. DI Dr. techn. Christoph Hochenauer meinen Dank aussprechen.

Viele AVL-Mitarbeiter haben dazu beigetragen, dass die Arbeit ihren aktuellen Entwicklungsstand erreichen konnte. Allen voran ist hier DI Dr. techn. Clemens Fink zu nennen, der die vielfältigen Probleme, die die Aufgabenstellung und die verwendete CFD-Software AVL FIRE<sup>®</sup> mit sich brachten, innerhalb kürzester Zeit zu lösen wusste und dabei viel Geduld mit mir aufbrachte. Das Gelingen der Simulation wäre ohne seine Beratung nicht möglich gewesen. Vielen Dank!

Für das Erlernen des Umgangs mit AVL FIRE<sup>®</sup> im Zuge einer internen Schulung möchte ich mich bei den Vortragenden Denis Straub und Primoz Gorenssek von AVL AST bedanken. Im Anschluss an diese Schulung war Herr Zoran Pavlovic so freundlich, mir weiterführende Hilfestellung beim Erstellen des CFD-Meshes zu leisten. Ohne seine Expertise im Umgang mit speziellen Meshing-Tools würde das CFD-Mesh nicht in seiner heutigen Form vorliegen.

Bei DI Fabian Rasinger bedanke ich mich für die von ihm geleistete Vorarbeit, die die Grundlage für meine eigene Arbeit bildete.

Den AVL-Mitarbeitern DI Peter Cartellieri und Dr. Vincent Lawlor gebührt mein Dank für die Bereitstellung von Materialdaten und Parametern, Frau Mag. Doris Schönwetter für die Betreuung aller administrativen Angelegenheiten und den Kollegen Roman Lucrezi, BSc., Nikolaus Soukup, BSc. und Alexandre Gitz, BSc. für die Unterstützung bei der Simulation mit AVL FIRE<sup>®</sup> und der Datenauswertung.

Vielen Dank auch an die gesamte AVL-Abteilung PTE/DRF für das angenehme und motivierende Arbeitsumfeld!

Abschließend will ich nicht auf meine Familie vergessen, die mich während meiner gesamten Studienzeit durch alle Hoch- und Tiefphasen begleitet und unterstützt hat.

Herzlichen Dank an alle!

Graz, 16.03.2016

Daniel Schaffer

## ABKÜRZUNGSVERZEICHNIS

Abkürzung	Bedeutung
AFL	Anode Functional Layer
ASC	Anode-Supported Cell
ASL	Anode Substrate Layer
AVL	AVL List GmbH
CAD	Computer Aided Design
CFD	Computational Fluid Dynamics
HTFC	High Temperature Fuel Cell
MIEC	Mixed Ionic and Electronic Conducting
OCV	Open Circuit Voltage (Nernst- oder Leerlaufspannung)
PEN	Positive-Electrolyte-Negative = Kathode-Elektrolyt-Anode
SOFC	Solid Oxide Fuel Cell
TPB	Triple Phase Boundary
TPR	Triple Phase Region

## SYMBOLVERZEICHNIS

Symbol	Erklärung	Einheit/Wert
$a$	lange Seitenlänge eines Rechtecks	m
$A$	Fläche	m <sup>2</sup>
$b$	kurze Seitenlänge eines Rechtecks	m
$b_{H_2}$	Wasserstoffexponent	–
$b_{H_2O}$	Wasserexponent	–
$b_{O_2}$	Sauerstoffexponent	–
$c$	spezifische Wärmekapazität	J/kg · K
$C_F$	Trägheitswiderstandskoeffizient	–
$c_i$	Konzentration der Komponente i	mol/m <sup>3</sup>
$C_i$	Konstante (allgemein)	fallabhängig
$C_{mp,i}$	spezifische Wärmekapazität der Komponente i	J/mol · K
$c_p$	spezifische Wärmekapazität bei konstantem Druck	J/kg · K
$d_H$	hydraulischer Durchmesser	m
$d$	Distanz	m
$D_i$	Diffusionskoeffizient der Gasspezies i	m <sup>2</sup> /s
$D_i^{eff}$	effektiver Diffusionskoeffizient der Gasspezies i	m <sup>2</sup> /s
$D_{i,K}^{eff}$	effektiver Knudsen-Diffusionskoeffizient der Gasspezies i	m <sup>2</sup> /s
$D_m^{eff}$	effektiver binärer Massendiffusionskoeffizient	m <sup>2</sup> /s
$E^0$	Standardspannung (Standardpotenzial)	V
$E_{act,i_0}$	Aktivierungsenergie	J
$E_H^0$	Heizwertspannung	V
$E_N$	Nernstspannung	V
$E_Z$	Zellspannung	V
$F$	Faraday-Konstante	F = 96485,3 C/mol
$g$	Erdbeschleunigung	g = 9,81 m/s <sup>2</sup>
$Gr$	Grashof-Zahl	–
$\Delta_B H_{m,i}^0(T^0)$	molare Standard-Bildungsenthalpie der Komponente i	J/mol
$\Delta_R H_m^0(T^0)$	molare Standard-Reaktionsenthalpie bei Standardtemperatur	J/mol
$\Delta_R H_m^0(T)$	molare Standard-Reaktionsenthalpie bei beliebiger Temperatur	J/mol
$S_{m,i}^0$	molare Standard-Bildungsentropie der Komponente i	J/mol * K
$\Delta_R S_m^0(T^0, p^0)$	molare Standard-Reaktionsentropie	J/mol * K
$\Delta_R S_m^0(T, p^0)$	molare Standard-Reaktionsentropie bei beliebiger Temperatur	J/mol * K
$\Delta_R S_m(T, p)$	molare Reaktionsentropie	J/mol * K
$\Delta_R G_m^0(T^0, p^0)$	molare freie Standardreaktionsenthalpie bei Standardtemperatur	J/mol
$\Delta_R G_m^0(T, p^0)$	molare freie Standardreaktionsenthalpie bei beliebiger Temperatur	J/mol
$\Delta_R G_m(T, p)$	molare freie Reaktionsenthalpie	J/mol

$i$	Stromdichte	$A/m^2$
$i$	laufender Index	–
$i_{0,ref}$	Referenz-Austauschstromdichte	$A/m^2$
$i_0^c$	Austauschstromdichte an der Kathode	$A/m^2$
$I$	Stromstärke	A
$\vec{j}_i$	Massenstromdichte der Komponente i	$mol/m^2 \cdot s$
$J$	Molenstrom	$mol/s$
$K$	Permeabilitätskoeffizient	$m^2$
$k_n$	Koeffizient n-ter Ordnung	$1/K^n$
$K_p$	Gleichgewichtskonstante einer Reaktion	–
$l$	Länge	m
$l_a$	Dicke der Anode	m
$l_c$	Dicke der Kathode	m
$l_e$	Dicke des Elektrolyten	m
$L_e$	effektiver Diffusionsweg	m
$L_s$	direkter Diffusionsweg	m
$M_i$	molare Masse	$kg/mol$
$m_s$	Masse der festen Phase (solid)	kg
$N_i$	Molzahl der Komponente i	mol
$Nu$	Nusselt-Zahl	–
$p$	Druck	Pa
$p^0$	Standarddruck	$p^0 = 10^5 Pa = 1 bar$
$p_{ges}$	Gesamtdruck	Pa
$p_i$	Partialdruck der Komponente i	Pa
$P_{el}$	Elektrische Leistung	W
$p_{ref}$	Referenzdruck	Pa
$p_u$	Umgebungsdruck	Pa
$Pr$	Prandtl-Zahl	–
$Q$	Wärme	J
$\dot{Q}$	Wärmestrom	$J/s$
$R_{ct}^c$	Ladungstransferwiderstand der Kathode	$\Omega \cdot cm^2$
$r_i$	Reaktionsrate der Komponente i	$mol_{Edukt}/m^3 \cdot s$
$R$	Widerstand	$\Omega$
$R_i$	Innenwiderstand	$\Omega$
$R_{Contact}$	Kontaktwiderstand	$\Omega$
$R_m$	universelle Gaskonstante	$R_m = 8,314 J/mol \cdot K$
$Ra$	Rayleigh-Zahl	–
$Re$	Reynolds-Zahl	–
$Re_p$	Reynolds-Zahl der Porendurchströmung	–
$S_{y_i}$	Summe aller Quellen und Senken der Spezies i	$kg/m^3 \cdot s$
$t$	Zeit	s
$T$	Temperatur in Kelvin	K
$T^0$	Standardtemperatur	$T^0 = 298,15 K$
$U$	Spannung	V
$U$	Geschwindigkeit in x-Richtung	$m/s$
$\vec{u}_p$	Sickergeschwindigkeit	$m/s$
$V$	Volumen	$m^3$
$\dot{V}$	Volumenstrom	$m^3/s$
$V_H$	Hohlraumvolumen	$m^3$



$W_{el}$	elektrische Arbeit	J
$W_t$	technische Arbeit	J
$X$	beliebige physikalische Größe	fallabhängig
$y_i$	Massenanteil der Komponente i	–
$y_{i,bulk}$	Massenanteil der Komponente i im Strömungskanal	–
$z$	Ladungszahl	–
$\alpha$	Wärmeübergangskoeffizient	$W/m^2 \cdot K$
$\alpha$	Koeffizient 1. Ordnung	$1/K$
$\alpha_a$	Anodischer Ladungstransferkoeffizient	–
$\alpha_c$	Kathodischer Ladungstransferkoeffizient	–
$\beta$	Koeffizient 2. Ordnung	$1/K^2$
$\gamma$	Koeffizient 3. Ordnung	$1/K^3$
$\delta$	charakteristische Porengröße	m
$\varepsilon$	Porosität	–
$\varepsilon_{Al_2O_3}$	Emissionsgrad von Aluminiumoxid	–
$\varepsilon_{Stahl}$	Emissionsgrad von Stahl	–
$\eta_{Act}$	Aktivierungspolarisation	V
$\eta_{Act}^a$	Aktivierungspolarisation der Anode	V
$\eta_{Act}^c$	Aktivierungspolarisation der Kathode	V
$\eta_{Conc}$	Konzentrationspolarisation	V
$\eta_{Ohm}$	Ohm'sche Verluste	V
$\vartheta$	Temperatur in Grad Celsius	°C
$\lambda$	Luftverhältnis	–
$\lambda$	Wärmeleitfähigkeit	$W/m \cdot K$
$\mu$	dynamische Viskosität	$Pa \cdot s$
$\nu$	kinematische Viskosität	$m^2/s$
$\nu_i$	Molanteil der Komponente i	–
$\nu_{st,i}$	stöchiometrischer Molanteil der Komponente i	–
$\rho$	Schütt- oder Rohdichte	$kg/m^3$
$\rho$	spezifischer Widerstand	$\Omega \cdot mm^2/m$
$\rho_0$	Reindichte	$kg/m^3$
$\rho_a$	spezifischer Widerstand der Anode	$\Omega \cdot mm^2/m$
$\rho_c$	spezifischer Widerstand der Kathode	$\Omega \cdot mm^2/m$
$\rho_e$	spezifischer Widerstand des Elektrolyten	$\Omega \cdot mm^2/m$
$\sigma$	Konduktivität (el. Oder ionische Leitfähigkeit)	$1/\Omega \cdot m$
$\sigma_{i-j}$	mittlerer Kollisionsdurchmesser	m
$\tau$	Tortuosität	–
$\Phi$	elektrisches Potenzial	V
$\varphi$	Volumenanteil	–
$\Omega$	Stoßzahl	–

## CHEMISCHE SPEZIES

Symbol	Bezeichnung
C	elementarer Kohlenstoff
Ce	elementares Cer
CeO <sub>2</sub>	Cerioxid
CGO	Gadolinium-dotiertes Ceroxid
CH	
CH <sub>2</sub>	Carben
CH <sub>3</sub>	
CH <sub>4</sub>	Methan
C <sub>x</sub> H <sub>y</sub> O <sub>z</sub>	Kohlenwasserstoff (allgemein)
Co	elementares Kobalt
CO	Kohlenmonoxid
CO <sub>2</sub>	Kohlendioxid
Crofer	ferritischer Hochtemperatur-Edelstahl X1CrTiLa22
Cu	elementares Kupfer
CuO	Kupferoxid
Fe	elementares Eisen
Gd	elementares Gadolinium
H	elementarer Wasserstoff
H <sub>2</sub>	Wasserstoffmolekül
HCO	
H <sub>2</sub> O	Wasser
La	elementares Lanthan
LSCF	Lanthan-Strontium-Kobalt-Ferrit
LSM bzw. (La,Sr)MnO <sub>3</sub>	Strontium-dotiertes Lanthanmanganit
Mn	elementares Mangan
N	elementarer Stickstoff
N <sub>2</sub>	Stickstoffmolekül
Ni	elementares Nickel
Ni-YSZ	Nickel-YSZ-Cermet
NO	Stickstoffmonoxid
O	elementarer Sauerstoff
O <sub>2</sub>	Sauerstoffmolekül
OH <sup>-</sup>	Hydroxidion
Sr	elementares Strontium

# INHALTSVERZEICHNIS

EIDESSTATTLICHE ERKLÄRUNG <i>AFFIDAVIT</i>	ii
KURZFASSUNG	iii
ABSTRACT	iv
VORWORT	i
ABKÜRZUNGSVERZEICHNIS	ii
SYMBOLVERZEICHNIS	iii
CHEMISCHE SPEZIES	vi
INHALTSVERZEICHNIS	vii
<b>1 Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>2 Grundlagen</b>	<b>2</b>
2.1 Eigenschaften der planaren Solid Oxide Fuel Cell	2
2.2 Thermodynamische und elektrochemische Grundlagen	5
2.2.1 Chemische Reaktionen	5
2.2.2 Reaktionsenthalpie, Reaktionsentropie und freie Reaktionsenthalpie	8
2.2.3 Zellspannungen	9
2.2.4 Thermodynamischer Wirkungsgrad	11
2.2.5 Polarisationsspannungen	11
2.2.6 Brennstoffausnutzung $U_f$	15
2.2.7 Area Specific Resistance ASR	16
2.2.8 Elektrischer Wirkungsgrad	16
2.3 Besonderheiten der Zellkomponenten	17
2.3.1 Porosität	17
2.3.2 Tortuosität	17
2.3.3 Diffusion	19
2.3.4 Druckverlust-Modell nach Forchheimer	23
2.3.5 Schichten der Anode	23
2.4 Nutzung von Kohlenwasserstoffen als Brennstoff	25
2.4.1 Reformierung	25
2.4.2 Werkstoffanforderungen	28
2.4.3 Temperaturabhängigkeit der Kohlenstoffablagerungen	29
<b>3 Aufbau des Referenz-Prüfstandes</b>	<b>31</b>
<b>4 Simulation</b>	<b>36</b>
4.1 CFD-Simulation mit AVL FIRE®	36
4.1.1 Rückblick auf Fabian Rasingers CFD-Modell	36
4.1.2 Manuelle Netzgenerierung und Selections	36
4.1.3 Materialparameter	45
4.1.4 Randbedingungen	61
4.1.5 Einstellung der Brennstoffzelle („Fitting“)	68
4.1.6 Sonstige Einstellungen	69
4.2 Simulationsergebnisse und Vergleich mit Messdaten	75
4.2.1 Temperaturverteilung	75

4.2.2	Änderung der Temperatur mit steigender Stromdichte	86
4.2.3	Spannung-Strom-Kurve	87
<b>5</b>	<b>Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>102</b>
	<b>Abbildungsverzeichnis</b>	<b>104</b>
	<b>Tabellenverzeichnis</b>	<b>106</b>
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>107</b>
<b>ANHANG A.</b>	<b>Tabellen</b>	<b>I</b>
<b>ANHANG B.</b>	<b>Formeln</b>	<b>VIII</b>

# 1 EINLEITUNG

Diese Masterarbeit hat zum Ziel, mittels CFD-Simulation in AVL FIRE® die elektrochemischen Prozesse in einer segmentierten SOFC-Einzelzelle nachzubilden. Ziel der Simulation ist, die Messergebnisse eines realen Prüfstandes zu reproduzieren. Der besagte Prüfstand ist in Kapitel 3 beschrieben. Wenn die Simulation die Messwerte mit ausreichender Genauigkeit reproduzieren kann, kann es zur Ermittlung von Werten und Verteilungen elektrischer Größen herangezogen werden, die am Prüfstand nur schwer messbar sind.

Die hier erstellte Simulation baut auf ein bestehendes Modell auf, welches von DI Fabian Rasinger im Rahmen seiner Masterarbeit bei AVL entwickelt wurde. Er simulierte die fluidmechanischen Vorgänge von einströmendem Brennstoff und Oxidationsmittel sowie die Temperaturverteilung.

Dieses Modell soll nun um die notwendige Elektrochemie erweitert werden, um unter anderem die Verteilung der Stromdichte, die resultierende Zellspannung jedes der 4 Zellsegmente sowie den thermischen Einfluss auf die Zellpotenziale berechnen lassen zu können.

Da das von Fabian Rasinger automatisiert erstellte Gitternetzmodell aus verschiedenen Zelltypen zusammengesetzt ist, aber das CFD-Programm AVL FIRE® ausschließlich Hexaederzellen zulässt, wenn Brennstoffzellen berechnet werden sollen, wird zuerst manuell ein neues Gitternetzmodell basierend auf der vorgegebenen Geometrie erstellt. Dabei wird von Anfang an besonderes Augenmerk auf eine hohe Auflösung in relevanten Bereichen, beispielsweise den Übergängen zwischen Strömungskanälen, sowie saubere Hexaeder-Geometrien gelegt.

Im Zuge dieser Netzerstellung werden einzelne Zellbereiche definiert, die Bauteile aus unterschiedlichen Materialien, insbesondere die Schichten der planaren SOFC, repräsentieren.

Sind Modellgeometrie und -unterteilung festgelegt, kann die eigentliche Simulation aufgesetzt werden. Hierfür müssen vielfältige Eigenschaften und Kenngrößen von Materialien und Fluiden, Randbedingungen des Versuchsaufbaues sowie SOFC-spezifische Materialparameter, die sich beispielsweise aus der Porosität einiger Materialien ergeben, bekannt sein. Die Ermittlung all dieser Parameter sowie das iterative Anpassen derselben, um die Messergebnisse möglichst genau reproduzieren zu können, stellt den zentralen Teil der Arbeit dar.

Die Simulation soll einen Versuch nachstellen, der mit Wasserstoff ( $H_2$ ) als Brennstoff durchgeführt werden. In Zukunft soll das Modell auch für Simulationen mit dem Brennstoff Methan ( $CH_4$ ) verwendet werden. Durch die – im Vergleich zur Oxidation von Wasserstoff – komplexeren chemischen Reaktionen im Zuge der internen Reformierung des Methans an der Anode und die größere Anzahl möglicher auftretender Spezies sind hier größere Differenzen zwischen Simulation und Messung zu erwarten als bei der Simulation des Wasserstoffbetriebs.

All dem voran geht eine Betrachtung der Grundlagen in Kapitel 2. Dieses Kapitel konzentriert sich schwerpunktmäßig auf elektrochemische Vorgänge und deren thermodynamische Betrachtung sowie spezielle Materialeigenschaften und daraus resultierende, SOFC-spezifische Problemstellungen.

Nicht weiter betrachtet wird hier die Fluidmechanik, da diese bereits von Fabian Rasinger in sein Modell implementiert und nun für das neu erstellte Modell adaptiert wurde. Informationen zu seinem Fluidmechanik-Modell sowie den entsprechenden Grundlagen sind seiner Masterarbeit zu entnehmen. [1]

## 2 GRUNDLAGEN

### 2.1 Eigenschaften der planaren Solid Oxide Fuel Cell

Allgemein soll in einer Brennstoffzelle durch galvanische Prozesse die chemische Energie eines Brennstoffes in elektrische Energie umgewandelt werden. Es findet also eine Umkehrung der Elektrolyse statt. Brennstoff und Oxidationsmittel (häufig Umgebungsluft) müssen der Zelle kontinuierlich zugeführt werden. [2]

Während bei konventionellen Verbrennungskraftmaschinen die im Treibstoff chemisch gebundene Energie zuerst in Wärme, dann in mechanische Arbeit und diese in einem Generator in elektrische Energie konvertiert wird, verzichtet die Brennstoffzelle auf diese stark verlustbehafteten Zwischenschritte. Dadurch entfällt nicht nur die Entstehung von umweltschädlichen Verbrennungsabgasen; auch diverse, die Effizienz limitierende thermodynamische Beschränkungen wie der Carnot'sche Wirkungsgrad werden umgangen. [2] In kombinierten Strom-Wärme-Anlagen mit Brennstoffzellen und Wärmekraftmaschinen wird eine mögliche Gesamteffizienz bis zu über 70 % prognostiziert. [3] Somit könnten Wirkungsgrade erreicht werden, die in etwa das Doppelte des Wirkungsgrades einer effizienten Verbrennungskraftmaschine betragen.

Die in dieser Arbeit thematisierte Brennstoffzelle gehört dem Typ Festoxidbrennstoffzelle (englisch: Solid Oxide Fuel Cell, SOFC) an, welche bloß einen von mehreren Brennstoffzellentypen darstellt. Der Begriff „Festoxid“ (englisch: solid oxide) nimmt Bezug auf den Elektrolyten, für welchen keramische Werkstoffe verwendet werden. Da diese erst bei hohen Temperaturen leitfähig für Ionen werden, werden SOFCs im Bereich von 650 °C - 1000 °C betrieben. Damit zählen SOFCs zu den Hochtemperatur-Brennstoffzellen (HTFCs). [4]

Wie bei allen anderen Brennstoffzellen auch besteht das Herzstück einer SOFC aus Kathode, Elektrolyt und Anode; sie ist also eine galvanische Zelle. Jede dieser Schichten hat eine spezielle Funktion zu erfüllen: [5]

- Die Kathode ist dadurch definiert, dass an ihr eine Reduktionsreaktion stattfindet. Das bedeutet, an ihr werden einer Spezies Elektronen hinzugefügt. Zuvor neutrale Spezies werden negativ geladen, bei positiv geladenen Spezies wird die positive Ladungszahl verringert oder kompensiert. [5]
- Die Anode ist dadurch definiert, dass an ihr eine Oxidationsreaktion stattfindet. Das bedeutet, an ihr werden einer Spezies Elektronen entzogen. Zuvor neutrale Spezies werden positiv geladen, bei negativ geladenen Spezies wird die negative Ladungszahl verringert oder kompensiert. [5]
- Der Elektrolyt muss durch Leerstellen im Kristallgitter die Leitung von Sauerstoffionen gewährleisten, während er undurchlässig für Gas sein muss. Gleichzeitig muss er ein elektrischer Isolator sein. [3]

Kathode und Anode können sowohl positiv als auch negativ sein, je nachdem, wie eine galvanische Zelle betrieben wird. Werden Kathode und Anode einer in Betrieb befindlichen Brennstoffzelle mit einem elektrischen Leiter verbunden, fließt über diesen Strom von der Anode zur Kathode. Dementsprechend stellt die Anode den Minuspol dar und die Kathode den Pluspol (Wird eine Zelle als Elektrolyseur betrieben, ist es umgekehrt.). [5]

Entsprechend dieser Einteilung in Pluspol, Elektrolyt und Minuspol werden Kathode, Elektrolyt und Anode auch als PEN (für englisch: Positive-Electrolyte-Negative) bezeichnet. Abbildung 2-1 zeigt schematisch die Zellkomponenten sowie die Interconnects mit integrierten Strömungskanälen, wie sie für eine planare SOFC typisch sind. [6]

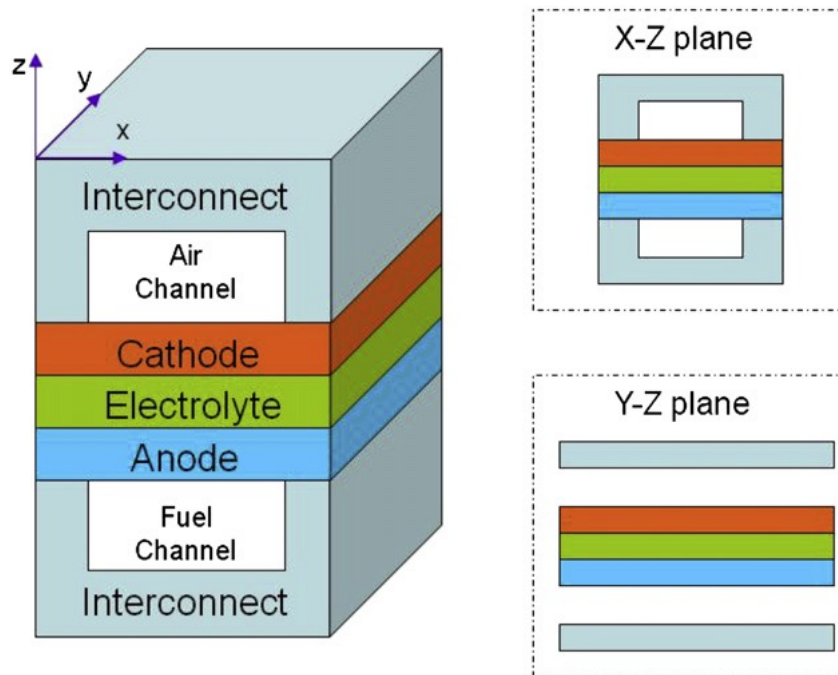


Abbildung 2-1: Zellkomponenten inklusive Strömungskanälen und Interconnects [6]

Während über die Jahre zwar verschiedene Bauformen der SOFC entwickelt und untersucht wurden, liegt der Schwerpunkt der Forschungs- und Entwicklungstätigkeit seit ca. 50 Jahren auf nur zwei grundlegenden Bauformen von SOFCs. Das sind einerseits die tubularen SOFCs, auf die in dieser Arbeit nicht weiter eingegangen wird, und andererseits die planaren SOFCs, denen die hier simulierte Brennstoffzelle angehört. [7]

In planaren SOFCs liegen die drei Komponenten der Zelle in sehr dünnen, flachen Schichten aufeinander, wie in Abbildung 2-1 dargestellt. Aufgrund der geringen Schichtdicken erfordert die mechanische Festigkeit besondere Aufmerksamkeit. Zur Gewährleistung dieser Festigkeit wurden verschiedene Herangehensweisen entwickelt: Dienen die Interconnects zwischen den einzelnen Zellen als tragende Elemente, auf welche die dünnen, nicht-selbsttragenden Zellschichten aufgebracht werden, wird von externer Stützung („external supporting“) gesprochen. Bei selbstgestützten Zellen („self-supporting“) dagegen ist eine der drei Zellschichten stärker ausgeführt, sodass sie als Trägerschicht der Zelle selbst eine ausreichende mechanische Festigkeit verleiht. Je nachdem, welche Schicht diese Funktion übernimmt, werden die selbstgestützten SOFCs in anodengestützte, kathodengestützte und elektrolytgestützte Bauformen unterteilt. [7]

Da die einzelnen Schichten aus unterschiedlichen Materialien bestehen, variieren auch ihre Ionenleitungswiderstände stark. Unter den üblicherweise für SOFCs eingesetzten Materialien (strontiumdotiertes Lanthanmanganit LSM für die Kathode, yttriumdotiertes Zirkonoxid YSZ für den Elektrolyten und Nickel-YSZ-Cermet für die Anode) weist der Elektrolytwerkstoff YSZ den höchsten Ionenleitungswiderstand auf. Er beträgt ungefähr das 5.000-fache des Ionenleitungswiderstandes von LSM bzw. das 500.000-fache des Ionenleitungswiderstandes von Ni-YSZ-Cermet. Um den Gesamt-Ionenleitungswiderstand der SOFC möglichst niedrig zu halten, sollte daher die Schichtdicke des Elektrolyten besonders dünn (5 - 30  $\mu\text{m}$ ) ausgeführt werden. Dadurch scheidet der Elektrolyt als vorteilhafte Trägerschicht aus. Der Anodenwerkstoff Ni-YSZ-Cermet weist dagegen den geringsten Ionenleitungswiderstand auf; daher werden vorwiegend anodengestützte SOFCs gebaut. [7]

Abbildung 2-2 zeigt eine Rasterelektronenmikroskop-Aufnahme eines Schnittes durch die Zellschichten. Der Skala zufolge beträgt die Schichtdicke des Elektrolyten lediglich 8  $\mu\text{m}$ . [8]

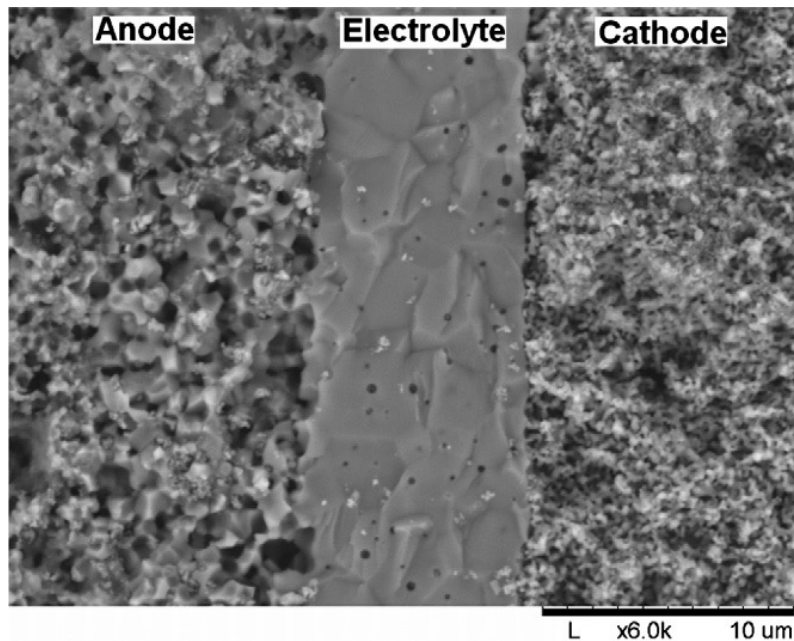


Abbildung 2-2: Rasterelektronenmikroskop-Aufnahme der Zellschichten [8]

Auch die in dieser Arbeit betrachtete planare SOFC gehört der Bauart ASC (= Anode-Supported Cell) an.

Ein kritischer Aspekt der planaren SOFC für die Materialwahl, die Konstruktion und den Betrieb ist die Wärmeausdehnung der Zelle. Da die unterschiedlichen Materialien der Zelle und Interconnects direkt aufeinander aufliegen, ist es zwingend notwendig, dass sie ähnliche Wärmeausdehnungskoeffizienten besitzen, zumal beim Aufheizen bzw. Abkühlen auf bzw. von Betriebstemperatur Temperaturdifferenzen in der Größenordnung von 800 K überwunden werden müssen. In [9] nehmen Razbani et al. Bezug auf ein mathematisches Modell nach Montross et al. zur Berechnung thermischer Spannungen in Zellkomponenten. Diesem Modell zufolge dürfen die Wärmedehnungskoeffizienten der anderen Zellkomponenten um maximal 1 % vom Wärmedehnungskoeffizienten des Elektrolyten abweichen, wenn ein Bauteilversagen mit hoher Wahrscheinlichkeit vermieden werden soll.

Außerdem ist eine gleichmäßige Erwärmung einer größeren Zellen schwieriger zu realisieren. In Folge der entstehenden Temperaturgradienten kann die Zelle brechen. [9] Da die Wärmeausdehnung eines Objektes unter anderem von dessen Größe abhängt, sind größer dimensionierte Zellen in dieser Hinsicht anfälliger als kleine Zellen, was auch die realisierbare Baugröße beschränkt. Um die Temperaturgradienten auch bei größeren Zellen möglichst gering zu halten, ist eine niedrige Aufheizrate und daraus resultierende lange Aufheiz- und Abkühldauer notwendig.



## 2.2 Thermodynamische und elektrochemische Grundlagen

Wie jedes physikalische System muss auch die SOFC alle physikalischen Erhaltungssätze erfüllen. Massenerhaltung (Kontinuitätsgleichung) und Impulserhaltung als spezielle Form der Energieerhaltung (Navier-Stokes-Gleichungen) sind der Strömungsmechanik zuzuordnen und daher auch in Fabian Rasingers Masterarbeit zu finden. Zur Berechnung der Zellspannungen werden thermodynamische Betrachtungen angewendet. Entsprechend muss das System der Energieerhaltung (1. Hauptsatz der Thermodynamik) sowie den anderen thermodynamischen Hauptsätzen genügen.

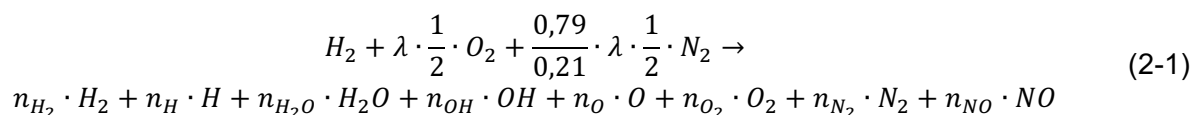
Auch die chemischen Reaktionsgleichungen stellen eine Form von Erhaltungssatz dar, da auch Moleküle, Atome oder Elektronen nicht einfach verloren gehen können.

### 2.2.1 Chemische Reaktionen

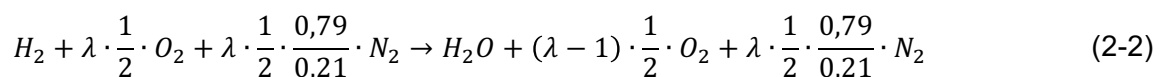
Das Verständnis der an den Elektroden ablaufenden chemischen Reaktionen bildet die Grundlage aller nachfolgenden Berechnungen. An dieser Stelle muss eine nach dem verwendeten Brennstoff getrennte Betrachtung erfolgen.

(a) Brennstoff Wasserstoff  $H_2$ :

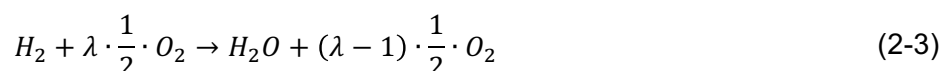
In der Praxis erfolgt die Verbrennung des Wasserstoffes  $H_2$  mit Luft anstatt mit reinem Sauerstoff  $O_2$ . Für Luft werden Volumenanteile  $\varphi$  von 79 % für Stickstoff und 21 % für Sauerstoff angenommen; verschwindende Edelgaskomponenten wie Argon werden dem Stickstoffanteil angerechnet. In Abhängigkeit der Betriebsbedingungen können verschiedene, teilweise recht kurzlebige Produktspezies auftreten. Allgemein formuliert für ein beliebiges Luftverhältnis  $\lambda$  gilt die Reaktionsgleichung (2-1), wobei  $n_i$  die jeweilige Molzahl der Produktgas-Spezies  $i$  darstellt und nur die wichtigsten der möglichen Spezies angeführt sind. [5]



Größere Anteile haben jedoch nur die Spezies in Gleichung (2-2): [5]



Der Stickstoffanteil wird durch die Reaktion nicht verändert, da Stickstoff den Inertgasen angehört. Er liefert keinen relevanten Anteil zur Reaktionsenthalpie, da der gleiche Betrag sowohl zu- als auch wieder abgeführt wird. Daher kann er in der Reaktionsgleichung vernachlässigt werden. Gleichung (2-3) zeigt diese Vereinfachung: [5]



Bei stöchiometrischem Luftverhältnis ( $\lambda = 1$ ) vereinfacht sich die Reaktionsgleichung nochmals und es ergibt sich Gleichung (2-4): [5]



Aus Gleichung (2-4) lassen sich nun die sogenannten stöchiometrischen Molanteile der einzelnen Komponenten auslesen, wobei die Molanteile der Edukte ein negatives Vorzeichen erhalten: [5]

$$v_{st,H_2} = -1, v_{st,O_2} = -\frac{1}{2}, v_{st,H_2O} = 1 \quad (2-5)$$

Gleichung (2-4) stellt die Gesamtreaktion dar. Sie lässt sich in zwei separate Einzelreaktionen aufspalten, die getrennt an Anode und Kathode stattfinden (In der Realität laufen auch beide Einzelreaktionen in mehreren Schritten und über mehrere Zwischenstadien ab – siehe z.B. Kapitel 2.2.5, Unterpunkt Aktivierungspolarisation). [5]

Reduktion an der Kathode: [5]



Oxidation an der Anode: [5]

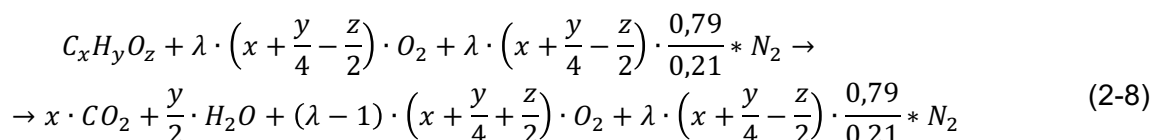


Das  $O^{2-}$ -Anion aus Gleichung (2-6) diffundiert durch den porösen Elektrolyten von der Kathode zur Anode. Dort verbindet es sich mit dem Wasserstoffmolekül zu einem Wassermolekül und gibt dabei die zwei Elektronen ab. Die Abgabe von Elektronen wird als Oxidation bezeichnet; durch sie wird die Anode als solche definiert. Die Elektronen wandern von der Anode über den elektrischen Leiter wieder zurück zur Kathode und bilden dort mit einem Sauerstoffatom wieder ein  $O^{2-}$ -Anion. Die Aufnahme von Elektronen durch eine Spezies wird Reduktion genannt; sie definiert die Kathode. [5]

Die Anzahl der pro Einzelreaktion übertragenen Elektronen definiert die **Oxidationszahl** oder **Ladungszahl**  $z$ , also gilt hier  $z = 2$ . [5]

(b) Brennstoff Kohlenwasserstoffe:

Im Vergleich zu Wasserstoff laufen beim Betrieb der SOFC mit Kohlenwasserstoffen viele verschiedene Nebenreaktionen ab, wodurch noch mehr verschiedene Spezies auftreten. Deshalb muss auch hier die Reaktionsgleichung vereinfacht werden. Allgemein gilt für die Verbrennung eines Kohlenwasserstoffes  $C_xH_yO_z$  mit Luft: [5]



Exemplarisch soll hier Methan  $CH_4$  als Hauptbestandteil von Erdgas betrachtet werden. Mit  $x = 1$ ,  $y = 4$  und  $z = 0$  folgt unter Vernachlässigung des Stickstoffanteils bei stöchiometrischem Luftverhältnis: [5]

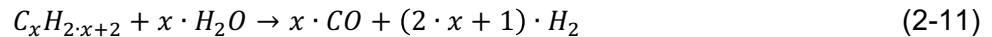


Wieder lassen sich die stöchiometrischen Molanteile auslesen: [5]

$$v_{st,CH_4} = -1, v_{st,O_2} = -2, v_{st,CO_2} = 1, v_{st,H_2O} = 2 \quad (2-10)$$

Gleichung (2-9) stellt jedoch nur einen Idealprozess dar; in der Realität läuft eine Vielzahl von Reaktionen gleichzeitig ab, von denen nur ein paar wenige im Folgenden erläutert werden können. [5]

Um Methan an der Anode zu reformieren, wird es häufig mit Wasserdampf, z.B. im Verhältnis 3 : 1 (Wasserdampf : Methan), versetzt. Allgemein formuliert lautet die Reaktionsgleichung dafür: [7]



An den Nickelatomen der Anode läuft dann für Methan die Reaktion nach Gleichung (2-12) ab: [7]



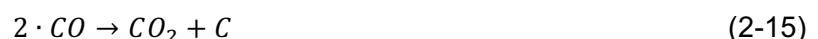
Das Produkt-H<sub>2</sub> aus Gleichung (2-12) reagiert entsprechend Gleichung (2-7), während ein Teil des Produkt-COs aus Gleichung (2-12) analog dazu mit den Sauerstoffionen reagiert, die durch den Elektrolyten wandern, wobei wieder Elektronen frei werden: [7]



Der verbleibende Teil des Kohlenmonoxids CO reagiert nach der **Wassergas-Shift-Reaktion** (Gleichung (2-14)) und produziert dabei wiederum H<sub>2</sub>, das wieder in Reaktionen nach Gleichung (2-7) einfließt: [7]



Daneben können auch noch schädliche Reaktionen, wie z.B. nach Gleichungen (2-15) und (2-16)/(2-17), ablaufen. Wie die Reaktionsgleichungen zeigen, entsteht dabei reiner Kohlenstoff. [7]



Gleichung (2-16) beschreibt die Kohlenwasserstoff-Pyrolyse für einen beliebigen Kohlenwasserstoff. Sie findet bevorzugt an nickelhaltigen Anoden statt. [7]



Als konkretes Beispiel wird die Kohlenwasserstoff-Pyrolyse für Methan in Gleichung (2-17) angegeben. [7]



Es laufen also viele verschiedene Reaktionen parallel ab, wobei die Produkte einer Reaktion Edukte mehrerer anderer Reaktionen sein können. Welche Reaktion bevorzugt abläuft, hängt von den Betriebsbedingungen wie Temperatur und Druck, Katalysatoren und Gaszusammensetzungen ab. [5]

## 2.2.2 Reaktionsenthalpie, Reaktionsentropie und freie Reaktionsenthalpie

Die erzielbare Spannung einer Zelle lässt sich aus thermodynamischen Berechnungen der chemischen Reaktionen ableiten. Betrachtet wird zunächst die molare Reaktionsenthalpie  $\Delta_R H_m^0(T^0)$  bei Standardbedingungen, also bei einer Temperatur  $T^0$  von 298,15 K (25 °C) und einem Druck  $p^0$  von  $10^5$  Pa (1 bar). Sie lässt sich nach Gleichung (2-18) berechnen: [5]

$$\Delta_R H_m^0(T^0) = \sum_i \nu_{st,i} \cdot \Delta_B H_{m,i}^0(T^0) \quad (2-18)$$

Die erforderlichen Bildungsenthalpien  $\Delta_B H_{m,i}^0(T^0)$  sind Stoffwerttabellen zu entnehmen, während die stöchiometrischen Molanteile aus der Reaktionsgleichung abgelesen werden können (siehe z.B. Gleichungen (2-5) or (2-10)).

Da die Reaktionen gerade in einer Hochtemperatur-SOFC nicht bei Standardbedingungen ablaufen, muss über die molaren Wärmekapazitäten bei konstantem Druck  $C_{mp,i}(T)$  die molare Reaktionsenthalpie bei Zell-Betriebstemperatur  $T$ ,  $\Delta_R H_m^0(T)$ , berechnet werden. Die molare Reaktionsenthalpie ist dabei allein von der Temperatur und nicht vom Druck abhängig: [5]

$$\Delta_R H_m^0(T) = \Delta_R H_m^0(T^0) + \sum_i \nu_{st,i} \cdot \int_{T^0}^T C_{mp,i}(T) \cdot dT \quad (2-19)$$

Als nächstes wird die molare Standardreaktionsentropie  $\Delta_R S_m^0(T^0, p^0)$  bei Standardtemperatur benötigt. Sie ergibt sich laut Gleichung (2-20) als Summe der Produkte aus molaren Standardentropien  $S_{m,i}^0$  und stöchiometrischen Molanteilen: [5]

$$\Delta_R S_m^0(T^0, p^0) = \sum_i \nu_{st,i} \cdot S_{m,i}^0 \quad (2-20)$$

Die molare Reaktionsentropie ist im Gegensatz zur molaren Reaktionsenthalpie neben der Temperatur auch vom Druck abhängig. Gleichung (2-21) zeigt die in Folge der Abweichung vom Standardzustand notwendige Korrektur. [5]

$$\Delta_R S_m(T, p) = \Delta_R S_m^0(T^0, p^0) + \sum_i \nu_{st,i} \cdot \int_{T^0}^T \frac{C_{mp,i}(T)}{T} \cdot dT - R_m \cdot \sum_i \nu_{st,i} \cdot \ln \frac{p_i}{p^0} \quad (2-21)$$

Wie aus Gleichung (2-21) ersichtlich, werden zur Berechnung der molaren Reaktionsentropie die Partialdrücke der einzelnen Gaskomponenten benötigt. Der Partialdruck  $p_i$  einer jeden Gaskomponente  $i$  berechnet sich nach Gleichung (2-22): [5]

$$p_i = \nu_i \cdot p_{ges} \quad (2-22)$$

Zur Berechnung der Partialdrücke müssen also die Molanteile bekannt sein. Sie ergeben sich nach Gleichung (2-23) aus den stöchiometrischen Molanteilen, welche aus der Reaktionsgleichung abgelesen werden können. Hierbei ist zu beachten, dass im Nenner des Bruches nur die stöchiometrischen Molanteile der Edukte oder der Produkte addiert werden dürfen, je nachdem, ob der Molanteil eines Eduktes oder Produktes gesucht ist. [5]

$$\nu_i = \frac{\nu_{st,i}}{\sum_i \nu_{st,i}} \quad (2-23)$$

Somit können also aus der Reaktionsgleichung die stöchiometrischen Molanteile ausgelesen, daraus die Molanteile und in weiterer Folge die Partialdrücke berechnet und letztere in Gleichung (2-21) eingesetzt werden. [5]

Nun sind die molare Reaktionsenthalpie  $\Delta_R H_m^0(T)$  und die molare Reaktionsentropie  $\Delta_R S_m(T, p)$  im gewünschten thermodynamischen Zustand bekannt. Sie werden zur Berechnung der molaren freien Reaktionsenthalpie  $\Delta_R G_m(T, p)$ , auch Gibbs-Enthalpie genannt, herangezogen: [5]

$$\Delta_R G_m(T, p) = \Delta_R H_m^0(T) - T \cdot \Delta_R S_m(T, p) \quad (2-24)$$

Die Gibbs-Enthalpie ist gleich der technischen Arbeit  $W_t$ , die das System pro zugeführtem Mol zu leisten imstande ist. Wie aus Gleichung (2-24) ersichtlich, entspricht die molare Gibbs-Enthalpie der molaren Reaktionsenthalpie verringert um einen Betrag, der sich aus der Reaktionsentropie und der herrschenden Temperatur ergibt. Das Produkt stellt eine Wärmemenge dar. Im Fall der Brennstoffzelle entspricht die verbleibende technische Arbeit  $W_t$  der elektrischen Arbeit  $W_{el}$ . [5]

$$\Delta_R G_m(T, p) = W_t = W_{el} \quad (2-25)$$

### 2.2.3 Zellspannungen

Die elektrische Leistung  $P_{el}$  ist das Produkt aus Spannung  $U$  und Stromstärke  $I$ : [5]

$$P_{el} = U \cdot I \quad (2-26)$$

Die elektrische Arbeit  $W_{el}$  ist die elektrische Leistung  $P_{el}$  multipliziert mit der Zeitdauer  $t$ , über die sie erbracht wird (bei Annahme konstanter Leistung): [5]

$$W_{el} = P_{el} \cdot t = U \cdot I \cdot t \quad (2-27)$$

Werden die Größen molar betrachtet, stellt das Produkt  $I \cdot t$  in Gleichung (2-27) die Ladung  $Q$  dar, die vom Strom  $I$  während der Zeit  $t$  pro Mol transportiert wird. Diese Ladung pro Mol kann auch als Produkt aus Ladungszahl  $z$  und der Faraday-Konstanten  $F$  ausgedrückt werden. Weiters ersetzt die Zellspannung  $E_z$  die Spannung  $U$ . Daraus ergibt sich folgender Ansatz für die elektrische Arbeit  $W_{el}$ : [5]

$$-W_{el} = U \cdot I \cdot t = E_z \cdot Q = E_z \cdot z \cdot F \quad (2-28)$$

Das negative Vorzeichen resultiert daraus, dass das System Arbeit leistet, wenn die Spannung positiv ist. Die Arbeit wird also aus dem System abgeführt und daher negativ gezählt. Somit gilt für  $W_{el}$ : [5]

$$W_{el} = -E_z \cdot z \cdot F \quad (2-29)$$

Wie schon in Gleichung (2-25) ausgedrückt, ist die freie molare Reaktionsenthalpie ident der elektrischen Arbeit  $W_{el}$ . Befindet sich das betrachtete System im Standardzustand, also hat es einen Druck von 1 bar, lässt sich durch Einsetzen der molaren freien Standardreaktionsenthalpie die Standardspannung  $E^0$  der Zelle berechnen. Die molare freie Standardreaktionsenthalpie  $\Delta_R G_m^0(T, p^0)$  berechnet sich wie die molare freie Reaktionsenthalpie nach Gleichung (2-24), wobei  $\Delta_R S_m^0(T, p^0)$  statt  $\Delta_R S_m(T, p)$  eingesetzt wird.  $\Delta_R S_m^0(T, p^0)$  ergibt sich aus Gleichung (2-21) durch Weglassen des Druckterms. [5]

Die Einheit der **Standardspannung**  $E^0$  (auch **Standardpotenzial**) ist das Volt. [5]

$$E^0 = - \frac{\Delta_R G_m^0(T, p^0)}{z \cdot F} \quad (2-30)$$

Wird in Gleichung (2-30) die molare freie Standardreaktionsenthalpie  $\Delta_R G_m^0(T, p^0)$  durch die molare Reaktionsenthalpie  $\Delta_R H_m^0(T)$  ersetzt, ergibt sich die sogenannte **Heizwertspannung**  $E_H^0$ : [5]

$$E_H^0 = - \frac{\Delta_R H_m^0(T)}{z \cdot F} \quad (2-31)$$

Wie aus Gleichung (2-24) ersichtlich, ist  $\Delta_R G_m^0(T, p^0)$  um den Betrag  $T \cdot \Delta_R S_m^0(T, p^0)$  geringer als  $\Delta_R H_m^0(T)$ . Aus diesem Grund liegt die Heizwertspannung  $E_H^0$  über der Standardspannung  $E^0$ . Die Definition der Entropie,  $S = dQ/dT$ , veranschaulicht, dass der für den Potenzialverlust verantwortliche Betrag aus der abgeführten Wärme resultiert. Er wird als Entropieverlust bezeichnet. [5]

Wie durch den hochgestellten Index „0“ bei  $\Delta_R G_m^0(T, p^0)$  und  $\Delta_R H_m^0(T)$  angezeigt wird, gelten die jeweils resultierenden Spannungen nur für Systeme im Standardzustand, also bei einem Druck von 1 bar. Herrscht ein abweichender Druck, muss die Differenz berücksichtigt werden, was zu einer niedrigeren Spannung führt. Diese Spannung wird als **Nernstspannung**  $E_N$  oder **Leerlaufspannung** bezeichnet. [5]

Die aus dem System extrahierbare elektrische Arbeit muss nun als  $\Delta_R G_m(T, p)$  berechnet werden, was entweder schon nach Gleichung (2-24) geschehen ist oder durch Gleichung (2-32) als Korrektur von  $\Delta_R G_m^0(T, p^0)$  erfolgen kann. [5]

$$\Delta_R G_m(T, p) = \Delta_R G_m^0(T, p^0) + R_m \cdot T \cdot \ln \prod_i \left( \frac{p_i}{p^0} \right)^{v_{st,i}} \quad (2-32)$$

Der Ausdruck unter dem Logarithmus in Gleichung (2-32) stellt die Gleichgewichtskonstante  $K_p$  der Reaktion dar. Sie trifft eine Aussage darüber, ob bei der Reaktion die Bildung von Edukten oder Produkten begünstigt ist: [5]

$$K_p = \prod_i \left( \frac{p_i}{p^0} \right)^{v_{st,i}} \quad (2-33)$$

Somit lässt sich die molare freie Reaktionsenthalpie auch folgendermaßen formulieren: [5]

$$\Delta_R G_m(T, p) = \Delta_R G_m^0(T, p^0) + R_m \cdot T \cdot \ln K_p \quad (2-34)$$

Wird Gleichung (2-34) durch  $-z \cdot F$  dividiert, ergibt sich für die Nernstspannung: [5]

$$E_N = \frac{\Delta_R G_m^0(T, p^0)}{-z \cdot F} + \frac{R_m \cdot T}{-z \cdot F} \cdot \ln \prod_i \left( \frac{p_i}{p^0} \right)^{v_{st,i}} \quad (2-35)$$

Der erste Summand stellt nach Gleichung (2-30) die Standardspannung  $E^0$  dar. Ist diese bereits bekannt, lässt sich mittels Gleichung (2-36) die Nernstspannung  $E_N$  berechnen: [5]

$$E_N = E^0 - \frac{R_m \cdot T}{z \cdot F} \cdot \ln \prod_i \left( \frac{p_i}{p^0} \right)^{v_{st,i}} \quad (2-36)$$

Die alternative Bezeichnung der Nernstspannung als Leerlaufspannung deutet an, dass diese Spannung nur erreicht wird, solange kein elektrischer Verbraucher an die Elektroden angeschlossen ist, sprich, der Stromkreis muss offen sein. Sie wird daher auch als Open Circuit Voltage (OCV) bezeichnet. [7] Sobald ein Verbraucher angeschlossen wird, sinkt die Spannung ausgehend von der Standardspannung proportional zum fließenden Strom ab. Die Ursache dafür ist der Innenwiderstand  $R_i$  der Brennstoffzelle. Die resultierende Spannung wird als **Klemmenspannung**  $E_{KI}$  bezeichnet: [5]

$$E_{KI} = E^0 - I \cdot R_i \quad (2-37)$$

## 2.2.4 Thermodynamischer Wirkungsgrad

Die allgemeine Definition des Wirkungsgrades ist bekanntermaßen *NUTZEN/AUFWAND*. Den Nutzen stellt hier der Strom dar, der aus der Zelle gezogen wird, bzw. das Standardpotenzial  $E^0$ , das den Strom treibt oder in weiterer Folge die molare freie Standardenthalpie  $\Delta_R G_m^0(T, p^0)$ , aus der sich das Potenzial ableiten lässt. [5]

Der Aufwand hingegen besteht aus sämtlichen Energien, die der Brennstoffzelle in Form von chemisch gebundener Energie oder Wärmeenergie zugeführt werden. Dieser Betrag wird durch die molare Standardreaktionsenthalpie  $\Delta_R H_m^0(T)$  repräsentiert.

Dementsprechend ergibt sich für den thermodynamischen Wirkungsgrad  $\eta_{th}$  der Zelle: [5]

$$\eta_{th} = \frac{\Delta_R G_m^0(T, p^0)}{\Delta_R H_m^0(T, p^0)} \quad (2-38)$$

Mit Gleichungen (2-30) und (2-31) lässt sich  $\eta_{th}$  auch folgendermaßen schreiben: [5]

$$\eta_{th} = \frac{E^0}{E_H^0} \quad (2-39)$$

## 2.2.5 Polarisationspotenziale

Hängt ein elektrischer Verbraucher an der SOFC und es fließt Strom, treten verschiedene Spannungsverluste auf, die als Polarisationspotenziale bezeichnet werden. Den größten Einfluss haben dabei die Aktivierungspolarisation, die Konzentrationspolarisation und die Ohm'schen Verluste. Ausgehend von der OCV wird die tatsächlich zur Verfügung stehende Spannung durch diese Verluste reduziert. Die Leerlaufspannung selbst ist jedoch auch nur unter der Voraussetzung konstant, dass die Partialdrücke der einzelnen Gaskomponenten beim Übergang vom Flow Channel zur jeweiligen Elektrode konstant sind (siehe  $p_i$  in Gleichung (2-35)). Das ist dann gegeben, wenn die Gasströme in den Flow Channels so hoch sind, dass die verhältnismäßig wenigen in die Elektroden eindiffundierenden Gasmoleküle keine relevanten Änderungen der Partialdrücke verursachen. [7]

Sind dagegen die Gasströme in den Flow Channels derart gering, dass die Diffusionsströme die Partialdrücke verändern, nimmt auch die OCV mit steigender Stromdichte ab, wie in Abbildung 2-3 durch den Differenzbetrag „gas consumption“ dargestellt. [7]

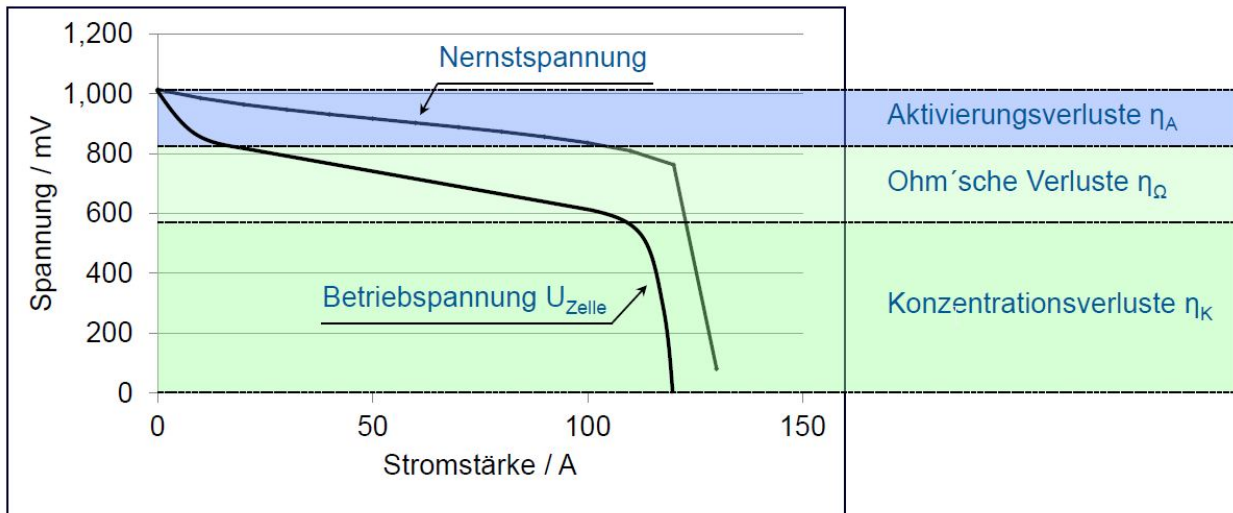


Abbildung 2-3: Polarisationsverluste in Abhängigkeit der Stromdichte [10]

Die Beschriftung in Abbildung 2-3 zeigt das Auftreten der einzelnen Verluste bei unterschiedlichen Stromstärken. Die Ohm'schen Verluste steigen linear mit steigender Stromstärke  $I$  bzw. Stromdichte  $i$  entsprechend Gleichung (2-53). Die Aktivierungspolarisation setzt ein sobald Strom fließt, ihr Gradient ist negativ und sie nähert sich asymptotisch einem konstanten Wert. Die Konzentrationspolarisation setzt dagegen erst bei hohen Stromdichten ein und wächst exponentiell.

Die Summe der Spannung  $V(i)$  über den externen Verbraucher und aller Verluste muss die Nernstspannung  $E_N(i)$  ergeben: [7]

$$E_N(i) = V(i) + \eta_{Act} + \eta_{conc} + \eta_{ohm} \quad (2-40)$$

Die einzelnen Verluste sind im Folgenden beschrieben.

➤ Aktivierungspolarisation  $\eta_{Act}$ :

Die Aktivierungspolarisation  $\eta_{Act}$  ist ein Phänomen, dass durch die Komplexität des Ladungstransfers verursacht wird. Zur Erläuterung der Aktivierungspolarisation wird beispielsweise die Reduktion von Sauerstoff an der Kathode nach Gleichung (2-6) betrachtet. Der Ladungstransfer läuft in Wirklichkeit in mehreren Schritten wie Adsorption und Oberflächendiffusion über mehrere Zwischenstadien ab (siehe z.B. [7]). Die genaue Abfolge dieser Zwischenschritte ist bisher nicht vollständig geklärt. Ein Grund dafür ist, dass die Reaktionen vorwiegend an der TPB ablaufen, deren Länge von der Mikrostruktur der Elektroden abhängt und diese wiederum von Untersuchung zu Untersuchung variiert. Daher kommen unterschiedliche Untersuchungen zu unterschiedlichen Ergebnissen. Die langsamste Zwischenreaktion bestimmt jedenfalls die Reaktionsrate der Gesamtreaktion, und die Stromdichte ist proportional zur Reaktionsrate der Kathodenreaktion. [7]

Viele dieser Zwischenschritte werden thermisch aktiviert, wovon sich die Bezeichnung als Aktivierungspolarisation ableitet. [7] Die thermische Aktivierung jedes Schrittes stellt eine Energiebarriere dar, deren Überwindung mit Verlusten verbunden ist. [3]

Zwischen der Aktivierungspolarisation der Kathode  $\eta_{Act}^c$  und der Stromdichte besteht ein nichtlinearer Zusammenhang: [7]

$$\eta_{Act}^c = f(\text{Materialeigenschaften, Mikrostruktur, Temperatur, Umgebungsdruck, Stromdichte}) \quad (2-41)$$



Die sogenannte **Butler-Volmer-Gleichung** (Gleichung (2-42)) versucht auf phänomenologischer Basis den Zusammenhang zwischen der Stromdichte und  $\eta_{Act}^c$  zu beschreiben: [7]

$$i = i_0^c \cdot \left( e^{\frac{\alpha_a \cdot z \cdot F \cdot \eta_{Act}^c}{R \cdot T}} - e^{-\frac{\alpha_c \cdot z \cdot F \cdot \eta_{Act}^c}{R \cdot T}} \right) \quad (2-42)$$

$i_0^c$  ist die sogenannte Austauschstromdichte,  $\alpha_a$  und  $\alpha_c$  sind die anodischen und kathodischen Transferkoeffizienten,  $z$  ist die Ladungszahl,  $F$  die Faraday-Konstante,  $R$  die allgemeine Gaskonstante und  $T$  die Temperatur. [7]

Die Gleichung beschreibt die Auswirkung der Polarisationsverluste auf die Stromdichte und bestimmt damit maßgeblich den Verlauf der Spannung-Strom-Kurve in Abbildung 2-3. Dabei sind der kathodische und der anodische Ladungstransferkoeffizient ausschlaggebend. [7]

Gleichung (2-42) lässt sich allgemein nicht derart umformen, dass  $\eta_{Act}^c$  explizit als Funktion von  $i$  ausgedrückt wird, außer es werden entweder sehr niedrige oder sehr hohe Stromstärken betrachtet und für jeden Fall Vereinfachungen angenommen. [7]

Für niedrige Stromdichten kann für die Beträge der Exponenten in Gleichung (2-42) die Annahme nach Gleichung (2-43) getroffen werden: [7]

$$\left| \frac{\beta \cdot z \cdot F \cdot \eta_{Act}^c}{R \cdot T} \right| \ll 1 \text{ und } \left| \frac{(1 - \beta) \cdot z \cdot F \cdot \eta_{Act}^c}{R \cdot T} \right| \ll 1 \quad (2-43)$$

Dann vereinfacht sich Gleichung (2-42) zu Gleichung (2-44): [7]

$$i \approx i_0^c \cdot \left| \frac{z \cdot F \cdot \eta_{Act}^c}{R \cdot T} \right| \quad (2-44)$$

Gleichung (2-44) lässt sich nun zu Gleichung (2-45) umformen: [7]

$$|\eta_{Act}^c| \approx \frac{R \cdot T}{z \cdot F \cdot i_0^c} \cdot i \quad (2-45)$$

Aus den Dimensionen von  $\eta_{Act}^c$  und  $i$  ist ersichtlich, dass der Bruch auf der rechten Seite von Gleichung (2-45) die Dimension eines flächenspezifischen Widerstandes haben muss. Er wird als Ladungstransferwiderstand  $R_{ct}^c$  bezeichnet („ct“ für charge transfer). Ohm'sches Verhalten liegt jedoch nicht vor, da eine relativ große Zeitverzögerung zwischen Änderungen von  $i$  und  $\eta_{Act}^c$  besteht. [7]

Bei hohen Stromdichten gilt hingegen die Annahme: [7]

$$\left| \frac{\beta \cdot z \cdot F \cdot \eta_{Act}^c}{R \cdot T} \right| \gg 1 \quad (2-46)$$

Für diesen Fall wird die Butler-Volmer-Gleichung mittels der sogenannten **Tafel-Gleichung** (Gleichung (2-47)) angenähert. [7]

$$\eta_{Act}^c \approx \frac{R \cdot T}{\beta \cdot z \cdot F} \cdot \ln(i_0^c) - \frac{R \cdot T}{\beta \cdot z \cdot F} \cdot \ln(i) \approx a + b \cdot \ln(i) \quad (2-47)$$

Analog dazu wirkt an der Anode die Aktivierungspolarisation  $\eta_{Act}^a$ . Die möglichen Zwischenreaktionen sind [7] zu entnehmen.

➤ Konzentrationspolarisation  $\eta_{Conc}$ :

Die Konzentrationspolarisation wird durch den Widerstand verursacht, den die Gasmoleküle beim Transport durch die porösen Elektroden erfahren. Verschiedene Parameter üben dabei Einfluss aus; einerseits behindern sich die Moleküle der verschiedenen Gaskomponenten und/oder der Edukte und Produkte gegenseitig (siehe Kapitel 2.3.3), andererseits stellen auch die Porenwände Hindernisse für den Teilchentransport dar (siehe Kapitel 2.3.2 und 2.3.3). Gleichung (2-48) stellt die Konzentrationspolarisation sowohl für Anode als auch Kathode allgemein als Funktion verschiedener Einflüsse dar. [7]

$$\eta_{Conc} = f(\text{binäre Massendiffusion, Mikrostruktur, Partialdrücke, Stromdichte}) \quad (2-48)$$

Zusätzlich können noch Effekte wie Adsorption oder Desorption, Knudsen-Diffusion (siehe Kapitel 2.3.3) und Oberflächendiffusion eintreten, die ebenfalls die Konzentrationspolarisation beeinflussen. [7]

Zur Quantifikation der Konzentrationspolarisation der Anode,  $\eta_{Conc}^a$ , wird als wichtige Kenngröße der Grenzwert der Anodenstromdichte  $i_{as}$  herangezogen. Bei diesem Grenzwert beträgt der Partialdruck des Treibstoff-Gases an der TPB ungefähr Null, das heißt es erreichen kaum mehr  $H_2$ -Moleküle (bzw. Moleküle des jeweiligen Treibstoffes) die TPB und der gesamte Zellbetrieb kommt zum Stillstand. [7]

$$i_{as} = \frac{2 \cdot F \cdot p_{H_2} \cdot D_m^{eff}}{R \cdot T \cdot l_a} \quad (2-49)$$

(Anmerkung: In [7] wird hierbei angenommen, dass keine Knudsen-Diffusion (siehe Kapitel 2.3.3) stattfindet. Daher wird nur der effektive binäre Massendifusionskoeffizient  $D_m^{eff}$  nach Gleichung (2-69) verwendet. Findet auch Knudsen-Diffusion statt, ist  $D_m^{eff}$  durch  $D_i^{eff}$  nach Gleichung (2-67) zu ersetzen.)

Mit diesem Wert kann nun die Konzentrationspolarisation  $\eta_{Conc}^a$  berechnet werden: [7]

$$\eta_{Conc}^a = -\frac{R \cdot T}{2 \cdot F} \cdot \ln\left(1 - \frac{i}{i_{as}}\right) + \frac{R \cdot T}{2 \cdot F} \cdot \ln\left(1 + \frac{p_{H_2} \cdot i}{p_{H_2O} \cdot i_{as}}\right) \quad (2-50)$$

Für  $i \rightarrow i_{as}$  wird der erste logarithmische Ausdruck in Gleichung (2-50) zu  $\ln 0 = -\infty$ . Mit dem negativen Vorzeichen des ersten Terms wird dieser damit zu  $+\infty$ , wodurch auch die Konzentrationspolarisation  $\eta_{Conc}^a$  unendlich groß würde.  $\eta_{Conc}^a$  kann nach Gleichung (2-40) jedoch nicht größer werden als  $E_N$ , daher stellt der Grenzwert  $i_{as}$  einen nicht erreichbaren Wert dar. [7]

Aus Gleichungen (2-65), (2-49) und (2-50) folgt, dass die Konzentrationspolarisation  $\eta_{Conc}^a$  mit sinkender Porosität  $\varepsilon$  (geringeres Porenvolumen), steigender Tortuosität  $\tau$  (stärker verwundene Poren) und steigendem  $l_a$  (dickere Anodenschicht) wächst. Der Verlust nimmt also mit der Behinderung des Teilchentransports zu. Die gleiche Auswirkung zeigt ein sinkender Partialdruck  $p_{H_2}$ , da der Teilchentransport vom Druck getrieben wird. [7]

An der Kathode kommt es analog dazu zu Konzentrationsverlusten  $\eta_{Conc}^c$ , die wiederum mit Hilfe des Grenzwertes der Kathodenstromdichte  $i_{cs}$  beschrieben werden kann. [7]

$$i_{cs} = \frac{4 \cdot F \cdot p_{O_2} \cdot D_m^{eff}}{\left(\frac{p - p_{O_2}}{p}\right) \cdot R \cdot T \cdot l_c} \quad (2-51)$$

Damit ergibt sich  $\eta_{Conc}^c$  zu: [7]

$$\eta_{Conc}^c = -\frac{R \cdot T}{4 \cdot F} \cdot \ln\left(1 - \frac{i}{i_{cs}}\right) \quad (2-52)$$

Bei gleicher Anoden- und Kathodenschichtdicke wäre  $\eta_{Conc}^c$  viel höher als  $\eta_{Conc}^a$ . Dies ist einerseits darin begründet, dass zufolge der kleinen molaren Masse von  $H_2$  der binäre Massendiffusionskoeffizient  $D_m^{eff}$  der Anodengase vier bis fünf mal höher ist als jener der Kathodengase, andererseits hat  $H_2$  typischerweise einen höheren Partialdruck im Treibstoffgasgemisch als  $O_2$  im Oxidationsgemisch. In anodengestützten SOFCs, in denen die Anode eine deutlich größere Schichtdicke aufweist als die Kathode, kann  $\eta_{Conc}^a$  jedoch ähnliche Werte wie  $\eta_{Conc}^c$  erreichen. [7]

➤ Ohm'sche Verluste  $\eta_{ohm}$ :

Die Ohm'schen Verluste werden durch die spezifischen Widerstände  $\rho_j$  der einzelnen Komponenten verursacht. Dabei steuert der spezifische (Ionenleitungs-)Widerstand des Elektrolyten  $\rho_e$  den größten Betrag bei, da seine Ionenleitfähigkeit um 2 - 4 Zehnerpotenzen geringer ist als die Elektronenleitfähigkeit der Elektroden (*Leitfähigkeit = 1/spezifischer Widerstand*). Mit den Schichtdicken  $l_j$  der Zellkomponenten und der Summe der Kontaktwiderstände  $R_{Contact}$  zwischen den Schichten ergibt sich Gleichung (2-53) für die Ohm'schen Verluste: [7]

$$\eta_{ohm} = (\rho_a \cdot l_a + \rho_e \cdot l_e + \rho_c \cdot l_c + R_{Contact}) \cdot i \quad (2-53)$$

### 2.2.6 Brennstoffausnutzung $U_f$

Besteht der zugeführte Brennstoff aus einer einzigen Komponente, beispielsweise reinem Wasserstoff, lässt sich die Brennstoffausnutzung  $U_f$  nach Gleichung (2-54) aus den Molenströmen bzw. den Partialdrücken berechnen. [10]

$$U_f = \frac{\dot{n}_{H_2, ein} - \dot{n}_{H_2, aus}}{\dot{n}_{H_2, ein}} = \frac{p_{H_2, ein} - p_{H_2, aus}}{p_{H_2, ein}} \quad (2-54)$$

Setzt sich der Brennstoff aus mehreren Bestandteilen zusammen, wird  $U_f$  als das Verhältnis von tatsächlichem Strom  $I$  zu theoretisch maximal erreichbarem Strom  $I_{max}$  nach Gleichung (2-55) berechnet. [10]

$$U_f = \frac{I}{I_{max}} \quad (2-55)$$

$I_{max}$  ist durch Gleichung (2-56) gegeben. [10]

$$I_{max} = \dot{n}_{el, Zelle} \cdot F \quad (2-56)$$

$F$  ist die Faraday-Konstante und  $\dot{n}_{el, Zelle}$  bezeichnet den Elektronen-Molenstrom. Letzterer wird nach Gleichung (2-57) berechnet. Der Molenstrom jeder Brennstoffkomponente  $i$  wird mit der Anzahl  $n^{el, i}$  an Elektronen, die bei der Spaltung der jeweiligen Komponente frei gesetzt werden, multipliziert. Der gesamte Elektronen-Molenstrom ergibt sich dann durch Aufsummieren der Produkte für alle Brennstoffkomponenten. [10]

$$\dot{n}_{el,Zelle} = \sum_i n^{el,i} \cdot \dot{n}_i \quad (2-57)$$

### 2.2.7 Area Specific Resistance ASR

Ist der ASR für eine SOFC bekannt, lässt sich die Summe der Polarisationsverluste für eine gegebene Stromdichte  $i$  nach Gleichung (2-58) berechnen. [10]

$$\eta_{Act,\Omega,Conc} = U_{Nernst} - U_{Zelle} = ASR \cdot i \quad (2-58)$$

Der Verhältnis von Nernst- zu Zellpotenzial ist in Abbildung 2-3 dargestellt. Wird die auf der Abszisse aufgetragene Stromstärke  $I$  auf die Elektrodenfläche bezogen, ergibt sich die Stromstärke  $i$  in Gleichung (2-58). [10]

### 2.2.8 Elektrischer Wirkungsgrad

Der elektrische Wirkungsgrad entspricht dem Quotienten aus Leistung  $P$  und mittels Brenngas zugeführtem Heizwertstrom. [10]

$$\eta_{el} = \frac{P}{\dot{Q}_{Br}} = \frac{U_{Zelle} \cdot I}{\dot{m}_{Br} \cdot H_U} \quad (2-59)$$

Der thermodynamische Wirkungsgrad  $\eta_{th}$  ist durch die Gleichungen (2-38) und (2-39) gegeben.

Das Verhältnis von Zellpotenzial zu Nernstpotenzial beschreibt den Wirkungsgrad, der durch die Polarisationsverluste entsteht.  $\eta_{A,\Omega,C}$  bezeichnet hier einen Wirkungsgrad, ist daher dimensionslos und muss von den Polarisationsverlusten  $\eta_{Act,\Omega,Conc}$  mit der Einheit Volt unterschieden werden. [10]

$$\eta_{A,\Omega,C} = \frac{E_Z}{E_N} \quad (2-60)$$

Mit diesem Wirkungsgrad, dem thermodynamischen Wirkungsgrad und der Brennstoffausnutzung nach Gleichung (2-54) oder Gleichung (2-55) lässt sich der elektrische Wirkungsgrad nach Gleichung (2-61) formulieren. [10]

$$\eta_{el} = \eta_{th} \cdot \eta_{Act,\Omega,Conc} \cdot U_f \quad (2-61)$$

## 2.3 Besonderheiten der Zellkomponenten

Die Schichten der Zelle, Kathode, Elektrolyt und Anode, stellen die kritischen Komponenten der SOFC dar. Um die Ionenleitung zu ermöglichen, müssen die unterschiedlichen Werkstoffe eine Gemeinsamkeit haben: Sie müssen porös sein. Aufgrund dieser Porosität treten in den Materialien diverse Effekte auf, die eine Herausforderung für die Modellbildung im Vorfeld der Simulation darstellen. In diesem Kapitel sollen diese Effekte sowie die gängigsten Lösungsansätze erläutert werden.

In den Hohlräumen von Elektroden und Elektrolyt findet der Ionentransport statt, während in der festen Phase der Elektroden die Elektronen geleitet werden. Für die Simulation der Diffusionsvorgänge müssen verschiedene Kenngrößen der porösen Materialien bekannt sein, da sie erheblichen Einfluss auf die Transportprozesse innerhalb der Poren haben.

### 2.3.1 Porosität

Die Porosität  $\varepsilon$  eines Festkörpers ist ein dimensionsloses Maß zur Quantifizierung des Leervolumens innerhalb des Gesamtvolumens des Körpers. Sie lässt sich mittels Formel (2-62) berechnen: [11]

$$\varepsilon = 1 - \frac{\rho}{\rho_0} \quad (2-62)$$

Dabei stellt  $\rho$  die sogenannte Schütt- oder Rohdichte dar, also die „durchschnittliche“ Dichte des Körpers inklusive der darin enthaltenen Hohlräume.  $\rho_0$  hingegen ist die Reindichte, also das Verhältnis aus Masse und Volumen allein der festen Phase des Körpers. Aufgrund der Nichtberücksichtigung des Hohlraumvolumens gilt  $\rho_0 \geq \rho$ . [11]

Wird für die Rohdichte  $\rho = \frac{m_S}{V_F + V_H}$  eingesetzt und für die Reindichte  $\rho_0 = \frac{m_S}{V_F}$ , lässt sich Gleichung (2-62) zu Gleichung (2-63) umformen: [11]

$$\varepsilon = \frac{V_H}{V} \quad (2-63)$$

$V_F$  bezeichnet das Volumen der festen Phase,  $V_H$  die Summe der Volumina aller Hohlräume und  $V$  die Summe aus  $V_F$  und  $V_H$ , also das Gesamtvolumen des porösen Körpers. Als Masse wird nur die Masse der festen Phase (solid),  $m_S$ , berücksichtigt und nicht die Masse des Fluids in den Hohlräumen. Somit ist  $\varepsilon$  der Volumenanteil  $\varphi$  der Hohlräume. [11]

### 2.3.2 Tortuosität

Die Tortuosität  $\tau$  einer Elektrode kann als Quotient aus Diffusionslänge eines Teilchens und Elektrodenschichtdicke beschrieben werden. Anders ausgedrückt charakterisiert  $\tau$  die Verlängerung des (effektiven) Diffusionsweges  $L_e$  durch die Verwindung der Poren innerhalb des porösen Mediums im Vergleich zur direkt zurückzulegenden Distanz  $L_s$  zwischen Flow Channel und Elektrolyt, wie in Abbildung 2-4 dargestellt. [12]

$$\tau = \frac{L_e}{L_s} \quad (2-64)$$

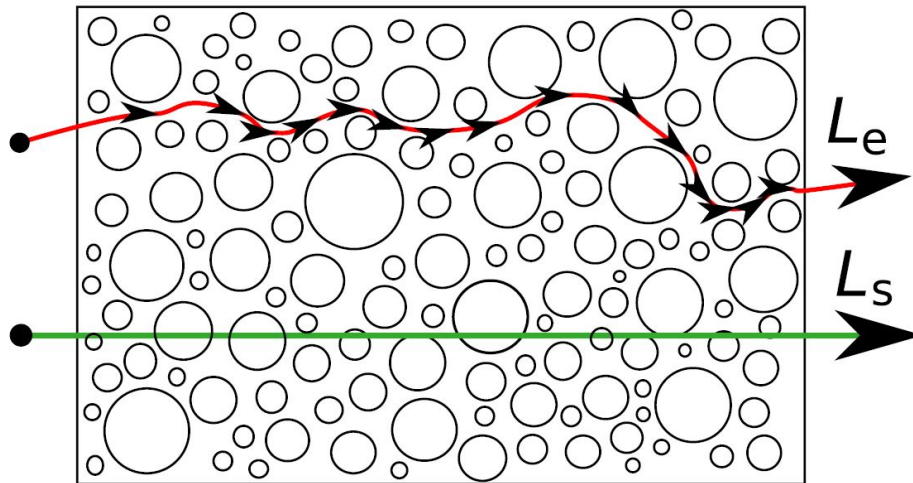


Abbildung 2-4: Veranschaulichung der Tortuosität [12]

Die Tortuosität ist ausschlaggebend für die Ermittlung der Spannungs-Strom-Charakteristik einer Zelle, da sie den Druckgradienten über die Schichtdicke beeinflusst. [12]

Andersson et al. beschreiben beispielsweise in [8] ihr Simulationsmodell, welches bei einer Reduktion von  $\tau$  von 10 auf 5 einen Anstieg der Stromdichte von  $3000 \text{ A/m}^2$  auf  $4050 \text{ A/m}^2$  berechnet. [13]

Nach [12] wird die Tortuosität  $\tau$  vom Tortuositätsfaktor  $\tau^2$  unterschieden, während in der Literatur teilweise auch  $\tau^{-1}$  und  $\tau^{-2}$  als Tortuosität bezeichnet werden. Der Tortuositätsfaktor  $\tau^2$  wird nach [12] zur Modifikation des Diffusionskoeffizienten  $D_i$  herangezogen:

$$D_i^{eff} = \frac{\varepsilon}{\tau^2} \cdot D_i \quad (2-65)$$

$\varepsilon$  ist die Porosität nach Gleichung (2-62) oder Gleichung (2-63);  $D_i$  ist der Diffusionskoeffizient der Gasspezies  $i$  und  $D_i^{eff}$  der effektive Diffusionskoeffizient, der eben Porosität und Tortuosität berücksichtigt. [12]

Die Bestimmung von  $\tau$  stellt eine große Schwierigkeit dar, da die Krümmung der Poren unterschiedlich ist und die Gasmoleküle über unterschiedlich gekrümmte, verzweigte und teilweise wieder zusammenlaufende Porenkanäle transportiert werden können. Oft wird die Tortuosität geschätzt oder angenommen. In verschiedenen veröffentlichten Untersuchungen finden sich für typische SOFC-Anodenmaterialien Werte von 1,16 bis 10. [12] Neuere Messungen mittels Röntgen-Computertomografie und FIB-SEM (Focused Ion Beam Scanning Electron Microscopy) lassen jedoch Werte im Bereich von 1,5 bis 4,0 vermuten. [12]

In [13] stellen Zheng et al. ein mathematisches Modell vor, das eine Grundlage zur Berechnung der Tortuosität bilden soll. Zuerst folgt die Modellierung der Poren: Ein kubisches Kontrollvolumen wird mit Kugeln zweier Spezies befüllt, die das Festkörpermateriale und die Poren repräsentieren. Anschließend werden die Poren-Kugeln um einen fixen Betrag aufgedickt, sodass durch ihre Überschneidung zusammenhängende Porenkanäle entstehen. Dann muss die Ladungserhaltungsgleichung  $j = \sigma \cdot \nabla \cdot \Phi$  gelöst werden, wobei  $\sigma$  die Konduktivität darstellt und  $\Phi$  das elektrische Potenzial. [13]

Die Tortuosität  $\tau$  soll sich dann nach Gleichung (2-66) berechnen lassen: [13]

$$\tau = j_0 \cdot \frac{\varphi}{j_{eff}} \quad (2-66)$$

$j$  stellt dabei die Stromdichte dar und  $\varphi$  den Volumensanteil. [13]

Das Modell zeigt jedoch eine Abhängigkeit der Tortuosität von den Koordinatenrichtungen, also eine Anisotropie. Diese lässt sich durch die Randbedingungen beim Befüllen des

Kontrollvolumens in negativer z-Richtung erklären. Weiters ist die Größe des Kontrollvolumens ausschlaggebend. Bei einer Seitenlänge des kubischen Kontrollvolumens vom 15-fachen Durchmesser einer Kugel wurde bei mehrmaliger Berechnung eine Abweichung der Tortuosität von 15 % berechnet, was einen akzeptablen Wert bei vertretbarem rechnerischen Aufwand darstellen soll. [13]

### 2.3.3 Diffusion

Diffusion beschreibt hier den Transport von Gasmolekülen und Ionen durch die porösen Zellkomponenten. Der Transport findet sowohl in der Gasphase als auch in der festen Phase statt. Die Diffusion innerhalb der festen Phase ist aufgrund der niedrigen Strömungsgeschwindigkeiten deutlich schwächer und die Diffusion im Gasraum ist der dominierende Transportprozess. Daher vernachlässigen die meisten Transportmodelle die Diffusion in der festen Phase, auch weil die chemischen Reaktionen fast ausschließlich in der Gasphase stattfinden. [14]

Die Diffusion in porösen Elektrodenmaterialien wird durch den **effektiven Diffusionskoeffizienten**  $D_i^{eff}$  charakterisiert. Er wird maßgeblich von mittlerer Porengröße und Temperatur bestimmt und ergibt sich aus dem sogenannten **Knudsen-Diffusionskoeffizienten**  $D_{i,K}^{eff}$  und dem **binären Massendiffusionskoeffizienten**  $D_m^{eff}$  (engl. **binary bulk diffusivity**). Die Knudsen-Diffusion beschreibt den Transport der Gasteilchen durch die Poren, während die binäre Massendiffusion den Teilchentransport im Gasgemisch darstellt. Bei Diffusion eines Gases aus nur einer Komponente liegt keine binäre Massendiffusion vor und der effektive Diffusionskoeffizient entspricht dem Knudsen-Diffusionskoeffizienten. [15]

Der effektive Diffusionskoeffizient lässt sich nach Gleichung (2-67) formulieren: [16]

$$\frac{1}{D_i^{eff}} = \frac{1}{D_{i,K}^{eff}} + \frac{1}{D_m^{eff}} \quad (2-67)$$

Knudsen-Diffusion liegt vor, wenn die Teilchendurchmesser viel kleiner sind als die Porendurchmesser, Kollisionen mit den Porenwänden viel häufiger geschehen als Kollisionen der Gasteilchen miteinander und die Adsorptionskräfte vernachlässigt werden können. [17] Quantifizierbar ausgedrückt muss dafür die mittlere freie Weglänge eines Teilchens viel größer sein als die Porengröße. [16] Der Knudsen-Diffusionskoeffizient  $D_{i,K}^{eff}$  für eine Gasspezies  $i$  lässt sich nach Gleichung (2-68) berechnen: [15]

$$D_{i,K}^{eff} = \frac{1}{3} \cdot d \cdot \sqrt{\frac{8 \cdot R \cdot T}{\pi \cdot M_i}} \cdot \frac{\varphi}{\tau} \quad (2-68)$$

$d$  stellt den mittleren Elektrodendurchmesser dar,  $R$  die universelle Gaskonstante,  $T$  die Temperatur,  $M_i$  die molare Masse,  $\varphi$  die Anodenporosität und  $\tau$  die Tortuosität. [15]

Der binäre Massendiffusionskoeffizient charakterisiert den Transport eines Gasteilchens in einem Gasgemisch. Er lässt sich nach Gleichung (2-69) berechnen: [15]

$$D_{i-j}^{eff} = \frac{0,00186 \cdot T^{3/2}}{p \cdot \sigma_{i-j}^2 \cdot \Omega} \cdot \left( \frac{1}{M_i} + \frac{1}{M_j} \right)^{1/2} \cdot \frac{\varphi}{\tau} = D_m^{eff} \quad (2-69)$$

$p$  ist der Druck,  $\sigma_{1-2}$  der mittlere Kollisionsdurchmesser und  $\Omega$  die Stoßzahl ( $\Omega = 0,8998$  für  $H_2$ - $H_2O$ ). [15]

Diffusion einer Gaskomponente  $i$  wird mittels einer Massentransportgleichung beschrieben: [16]

$$\frac{\varepsilon}{R \cdot T} \cdot \frac{\partial(y_i \cdot p)}{\partial t} = -\nabla \cdot N_i + r_i \quad (2-70)$$

$\varepsilon$  ist die Porosität nach Gleichung (2-62) oder (2-63),  $R$  die universelle Gaskonstante,  $T$  die Temperatur,  $y_i$  der Massenanteil der Komponente  $i$ ,  $p$  der Druck,  $\partial/\partial t$  die zeitliche Ableitung,  $\nabla \cdot N_i$  der molare Fluss der Gaskomponente  $i$  und  $r_i$  die Reaktionsrate. Bei stationärem Verhalten wird die linke Seite zu Null.  $-\nabla \cdot N_i$  stellt als Ableitung der Massentransportrate nach den räumlichen Koordinatenrichtungen die Diffusionsrate dar.

Da die chemischen Reaktionen fast ausschließlich im Anode Functional Layer (AFL) stattfinden und dieser oft auf die zweidimensionale Anode-Elektrolyt-Kontaktfläche reduziert wird (siehe Kapitel 2.3.5), finden nach dieser Annahme keine Reaktionen in der Anode selbst statt, wodurch  $r_i = 0$  gilt. [16]

Für die Berechnung von  $N_i$  können drei Modelle angewendet werden. Für die Simulation der Gaskanäle eignen sich das Fick'sche Modell und die Stefan-Maxwell-Gleichung. Die Anzahl durch die porösen Materialien transportierter Teilchen kann entweder ebenfalls mit dem Fick'schen Modell oder mit dem Dusty-Gas-Model berechnet werden. [18]

➤ Fick'sches Modell:

Das 1. Fick'sche Gesetz stellt als phänomenologische Beschreibung von Diffusionsvorgängen den simpelsten Ansatz dar. [14] Ein Vorteil ist die analytische Lösbarkeit. Das Gesetz besagt, dass der molare Diffusionsfluss  $J_\alpha$  einer Spezies  $\alpha$  proportional dem negativen Gradienten der Konzentration ist: [18]

$$J_\alpha = -D_{\alpha\beta} \cdot \frac{dc_\alpha}{dx} \quad (2-71)$$

$D_{\alpha\beta}$  ist dabei der Diffusionskoeffizient der Spezies  $\alpha$  in einem Gasgemisch aus den Spezies  $\alpha$  und  $\beta$  und  $dc_\alpha/dx$  der Gradient der Konzentration  $c_\alpha$  in x-Richtung. [18]

Für die Einbeziehung von Diffusion und Konvektion wird das Fick'sche Modell nach Gleichung (2-72) formuliert: [16]

$$N_i = \frac{1}{R \cdot T} \cdot \left( -D_i^{eff} \cdot \frac{\partial(y_i \cdot p)}{\partial z} + \frac{K \cdot y_i \cdot p}{\mu} \cdot \frac{\partial p}{\partial z} \right) \quad \text{für } i = 1, \dots, n \quad (2-72)$$

$N_i$  ist die Massentransportrate und  $\mu$  die dynamische Viskosität des Mediums. Der effektive Diffusionskoeffizient  $D_i^{eff}$  kennzeichnet den ersten Term in der Klammer als Diffusionsterm, während der Permeabilitätskoeffizient  $K$  den Konvektionsterm anzeigt. [16]

$z$  zeigt in Richtung der Anodendicke. Wird für den Druckgradienten über die Anodendicke  $\partial p/\partial z = 0$  angenommen, vereinfacht sich Gleichung (2-72): [16]

$$N_i = \frac{-D_i^{eff} \cdot p}{R \cdot T} \cdot \frac{\partial y_i}{\partial z} \quad \text{für } i = 1, \dots, n \quad (2-73)$$

Die an der Grenzfläche zwischen Anode und Elektrolyt ankommenden Gasteilchen bestimmen die örtliche Stromdichte. Es gilt Gleichung (2-74): [16]



$$N_i = -\frac{J}{2 \cdot F} \quad (2-74)$$

Gleichsetzen von Gleichung (2-74) und Gleichung (2-73) sowie Umformen ergibt Gleichung (2-75) für den Gradienten des Massenanteils von Komponente  $i$  in  $z$ -Richtung an der Anode-Elektrolyt-Grenzfläche ( $z = l_a$ ): [16]

$$\left. \frac{dy_i}{dz} \right|_{z=l_a} = -\frac{J \cdot R \cdot T}{2 \cdot F \cdot D_i^{eff} \cdot p} \quad (2-75)$$

Aus der Massentransportgleichung (2-70) und den Vereinfachungen  $\partial/\partial t = 0$  und  $r_i = 0$  folgt Gleichung (2-76): [16]

$$\nabla \cdot N_i = 0 \quad (2-76)$$

Wird hier für  $N_i$  Gleichung (2-73) eingesetzt, ergibt sich die lineare Gleichung (2-77): [16]

$$y_1(z) = C_1 + C_2 \cdot z \quad (2-77)$$

Mit Gleichung (2-75) sowie  $y_i|_{z=0} = y_{i,bulk}$  als Randbedingungen lassen sich die Konstanten  $C_1$  und  $C_2$  berechnen und es folgt: [16]

$$y_1(z) = y_{1,bulk} - \frac{J \cdot R \cdot T}{2 \cdot F \cdot D_i^{eff} \cdot p} \cdot z \quad (2-78)$$

Da die Massenanteile in Summe Eins ergeben müssen, lässt sich in einem binären System (zwei Gaskomponenten)  $y_2$  aus Gleichung (2-79) berechnen: [16]

$$y_2(z) = 1 - y_1(z) \quad (2-79)$$

➤ Stefan-Maxwell-Gleichung:

In Mehrkomponenten-Gemischen wird die Stefan-Maxwell-Gleichung angewendet, die eine thermodynamische Formulierung darstellt und nicht einen phänomenologischen Ansatz wie das Fick'sche Gesetz. Bei Betrachtung nur zweier Komponenten reduziert sie sich aber zum Fick'schen Modell. Sie hat den Vorteil, auch Nicht-Gleichgewichtszustände, Gegendiffusion und das Angreifen äußerer Kräfte am Fluid abbilden zu können. [18] Ihre Anwendbarkeit auf SOFC-Komponenten ist beschränkt, da sie für nichtporöse Medien Gültigkeit besitzt und daher die Knudsen-Diffusion nicht berücksichtigt wird. [16]

$$\sum_{j=1, j \neq i}^n \frac{y_j \cdot N_i - y_i \cdot N_j}{D_{ij}^{eff}} = -\frac{p}{R \cdot T} \cdot \frac{dy_i}{dx} \quad (2-80)$$

Dieses Modell lässt sich mit einer Vorgehensweise analog zur Lösung des Fick'schen Modells lösen. [16]

➤ Dusty Gas Model (DGM):

Das DGM integriert die Knudsen-Diffusion in die Stefan-Maxwell-Gleichung. Die festen Porenwände werden als „Staubteilchen“ (dust) als eine Art Komponente des Gemisches betrachtet. Gleichung (2-80) wird zu Gleichung (2-81) erweitert: [16]

$$\frac{N_i}{D_{i,K}^{eff}} + \sum_{j=1, j \neq i}^n \frac{y_j \cdot N_i - y_i \cdot N_j}{D_{ij}^{eff}} = -\frac{1}{R \cdot T} \cdot \left( p \cdot \frac{dy_i}{dz} + y_i \cdot \frac{dp}{dz} \cdot \left( 1 + \frac{K \cdot p}{D_{i,K}^{eff} \cdot \mu} \right) \right) \quad (2-81)$$

Der zweite Summand in der Klammer auf der rechten Seite von Gleichung (2-81) beschreibt den Permeationsfluss. Er verschwindet für  $dp/dz = 0$ : [16]

$$\frac{N_i}{D_{i,K}^{eff}} + \sum_{j=1, j \neq i}^n \frac{y_j \cdot N_i - y_i \cdot N_j}{D_{ij}^{eff}} = -\frac{p}{R \cdot T} \cdot \frac{dy_i}{dz} \quad (2-82)$$

Mit  $n = 2$  und  $y_2 = 1 - y_1$  gilt für  $N_1$ : [16]

$$N_1 \cdot \left( \frac{1}{D_{1,K}^{eff}} + \frac{1 - y_1 \cdot \left( 1 + \frac{N_2}{N_1} \right)}{D_{12}^{eff}} \right) = -\frac{p}{R \cdot T} \cdot \frac{dy_1}{dz} \quad (2-83)$$

Das Graham'sche Gesetz für Diffusion in Gasgemischen entsteht durch Summation von Gleichung (2-82) über alle  $n$  Komponenten: [16]

$$\sum_{i=1}^n N_i \cdot \sqrt{M_i} = 0 \quad (2-84)$$

Für  $n = 2$  ergibt sich durch Umformen Gleichung (2-85): [16]

$$\frac{N_2}{N_1} = -\sqrt{\frac{M_1}{M_2}} \quad (2-85)$$

Gleichung (2-85) wird in Gleichung (2-83) eingesetzt und  $\alpha = 1 - \sqrt{M_1/M_2}$  substituiert: [16]

$$N_1 = -\frac{p}{R \cdot T} \cdot \left( \frac{1}{D_{1,K}^{eff}} + \frac{1 - y_1 \cdot \alpha}{D_{12}^{eff}} \right)^{-1} \cdot \frac{dy_1}{dz} \quad (2-86)$$

Dieser Ausdruck für  $N_1$  wird wieder in die vereinfachte Massentransportgleichung  $\nabla \cdot N_i = 0$  (Gleichung (2-76)) eingesetzt: [16]

$$\frac{d^2 y_1}{dz^2} + \frac{\alpha}{D_{12}^{eff}} \cdot \left( \frac{1}{D_{1,K}^{eff}} + \frac{1 - y_1 \cdot \alpha}{D_{12}^{eff}} \right)^{-1} \cdot \left( \frac{dy_1}{dz} \right)^2 = 0 \quad (2-87)$$

Diese Differenzialgleichung lässt sich nur numerisch lösen. [16]

### 2.3.4 Druckverlust-Modell nach Forchheimer

Wie in Kapitel 4.1.6 in der Beschreibung der Einstellungen für die Simulation erwähnt, wird das Druckverlust-Modell nach Forchheimer verwendet. Dieses ist eine Erweiterung des sogenannten Darcy-Gesetzes, welches den Zusammenhang von Sickergeschwindigkeit und Druck bei Filtration durch poröse Materialien beschreibt: [19]

$$\vec{u}_p = -\frac{K}{\mu} \cdot \vec{\nabla} \cdot p \quad \text{bzw.} \quad -\vec{\nabla} \cdot p = \frac{\mu}{K} \cdot \vec{u}_p \quad (2-88)$$

$\vec{u}_p$  bezeichnet darin die Sickergeschwindigkeit des Fluids innerhalb des porösen Materials, die durch die Größen dynamische Viskosität  $\mu$ , Druck  $p$  und Permeabilitätskoeffizient  $K$  beschrieben wird.  $K$  kann Größenordnungen von  $10^{-5} \text{ m}^2$  für sehr durchlässige Materialien bis zu  $10^{-20} \text{ m}^2$  beispielsweise für Gesteine annehmen. Im Fall anisotroper Porosität wird  $K$  durch den Tensor  $\vec{K}$  ersetzt. Aus Gleichung (2-88) ist ersichtlich, dass die Sickergeschwindigkeit entgegen dem Druckgradienten gerichtet ist und diesem direkt proportional ist. Für sehr undurchlässige Medien ( $K \rightarrow 0$ ) und zähe Fluide ( $\mu \gg$ ) wird die Sickergeschwindigkeit  $\vec{u}_p$  sehr klein. [19]

Das Gesetz hat jedoch keine Gültigkeit für turbulente Strömungen. [19] Die Wahrscheinlichkeit, dass eine laminare in eine turbulente Strömung umschlägt, wird durch die dimensionslose Reynoldszahl  $Re$  ausgedrückt. Sie beschreibt das Verhältnis zwischen Trägheitskräften und Zähigkeitskräften. Ab der kritischen Reynoldszahl  $Re_{krit}$  können Turbulenzen in einer Strömung bestehen bleiben. Für Rohrdurchströmungen ist die kritische Reynoldszahl im Bereich  $Re_{krit} \approx 2300$  angesiedelt. [20] Das Darcy-Gesetz gilt jedoch nur für  $Re_p < 1$ . Die Reynolds-Zahl  $Re_p$  für Porendurchströmung berechnet sich nach der üblichen Formel für die Reynolds-Zahl, wobei als charakteristische Länge die charakteristische Porengröße  $\delta$  eingesetzt wird: [19]

$$Re_p = \frac{\rho \cdot U \cdot \delta}{\mu} \quad (2-89)$$

Für  $Re_p > 1$  kann die Forchheimer-Gleichung angewendet werden. Sie begegnet dem Defizit des Darcy-Gesetzes mit einen zusätzlichen Turbulenzterm. Gleichung (2-90) zeigt die nichtlineare Form der Forchheimer-Gleichung mit dem Turbulenzterm als zweitem Summanden auf der rechten Seite. Durch diesen Turbulenzterm finden nun auch die Trägheitskräfte Berücksichtigung, was beim Darcy-Gesetz nicht der Fall ist. [19]

$$-\vec{\nabla} \cdot p = \frac{\mu}{K} \cdot \vec{u}_p + \frac{\rho \cdot C_F}{\sqrt{K}} \cdot |\vec{u}_p| \cdot \vec{u}_p \quad (2-90)$$

$C_F$  stellt darin den Trägheitswiderstandskoeffizienten dar, der ebenso wie der Permeabilitätskoeffizient bei anisotropen Medien zu einem Tensor  $\vec{C}_F$  wird. [19]

### 2.3.5 Schichten der Anode

Der Werkstoff der Anode muss – genau wie jener der Kathode – sowohl Gasmoleküle durch Konvektion und Diffusion in Poren als auch Elektronen durch elektrische Leitfähigkeit transportieren können und im Idealfall auch noch elektrokatalytische Eigenschaften besitzen, sodass der Ladungsaustausch nach Gleichung (2-7) begünstigt wird. Die gleichzeitige elektrische und Ionenleitfähigkeit wird als MIEC (Mixed Ionic and Electronic Conducting) bezeichnet. [3] Als Werkstoff, der diese sowie alle anderen Anforderungen (z.B. passender Wärmedehnungskoeffizient, chemische Stabilität usw.) am besten erfüllt, hat sich eine Legierung

aus Nickel und dem Elektrolytmaterial YSZ, sogenanntes Nickel-Cermet (Cermet = ceramic-metallic composite), durchgesetzt. Die Nickelmatrix übernimmt dabei die elektrische Leitung, während das YSZ die Verdichtung und das Kornwachstum der Nickelphase behindert, dadurch Porosität verursacht und somit die Ionenleitfähigkeit garantiert. [7] Anders herum betrachtet reduzieren die aggregierenden Nickel-Partikel die Porosität des YSZ und wirken sich dadurch negativ auf die Ionenleitfähigkeit aus. [21]

Der Begriff Anode bezeichnet – wie schon in Kapitel 2.1 erwähnt – eine Elektrode, an der eine Oxidation abläuft. Dieser Definition genügen eigentlich nur die Nickel-Partikel, nicht aber die YSZ-Partikel, wonach der Begriff Anode bei der vorliegenden SOFC eigentlich nur auf die Nickel-Partikel verweisen würde und eigentlich auch nur auf die Nickel-Partikel im Anode Functional Layer (siehe nächster Absatz). [22] In der Literatur wird jedoch mit Anode die gesamte Schicht bezeichnet, in der sich die Nickel-Partikel befinden. Daher ist auch hier mit „Anode“ die gesamte Schicht aus Ni-YSZ-Cermet gemeint. (Analog dazu wird auch mit Kathode die gesamte Schicht bezeichnet.)

Die Anode ist jedoch keine durchgängig einheitliche Schicht. Sie wird üblicherweise in den **Anode Functional Layer** (AFL) und den **Anode Substrate Layer** (ASL) unterteilt. Die Oxidation nach Gleichung (2-7) findet fast ausschließlich innerhalb des AFL statt, sodass die Reaktionsrate außerhalb des AFLs mit guter Genauigkeit gleich Null gesetzt werden kann. [23]

Der AFL erstreckt sich typischerweise etwa 20  $\mu\text{m}$  vom Elektrolyten ins Innere der Anode, während die verbleibende Anodenschichtdicke den ASL bildet. Oft setzt sich der AFL zufolge gezielter Fertigungsprozesse aus feineren Partikeln zusammen als der ASL; der durchschnittliche Partikeldurchmesser beträgt ungefähr 0,5  $\mu\text{m}$ . Aufgrund der kleineren Partikel besitzt der AFL eine größere aktive Oberfläche, an welcher die Reaktionen ablaufen können. Auch innerhalb des AFLs ist die Reaktionsrate jedoch nicht konstant. Bedingt durch die geringe ionische Leitfähigkeit der Anode findet sich eine deutlich höhere Reaktionsrate nahe der Kontaktfläche zum Elektrolyten. [23]

Die Ladungsaustauschreaktionen finden an der sogenannten **Triple Phase Boundary** (TPB) statt. Sie wird allgemein durch das Aufeinandertreffen der drei Phasen Ionenleiter, Elektronenleiter und Gasphase definiert. Während damit oftmals die Grenzfläche zwischen Elektrode (Elektronenleiter) und Elektrolyt (Ionenleiter) gemeint ist, durchzieht im Fall einer MIEC-Elektrode die TPB die gesamte Elektrode [7] (S. 244), die ja durchgehend aus 2 Komponenten (z.B. Ionenleiter YSZ und Elektronenleiter Ni) und Poren zur Gasleitung besteht. Im ASL ist die  $\text{O}^{2-}$ -Konzentration jedoch so gering, dass die Ladungsaustauschreaktionen auf den AFL beschränkt werden. [23] In [22] wird statt Triple Phase Boundary die Bezeichnung Triple Phase Region (TPR) gewählt, um auszudrücken, dass der Ladungsaustausch nicht nur direkt an der gedachten Kontaktfläche von Elektrode und Elektrolyt stattfindet, sondern verteilt über einer Schicht mit gewisser Dicke.

Die bereits erwähnte Partikelgröße der Elektroden hat entscheidenden Einfluss auf die Leistungsfähigkeit. Bei Änderung der Partikelgröße treten jedoch gegensätzliche Effekte auf: Einerseits steigt die Länge der TPB mit einer Reduktion der Partikelgröße, dadurch wird mehr Fläche für das Ablaufen chemischer Reaktionen geboten und die Aktivierungspolarisation (Kapitel 2.2.5) wird reduziert. [24]

Andererseits werden Diffusions- und Konvektionsprozesse erschwert, da mit kleineren Partikeln auch die Poren dazwischen feiner werden. Es wird also zwar mehr Platz für das Ablaufen der Reaktionen an der TPB geboten, gleichzeitig wird aber der Transport der für die Reaktion notwendigen Reaktanden an die TPB erschwert. Das Finden der geeigneten Partikelgröße bei diesen widersprüchlichen Auswirkungen stellt also einen Optimierungsprozess dar. [24]

## 2.4 Nutzung von Kohlenwasserstoffen als Brennstoff

SOFCs bieten den besonderen Anreiz, außer mit reinem Wasserstoff auch direkt mit einer Vielzahl an Kohlenwasserstoff-basierten Brennstoffen und Kohlenmonoxid CO betrieben werden zu können, da die hohen Betriebstemperaturen eine interne Reformierung ermöglichen. Mögliche Brennstoffe sind Erdgas, welches hauptsächlich aus Methan besteht, Flaschengas aus Propan und Butan, Deponiegas, Produkte der Biomasse- und Kohlevergasung sowie nach deren Verdampfung Methanol, Ethanol, Butanol, Benzin, Diesel und Kerosin. Deren Eignung für den Einsatz in SOFCs variiert jedoch. Viele Treibstoffe enthalten Verunreinigungen. Schwefel- und chlorhaltige Verunreinigungen müssen vor dem Eintritt in die Brennstoffzelle aus dem Gas entfernt werden, um einer Vergiftung vorzubeugen. Insbesondere langkettige Kohlenwasserstoffe neigen zu schädlichen Kohlenstoffablagerungen an den Nickelpartikeln der Anode. Diese Ablagerungen stellen ein großes Problem dar, da sie die Leistungsfähigkeit der Anode stark reduzieren. Zur Vermeidung dieser Ablagerungen müssen verschiedene Maßnahmen getroffen werden, wie die Reformierung des Brennstoffes, die Verwendung speziell geeigneter Werkstoffe oder die Einhaltung bestimmter Temperaturbereiche. Insgesamt stellt die SOFC jedoch viel geringere Anforderungen an die Qualität bzw. Reinheit des Brennstoffes als andere Brennstoffzellentypen. [7]

### 2.4.1 Reformierung

Reformierung bezogen auf die Gasindustrie bezeichnet allgemein nach Rostrup-Nielsen die Wärmebehandlung eines Kohlenwasserstoffes mit hohem Heizwert, durch welche dieser in ein Gasgemisch mit niedrigerem Heizwert transformiert wird. [25]

Die SOFC ermöglicht die direkte Nutzung Kohlenwasserstoff-basierter Brennstoffe durch eine interne Reformierung des Brennstoffes direkt an der Anode, was je nach Brennstoff unterschiedlich hohe Temperaturen voraussetzt. Die Reformierung von Methanol beispielsweise findet schon bei Temperaturen zwischen 300 °C und 600 °C statt, zur Reformierung von Erdgas sind dagegen Temperaturen oberhalb von 600 °C notwendig. Als Alternative zur internen Reformierung kann in einem der SOFC vorgeschalteten Reformier auch eine externe Reformierung betrieben werden. [7]

Die gewünschten Produkte, die sowohl durch eine externe als auch die interne Reformierung der Kohlenwasserstoffe erzielt werden sollen, sind Wasserstoff  $H_2$  und Kohlenmonoxid CO. Beide Gase können in der SOFC oxidiert werden (siehe Gleichungen (2-7) und (2-13)), wohingegen CO für alle anderen Arten von Brennstoffzellen ein „Gift“ darstellt und schnell zu deren Versagen führt, wenn es nicht aus dem Brenngas entfernt wird. [7]

Die Reformierung ist ein endothermer Prozess, also muss ein externer Reformier beheizt werden. Dies erfordert zusätzliche technische Komponenten und erhöht die Systemkomplexität, während der Systemwirkungsgrad gesenkt wird. Um dem entgegenzuwirken, kann ein Teil der Abwärme des SOFC-Stacks zur Beheizung des Reformiers genutzt werden. Durch die externe Reformierung muss die SOFC den für den Betrieb notwendigen Wasserstoff nicht selbst durch interne Reformierung bilden, was höhere Leistungsdichten ermöglicht. [3]

Die interne Reformierung dagegen macht einen externen Reformier und damit dessen Beheizung überflüssig. [3] Prinzipiell können auf diese Weise bessere Systemwirkungsgrade erreicht werden. [7]

Jedoch stellt natürlich auch die interne Reformierung eine endotherme Reaktion dar. Daher wird der Zelle bzw. dem Stack überall dort, wo Brennstoff reformiert wird, Energie entzogen. Ho beschreibt in [26] die Untersuchung des dynamischen Verhaltens einer Methan-betriebenen SOFC. Unter anderem untersuchte er Temperaturgradienten entlang der Gasflussrichtung der Zelle. Er kam zu dem Ergebnis, dass ein Großteil der Methanreformierung auf den ersten

10 – 15 % der Zelllänge nach dem Gaseinlass geschieht, dort der Zelle viel Energie entzogen wird und es daher in diesem Bereich zu einer Unterkühlung der Zelle kommt. Innerhalb dieser ersten 10 – 15 % der Zelllänge tritt die niedrigste Temperatur auf und ausgehend von dieser steigt die Temperatur stetig bis zum Gasauslass an. Die Ursache dieses Temperaturanstiegs sind die exothermen elektrochemischen Prozesse. [26]

Die lokale Temperatursenkung ist gleichbedeutend mit Temperaturgradienten, die unerwünschte mechanische Spannungen in den Zellkomponenten zur Folge haben. [26] Gleichzeitig wirken sich Temperatursenkungen auch auf den Elektrolyten aus, dessen ionische Leitfähigkeit durch hohe Temperaturen begünstigt wird [7], siehe z.B. Abbildung 4-18, Abbildung 4-19 und Abbildung 4-20. Das lokale Absinken der Temperatur beeinträchtigt also auch die Leistung der Zelle, was einen Nachteil gegenüber der externen Reformierung darstellt.

Mit den diversen Brennstoffkomponenten ändert sich selbstverständlich auch die Reaktionskinetik. Während schon die Oxidation von Wasserstoff an der Anode nach Gleichung (2-7) eine Vereinfachung von mehreren bisher nicht vollständig verstandenen Reaktions- und Adsorptionsprozessen darstellt, ist die Oxidation von beispielsweise Erdgas, dessen Hauptbestandteil Methan ist, um vieles komplexer. Durch Untersuchungen der einzelnen Prozesse konnten Hecht et al. laut [22] 42 Reaktionen identifizieren, die bei Reformierungsprozessen an der Anode ablaufen können. Bei 32 davon wirkt Nickel als Katalysator. In der Gasphase kommen die 6 Spezies  $H_2$ ,  $O_2$ ,  $H_2O$ ,  $CO$ ,  $CO_2$  und  $CH_4$  vor, während 12 Spezies durch Adsorption an der Oberfläche der Nickel-Partikel auftreten:  $H$ ,  $O$ ,  $C$ ,  $OH$ ,  $H_2O$ ,  $HCO$ ,  $CO$ ,  $CO_2$ ,  $CH$ ,  $CH_2$ ,  $CH_3$  und  $CH_4$ . Die Reaktionskinetik ist also äußerst komplex und eine große Herausforderung für die Simulation. [22] Je nach Zusätzen zum Brennstoff kann es zu Dampfreformierung, Trockenreformierung, katalytischer partieller Oxidation oder autothermer Reformierung kommen. [3] Diese Mechanismen werden in weiterer Folge genauer beschrieben.

### ➤ Dampfreformierung:

Die Dampfreformierung ist die am weitesten verbreitete Technik zur Erzeugung von Wasserstoff, da sie die kostengünstigste Alternative darstellt. [27] Sie wird durch die Gleichungen (2-11), (2-12) und (2-14) beschrieben. Durch Beimengung von  $H_2O$  zum Brenngas bilden sich durch Reformierungsprozesse  $H_2$  und  $CO$ .  $H_2$  reagiert mit Sauerstoffionen nach Gleichung (2-7) und es entsteht  $H_2O$ .  $CO$  aus dem Reformierungsprozess bildet mit dem entstehenden  $H_2O$  nach der Wassergas-Shift-Reaktion (Gleichung (2-14))  $H_2$ , welches wieder oxidiert werden kann, sowie  $CO_2$ . Das  $CO_2$  kann als Edukt für Trockenreformierungsprozesse nach Gleichung (2-91) dienen. [22] Mit steigendem Verhältnis von Wasserdampf zu Brenngas steigt auch die Reformierungsrate der Kohlenwasserstoffe. [27]

Die Dampfreformierung wird durch Katalysatoren wie Nickel begünstigt. Die tatsächliche Reaktionsreihenfolge ist äußerst komplex. Kee et al. beschreiben beispielhaft den Reformierungsprozess für Methan, wie er an Nickelpartikeln in der Anode stattfindet, in fünf Reaktionsstufen, die jeweils wieder aus etlichen Einzelreaktionen bestehen: [3]

- Zuerst findet eine Oberflächenadsorption des  $CH_4$  an die Nickelpartikel statt, wo ihnen Wasserstoffatome entzogen werden. Im Zuge dieser Chemisorption entstehen die Spezies  $CH_3(s)$ ,  $CH_2(s)$ ,  $CH(s)$  und  $C(s)$ . (s) steht für „surface“, da die Spezies an die Nickelpartikel gebunden sind. [3]
- Auch Wassermoleküle werden adsorbiert und in die Moleküle bzw. Atome  $HO(s)$ ,  $H(s)$  und  $O(s)$  aufgespalten. [3]
- Im nächsten Schritt bilden sich als Vorstufe zu  $CO$  und  $CO_2$  die Zwischenspezies  $CH_xO(s)$ . [3]
- Durch thermisches Cracken und die Kohlenmonoxid-Boudouard-Reaktion entsteht reiner Kohlenstoff aus  $CH_4$ . [3]
- Kohlenstoff wird durch  $H_2$ , Dampf und  $CO_2$  vergast. [3]

Hecht et al. untersuchten experimentell und mittels Simulation Reformierungsprozesse mit H<sub>2</sub>O (Dampfreformierung) und CO<sub>2</sub> (Trockenreformierung) sowie eine Mischung der beiden. Sie „simulierten“ das Gasmisch der Dampfreformierung nahe am Elektrolyten mit einem Gasmisch aus 50 Mol-% Wasserdampf und 50 Mol-% Brenngas. Im Verhältnis zur Trockenreformierung konnte mit einem Verhältnis von ca. 3 : 1 ein deutlich höheres H<sub>2</sub>- als CO-Level erreicht werden. Durch die Wassergas-Shift-Reaktion (Gleichung (2-14)) entstanden außerdem geringfügige CO<sub>2</sub>-Mengen, die wiederum als Edukte für Trockenreformierungsprozesse dienen. So konnten mit der Dampfreformierung höhere H<sub>2</sub>-Ausbeuten als mit den anderen Reformierungsprozessen erzielt werden. [22]  
 Der zusätzlich zugeführte Wasserdampf führt zu einem höheren H<sub>2</sub>O-Partialdruck, der sich nach Gleichung (2-36) negativ auf die Nernstspannung auswirkt. Demnach entsteht durch die Dampfreformierung im Vergleich zum Betrieb der SOFC mit reinem Wasserstoff ein Leistungsverlust. [5]

➤ Trockenreformierung mit CO<sub>2</sub>:

Bei der Trockenreformierung wird Kohlendioxid zur Umwandlung von Kohlenwasserstoffen verwendet. Durch Beimengung von CO<sub>2</sub> entstehen H<sub>2</sub> und CO. H<sub>2</sub> reagiert mit Sauerstoffionen nach Gleichung (2-7) und es entsteht H<sub>2</sub>O. CO aus dem Reformierungsprozess bildet mit dem entstehenden H<sub>2</sub>O nach Gleichung (2-14) CO<sub>2</sub> und H<sub>2</sub>, die wieder den Anfang dieses „Reaktionsgeflechtes“ bilden. [22] Gleichung (2-91) gibt die Gesamtreaktion der Trockenreformierung an. [28]



Im von Hecht et al. durchgeführten Experiment enthielt das Gemisch, welches das Gasmisch nahe dem Elektrolyten repräsentieren sollte, 50 Mol-% CO<sub>2</sub>. [22]

Bei einer Erhöhung der Gasflussraten konnte ein Absinken der CO- und H<sub>2</sub>-Anteile im Gas beobachtet werden, da CH<sub>4</sub> und CO<sub>2</sub> nicht schnell genug umgesetzt und verhältnismäßig weniger Produkte gebildet werden konnten. Tendenziell ist das CO-Level bei der Trockenreformierung mit CO<sub>2</sub> immer höher als das H<sub>2</sub>-Level. [22]

Im Zuge ihrer Experimente untersuchten Hecht et al. auch eine Mischung aus 50 Mol-% CO<sub>2</sub> und 50 Mol-% H<sub>2</sub>O, was eine Kombination aus Dampf- und Trockenreformierung darstellen sollte. Die Ergebnisse der reinen Trockenreformierung konnten damit übertroffen werden, es wurden jedoch nicht die Ergebnisse der Dampfreformierung erzielt. [22]

➤ Katalytische partielle Oxidation (CPOX):

Die katalytische partielle Oxidation findet statt, wenn nicht genug Sauerstoff für eine vollständige Oxidation vorhanden, also das Luftverhältnis  $\lambda < 1$  ist. Gleichung (2-92) veranschaulicht die Reaktionsgleichung am Beispiel Methan. [28]



Es sind zwei Reaktionswege möglich: [3]

- Bei der Verbrennungsreformierung entstehen zuerst CO<sub>2</sub> und H<sub>2</sub>O durch Oxidation eines Teils der Kohlenwasserstoffe. Diese Produkte lösen dann Wassergas-Shift-Reaktionen, Dampfreformierung und Trockenreformierung aus. [3]

- Oxidation durch Pyrolyse: Die Kohlenwasserstoffe werden an den Katalysatorpartikeln in Kohlenstoff und Wasserstoff zersetzt. Durch die Oxidation von Kohlenstoff entsteht Kohlenmonoxid. [3]

### ➤ Autotherme Reformierung:

Bei dieser Reaktion entstehen  $H_2$  und  $CO$  durch eine Kombination aus CPOX und Dampfreformierung. Die Energie für die endotherme Dampfreformierung wird von der exothermen CPOX bereitgestellt. [3]

## 2.4.2 Werkstoffanforderungen

Da Kohlenwasserstoffe als Brennstoffe anodenseitig zugeführt werden, ändern sich die Anforderungen nur für das Material der Anode, während Kathode und Elektrolyt unbeeinträchtigt bleiben.

Das üblicherweise für die Anode verwendete Ni-YSZ-Cermet eignet sich zwar hervorragend als Elektrokatalysator zur Wasserstoffoxidation, hat jedoch einen entscheidenden Nachteil, wenn letzterer durch Kohlenwasserstoffe ersetzt werden soll. Die Nickel-Partikel wirken bei Temperaturen über  $700\text{ °C}$  als Katalysator für Kohlenstoffablagerungen und schon geringfügige Schwefelanteile im Brennstoff können eine Schwefelvergiftung verursachen. Beide Effekte beeinträchtigen die Leistungsfähigkeit der Anode. [21]

Bei der Auswahl eines alternativen Anodenwerkstoffes muss neben der elektrischen und Ionenleitfähigkeit auch auf den Wärmedehnungskoeffizient, die elektrokatalytische Wirkung und die chemische Stabilität in der reduzierenden Umgebung Kohlenwasserstoff-basierter Brennstoffe geachtet werden. Shaikh et al. betrachten MIEC-Cermets aufgrund ihrer elektrokatalytischen Eigenschaften und ihrer Unempfindlichkeit gegenüber Kohlenstoffablagerungen als vielversprechendste Alternativen zu Ni-YSZ. [21]

Um die Ablagerung von Kohlenstoff an Nickel zu vermeiden, ist ein Ansatz, Nickel-freie Anodenwerkstoffe zu wählen. Als Ersatz für Nickel wird häufig Kupfer Cu erwähnt, Es verursacht als Inertmetall keine Kohlenstoffablagerungen und besitzt eine ausgezeichnete elektrische Leitfähigkeit. Außerdem ist es weitaus preisgünstiger als das aufgrund seiner Eigenschaften ebenfalls interessante Kobalt Co. [21]

Somit kann beispielsweise Cu-YSZ gebildet werden. Durch Zusatz von Cer zur Steigerung der elektrokatalytischen Aktivität entsteht Cu-CeO<sub>2</sub>-YSZ. Anoden aus diesem Werkstoff mit einem Kupfergehalt unter 30 Vol.-% zeigten stark gesteigerte Leistungsfähigkeiten. Allerdings beschränkt der Kupferanteil den Betrieb der SOFC auf unter  $800\text{ °C}$ , da Kupfer bei höheren Temperaturen instabil wird. [21]

Ein anderer möglicher Ersatz für Ni-YSZ ist Cu-CeO<sub>2</sub>-Cermet, also eine metallische Keramik aus Kupfer und Cerdioxid. Sie wird für Anoden in Betracht gezogen, die zwischen  $500\text{ °C}$  und  $700\text{ °C}$  zum Einsatz kommen. Die elektrische Leitfähigkeit des Materials wird als gut und die katalytische Wirkung des Cer als exzellent betrachtet. Zur weiteren Steigerung der Leistungsfähigkeit kann das Material mit seltenen Erden dotiert werden, was die Elektronenleitfähigkeit auf den vier- bis fünffachen Wert der elektrischen Leitfähigkeit von Ni-YSZ-Cermet anheben soll. Auch die Ionenleitfähigkeit lässt sich durch gezielte Dotierung steigern. Das Kupfer dient allein der Elektronenleitung, während Cer die ionisch-elektrische Leitfähigkeit verbessert und als Elektrokatalysator wirkt. [21]

Cu-CGO wurde ebenfalls als Anodenwerkstoff untersucht. Zu Kupfer wird Gadolinium-dotiertes Ceroxid hinzugefügt, welches oft auch als Elektrolyt zum Einsatz kommt. Die Ionenleitfähigkeit von CGO wird mit ca.  $10^{-2}\text{ S/cm}$  als hoch eingestuft. Die Wirksamkeit dieses Cermets wurde besonders in Verbindung mit CGO-Elektrolyten getestet. Eine vollständig gesinterte und reduzierte Cu-CGO Anode weist ca. 50 % Massenanteil an gleichmäßig verteiltem und



verbundenem CuO auf, welches von CGO-Partikeln und Poren umgeben ist. Das Material wird von Shaikh et al. für die vielversprechendste Alternative für SOFC-Anoden in Verbindung mit Kohlenwasserstoff-Brennstoffen erachtet. [21]

Die hier beschriebenen Materialien sind aufgrund ihres Kupfergehaltes für Temperaturen bis maximal 800 °C, also nicht für HT-SOFCs, geeignet. [21]

Shaikh et al. beschränkten ihre Suche nicht auf Nickel-freie Werkstoffe, wie aus Abbildung 2-5 ersichtlich; entsprechende nickelhaltige Alternativen sind [21] zu entnehmen. Abbildung 2-5 zeigt die steigende Leistungsfähigkeit von Anodenwerkstoffen, die während eines Zeitraums von 2008 bis 2014 entwickelt wurden, nach Einschätzung von Shaikh et al. Als Leistungsfähigkeit bezeichnen sie dabei eine Kombination aus elektrischen und strukturellen Eigenschaften. [21]

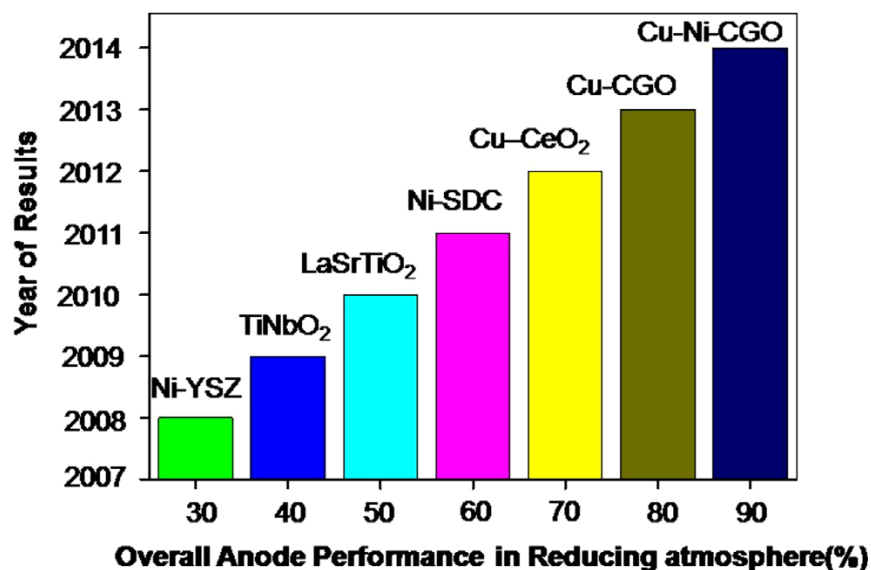


Abbildung 2-5: Steigerung der Leistungsfähigkeit von Anodenwerkstoffen [21]

Der „traditionelle“ Anodenwerkstoff Ni-YSZ wird aufgrund der oben angeführten Defizite als schwächste Option eingestuft. Cu-CGO wird hingegen – zumindest im Mittel- und Niedrigtemperaturbereich – die aussichtsreichste Zukunft prognostiziert, nicht zuletzt aufgrund seiner ausgezeichneten Leitfähigkeit. [21]

Soll ein nicht-nickelfreier Werkstoff zur Anwendung kommen, müssen andere Maßnahmen ergriffen werden, um die Leistungsfähigkeit der Anode langfristig zu sichern. Beispielsweise können Dotierstoffe wie Gold, Kupfer, Ruthenium oder Molybdän die Kohlenstoffablagerungen besonders bei niedrigem Luftüberschuss drastisch reduzieren. [7]

### 2.4.3 Temperaturabhängigkeit der Kohlenstoffablagerungen

Generell nimmt die Tendenz zur Kohlenstoffbildung mit steigender Temperatur zu. Singhal et al. betrachteten die Menge an gebildetem Kohlenstoff bei verschiedenen Dotierungslevels einer Ni-YSZ-Anode mit Gold über einen Temperaturbereich von 700 °C bis 900 °C. Bei einer undotierten Anode wurde bei 850 °C mehr als die 800-fache Menge an Kohlenstoff gebildet, wie es bei 700 °C der Fall war. Bei einer Dotierung von 2 Mol-% Gold wurde bei 900 °C die 520-fache Menge an Kohlenstoff erreicht und bei 5 Mol-% die 500-fache Menge. Während die Dotierung mit 20 Mol-% Gold die bei 900 °C gebildete Menge an Kohlenstoff auf weniger als ein Drittel des Wertes bei

der 5 Mol-%igen Dotierung reduzierte, wurden bei 20 Mol-% Gold und bei 700 °C überhaupt keine Kohlenstoffablagerungen verzeichnet. [7]

In [3] referenzieren Kee et al. die Arbeit von Dean et al., laut welcher Untersuchungen zeigen, dass bei Temperaturen unter 700 °C Kohlenstoffablagerungen weitgehend vermieden werden können.

Diese Temperaturobergrenze steht jedoch in Konflikt mit anderen, zuvor beschriebenen Interessen wie der internen Reformierung oder der Nutzung der Abwärme des SOFC-Stacks, die von höheren Betriebstemperaturen profitieren.

### 3 AUFBAU DES REFERENZ-PRÜFSTANDES

Hier wird der Versuchsaufbau beschrieben, auf dem das CFD-Modell basiert. Abbildung 3-1 zeigt den Stahlsockel, in den auf weißen Keramikscheiben die vier Heizelemente eingesetzt werden. Rund um die entsprechenden Ausnehmungen sind zwanzig kleine Bohrungen erkennbar, durch welche von unten achtzehn Thermoelemente („T\_v1“ bis „T\_v18“) bis in die in Abbildung 3-2 sichtbare Crofer-Platte 15 mm tief eingesteckt werden. In die vier horizontal eingefrästen Kanäle werden ebenfalls Thermoelemente eingelegt, die die Temperaturen nahe den Heizspiralen messen. Sämtliche Komponenten, die in Abbildung 3-1 sichtbar sind, sind nicht Teil des CFD-Gittermodells, sondern werden durch Randbedingungen abgebildet, wie in Kapitel 4.1.4 beschrieben.

In Abbildung 3-2 wird die eben schon erwähnte Crofer-Platte mit eingefrästem Anoden-Flowfield gezeigt, die auch das anodenseitige Interconnect darstellt. Im Netzgittermodell bildet dieses Bauteil den untersten Abschnitt.

In die vier kleineren Bohrungen in den beiden Seitenfläche werden jeweils zwei Thermoelemente unterschiedlich weit eingesteckt („T\_h11“ bis „T\_h44“). Zusätzlich zu den achtzehn senkrecht montierten ergibt das sechzehn horizontal montierte Thermoelemente. Die Messpunkte der vierunddreißig Thermoelemente liegen in einer Ebene (siehe Abbildung 3-12), die vier Thermoelemente zur Temperaturmessung an den Heizspiralen liegen 15 mm unter dieser Ebene.



Abbildung 3-1: Stahlsockel [Quelle: AVL]

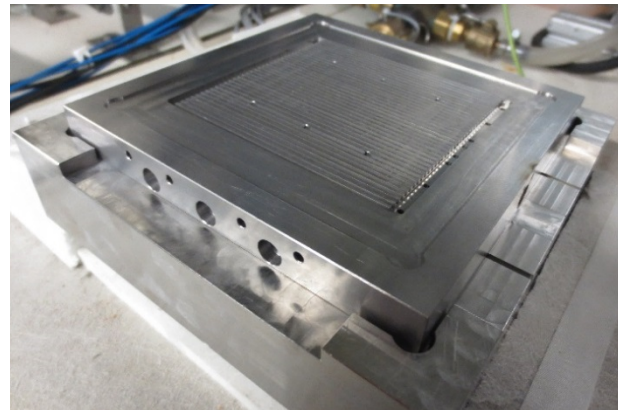


Abbildung 3-2: Crofer-Grundplatte [Quelle: AVL]

Abbildung 3-3 zeigt die eigentliche Brennstoffzelle. Auf das zuvor erwähnte Anoden-Flowfield werden zwei feinmaschige Nickelnetze zur Kontaktierung der Anode und darauf die SOFC gelegt. Die grüne Schicht ist die tragende Anodenschicht, darauf sind der hellgrüne Elektrolyt und die dunkelgrauen Kathoden aufgebracht. Entsprechend Abbildung 3-4 wird darauf ein dünner Stahlrahmen gesetzt, welcher mittels eines Glaslot-Dichtmittels das anodenseitige Brenngasvolumen vom kathodenseitigen Luftvolumen trennt.

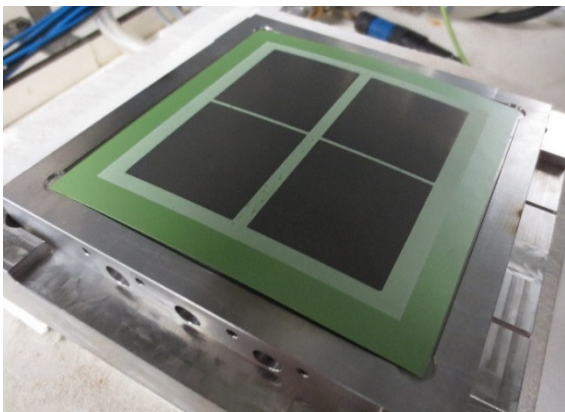


Abbildung 3-3: Brennstoffzelle [Quelle: AVL]

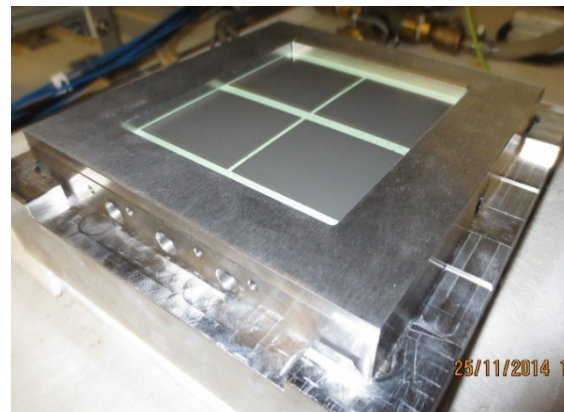


Abbildung 3-4: Stahlrahmen [Quelle: AVL]

Auf den Stahlrahmen wird der gelblich weiße, in Abbildung 3-5 gezeigte Aluminiumoxidkeramik-Rahmen gesetzt. Durch die sechs Bohrungen tritt Luft ins Kathoden-Flowfield ein und wird durch die sechs Kanäle mit Rechtecksquerschnitt wieder abgeführt. Abbildung 3-5 zeigt den Rahmen auf den Kopf gedreht, da die Bohrungen und Kanäle direkt über der Zelle liegen sollten.

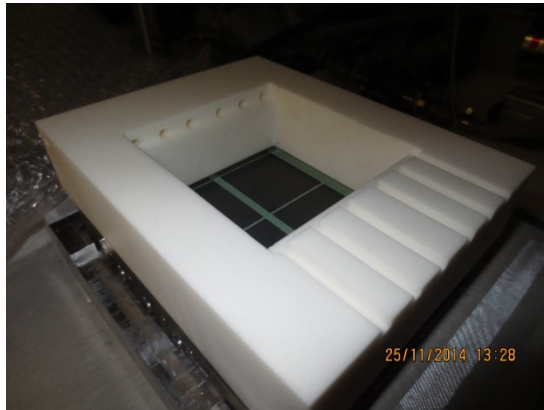


Abbildung 3-5: Keramikrahmen [Quelle: AVL]

In den quadratischen Ausschnitt des Keramikrahmens werden vier Keramikstempel gesetzt. Abbildung 3-6 zeigt die Kanäle, die in den Boden jedes Stempels gefräst sind. Zusammen bilden die vier Stempel damit das kathodenseitige Flowfield. Unter jeden Stempel wird ein Goldnetz entsprechend Abbildung 3-7 zur Kathodenkontaktierung gelegt. Vier an das Netz angelötete Drähte führen den Strom durch die in Abbildung 3-6 erkennbaren Bohrungen ab, während der mittig angeordnete, dünnere fünfte Draht der Spannungsmessung dient.

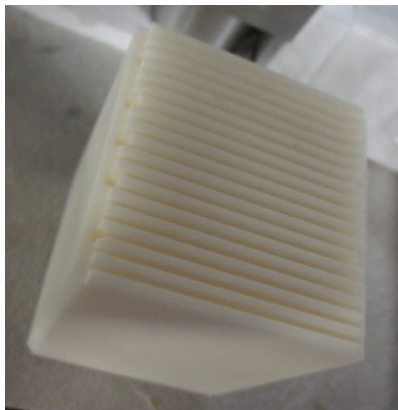


Abbildung 3-6: Keramikstempel [Quelle: AVL]

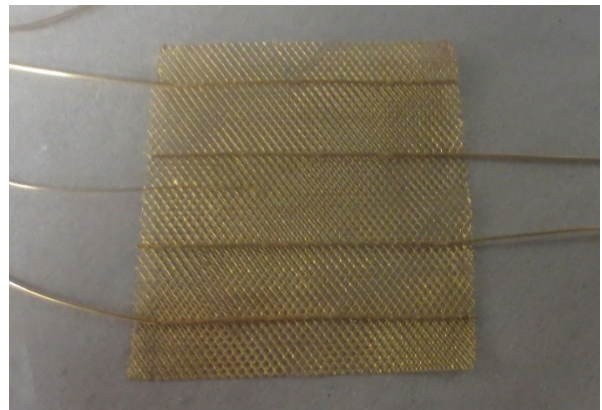


Abbildung 3-7: Goldnetz [Quelle: AVL]

Die vier Keramikstempel werden entsprechend Abbildung 3-8 und Abbildung 3-9 platziert.

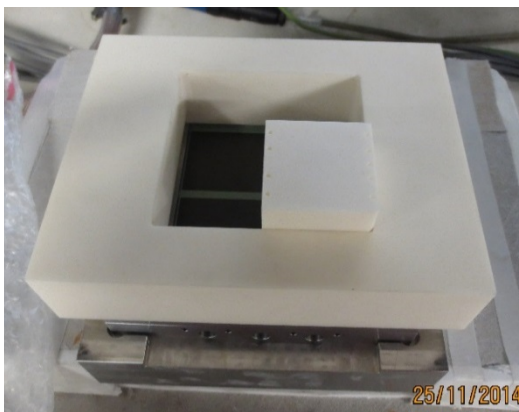


Abbildung 3-8: 1 Stempel eingebaut [Quelle: AVL]

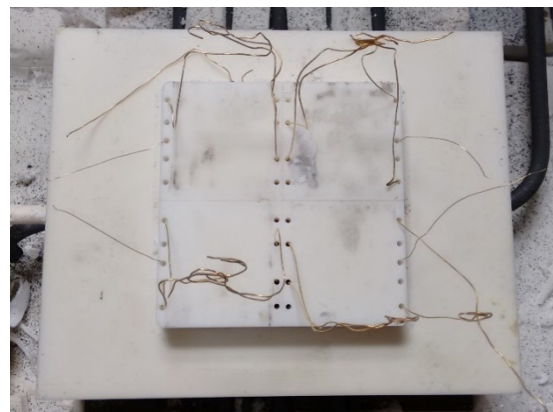


Abbildung 3-9: 4 Stempel eingebaut [Quelle: AVL]

Abschließend werden die Keramikbauteile mit Metallgewichten beschwert, um die Zelle und die Gold- und Nickelnetze aufeinanderzupressen und dadurch eine ausreichende Kontaktierung sicherzustellen.

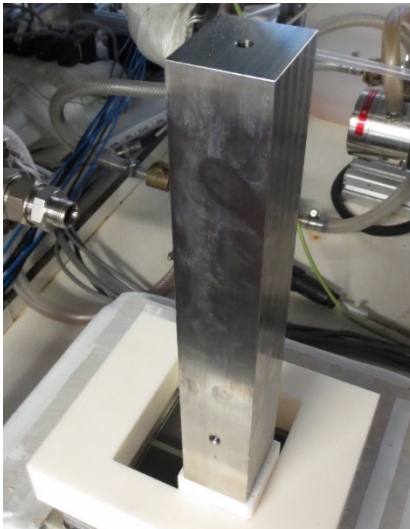


Abbildung 3-10: Zusatzgewicht 1 [Quelle: AVL]

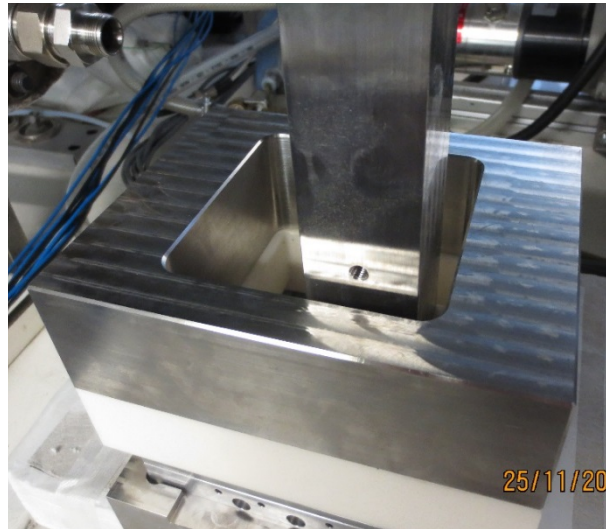


Abbildung 3-11: Zusatzgewicht 2 [Quelle: AVL]

Genau wie der Stahlsockel in Abbildung 3-1 werden auch diese Metallgewichte im Modell nicht als geometrische Körper, sondern durch Randbedingungen berücksichtigt.

Der gesamte beschriebene Aufbau ist in einem elektrisch beheizten Ofen untergebracht.

Abbildung 3-12 zeigt nochmals die Crofer-Grundplatte. Die roten Linien zeigen die Ebene an, in der die 34 Thermoelemente sitzen, die zur Messung des Temperaturprofils dienen.

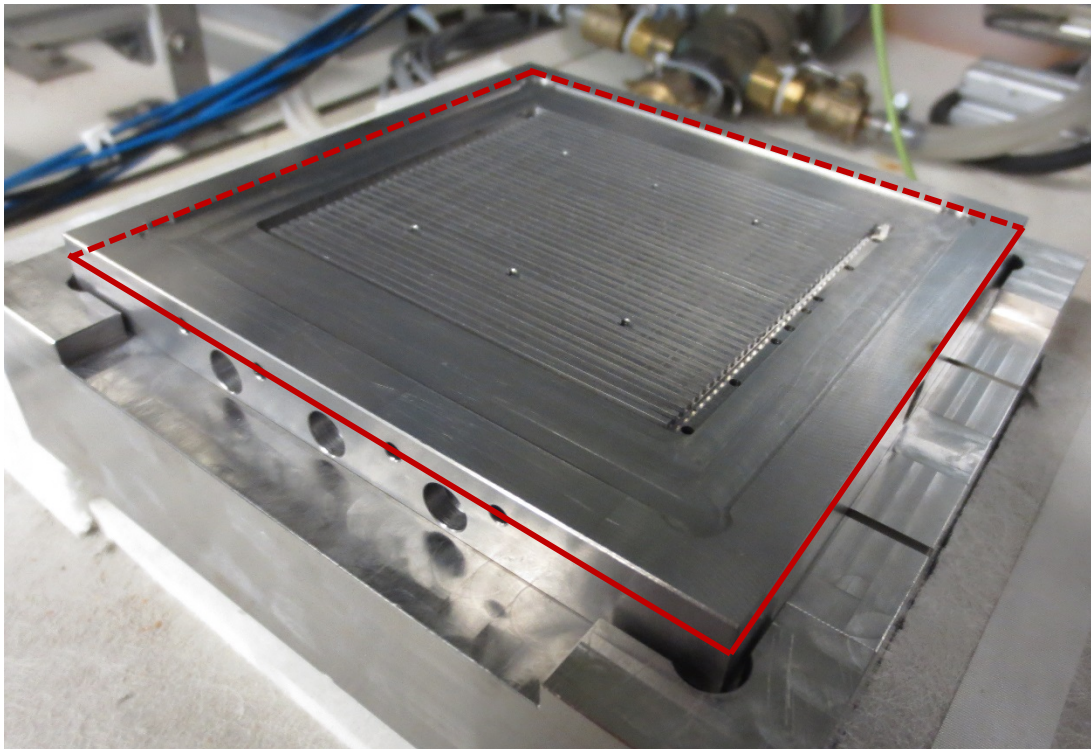


Abbildung 3-12: Thermoelement-Messebene [Quelle: AVL]

Die genauen Positionen der Thermoelemente zeigt Abbildung 3-13.

### 3 Aufbau des Referenz-Prüfstandes

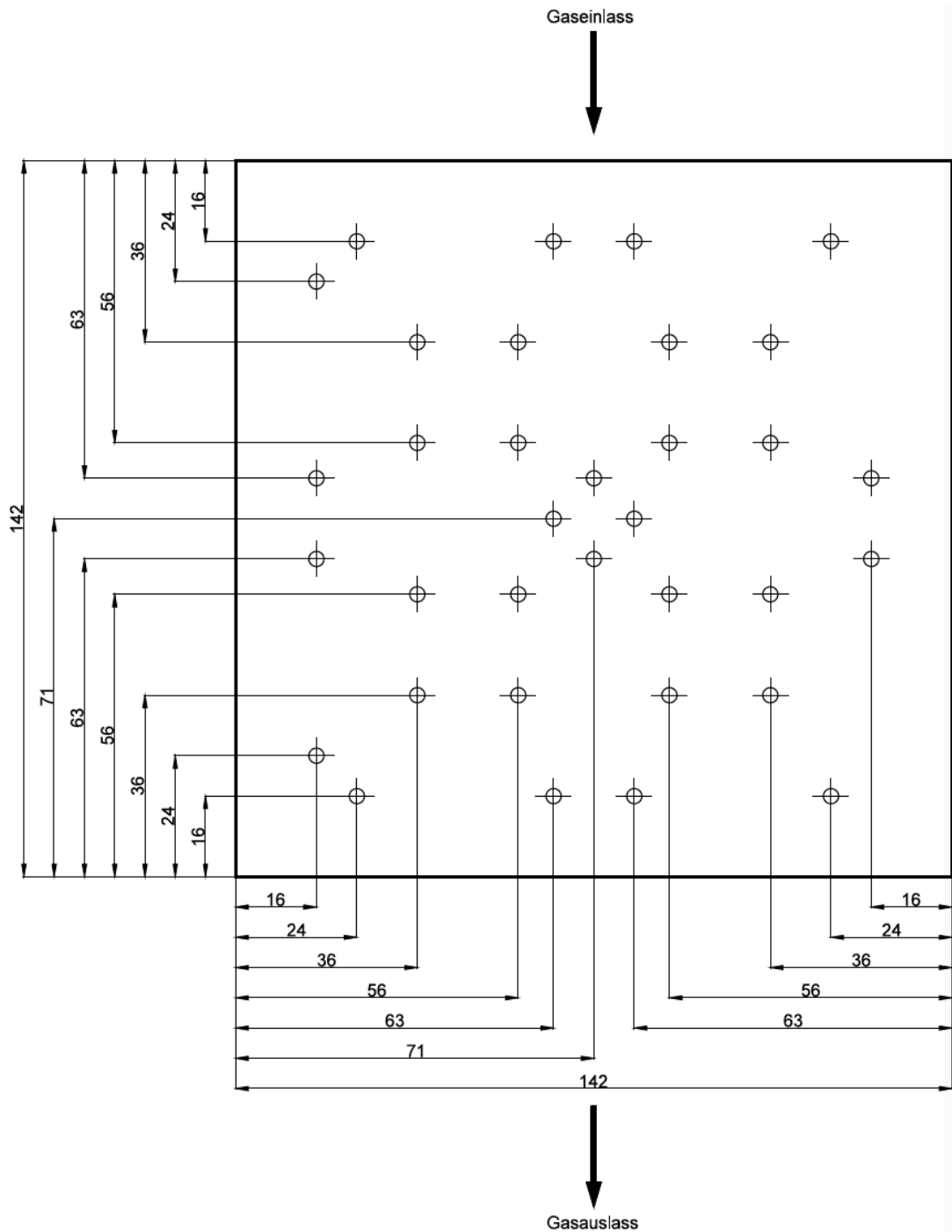


Abbildung 3-13: Thermoelement-Positionen

Die Nummerierung der Thermoelemente erfolgt entsprechend Abbildung 3-14.

Es werden Typ K-Thermoelemente verwendet. Dieser Typ deckt einen Temperaturbereich von  $-200\text{ °C}$  bis  $+1250\text{ °C}$  ab. Die Standardfehlertoleranz des Typs K beträgt 0,75 %. [29]

### 3 Aufbau des Referenz-Prüfstandes

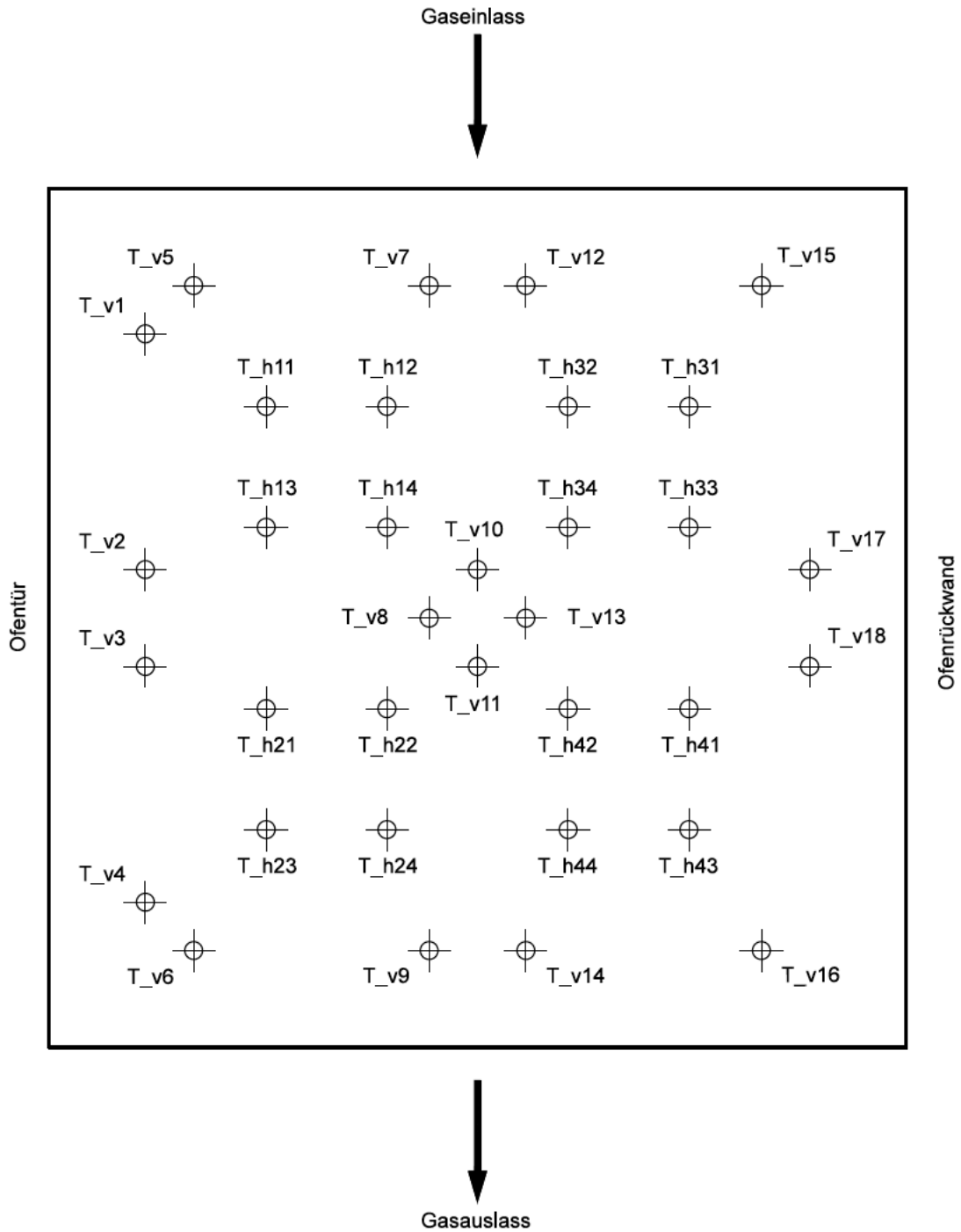


Abbildung 3-14: Nummerierung der Thermoelemente

## 4 SIMULATION

### 4.1 CFD-Simulation mit AVL FIRE®

Für detailliertere Grundlagen der Computational Fluid Dynamics (CFD) sei auf Fabian Rasingers Diplomarbeit [1] verwiesen. Kurz gesagt werden mittels CFD-Simulation Problemstellungen der Strömungsmechanik und Wärmeleitung als Systeme von Differentialgleichungen formuliert und numerisch gelöst. Die grundlegenden Transportgleichungen sind dabei die Kontinuitätsgleichung, drei Impulsgleichungen (Navier-Stokes-Gleichungen) für drei Koordinatenrichtungen und die Energiegleichung. Dabei treten sechs Variablen auf, der Druck  $p$ , die Geschwindigkeitskomponenten  $u$ ,  $v$  und  $w$ , die Dichte  $\rho$  und die Temperatur  $T$ . Zur Ermittlung dieser sechs Variablen müssen die fünf Transportgleichungen durch die ideale Gasgleichung  $p/\rho = R \cdot T$  ergänzt werden. [30]

Der von der betrachteten Strömung durchflossene Raum bzw. der Festkörper, in dem Wärmetransport stattfindet, muss mittels einer Raumdiskretisierung in eine Anzahl kleiner Volumenelemente unterteilt werden, die über die Verbindung ihrer Eckpunkte eine Gitterstruktur bilden. [30]

An jedem so generierten Volumenelement müssen dann die Erhaltungsgleichungen im Gleichgewicht sein. Dazu werden die Gleichungen diskretisiert. Die gängigsten Verfahren dafür sind das Finite Differenzen-Verfahren (FD), Finite Elemente-Verfahren (FE) und Finite Volumen-Verfahren (FV). [30]

#### 4.1.1 Rückblick auf Fabian Rasingers CFD-Modell

Fabian Rasinger erstellte das Gitternetz für seine Simulation entsprechend der in FIRE® üblichen Vorgehensweise mittels automatischer Netzgenerierung aus CAD-Files. Diese automatische Netzgenerierung kann nicht auf die Erstellung von Hexaederzellen beschränkt werden, folglich weist sein Modell auch Tetraederzellen auf. Seine Simulation beinhaltete ein thermisches und Strömungsmodell, aber noch keine Elektrochemie, die hier nun ergänzt werden soll. Die Simulation von Brennstoffzellen in FIRE® stellt an das Gitternetz jedoch die Anforderung, dass es nur aus Hexaederzellen aufgebaut sein soll. Die Verwendung von Tetraeder- oder anderen Zellen führt hier erfahrungsgemäß zu Problemen. Die nachträgliche Ergänzung des automatisch generierten Gitternetzes aus Hexaeder- und Tetraederzellen um ein manuell erstelltes Brennstoffzellen-Gitternetz rein aus Hexaederzellen ist praktisch nicht möglich. Daher wurde die Entscheidung getroffen, sämtliche Bauteile des Modells manuell neu aufzubauen. Das neue Modell wurde auf die gleichen Bauteile wie das alte beschränkt, während auch die selben angrenzenden Bauteile weggelassen wurden (siehe Kapitel 3), um die Randbedingungen übernehmen zu können. Im Nachhinein muss diese Entscheidung überdacht und eine zukünftige Erweiterung um die angrenzenden Bauteile in Erwägung gezogen werden, da das Fehlen von Bauteilen große Unsicherheiten bei der Definition von Randbedingungen verursacht.

#### 4.1.2 Manuelle Netzgenerierung und Selections

Bei der Planung des Gitternetzes muss ein Kompromiss zwischen einer hohen Unterteilung, die genauere Ergebnisse liefert, und einer niedrigen Auflösung in Rücksicht auf die Rechnerkapazitäten getroffen werden. Erfahrungen anderer FIRE®-Anwender haben gezeigt, dass dessen Solver ungefähr 4,8 GB Arbeitsspeicher pro Million Zellen benötigt, während Pre-



und Postprocessing nur 0,7 GB RAM pro Million Zellen in Anspruch nehmen. Der hier verwendete Rechner verfügt über 64 GB Arbeitsspeicher, daher sollte das Modell eine Zellenanzahl von 13 Millionen nicht überschreiten. In Hinsicht auf eine mögliche zukünftige Erweiterung um angrenzende Bauteile wurde ein Ziel von maximal 10 Millionen Zellen gesetzt.

Dem gegenüber stehen verschiedene Mindestanforderungen an die Auflösung des Netzgitters. Die Unterteilung des gesamten Modells quer zur Strömungsrichtung in den Flowfields (x-Richtung im Modell) wird von deren Auflösung vorgeschrieben. Die Flowfields bestehen kathodenseitig und anodenseitig aus jeweils 36 Kanälen mit einem Rechtecksquerschnitt von 1,2 x 1,8 mm. Für diese Kanäle wurde eine Unterteilung von 6 x 6 Zellen gewählt. Rundum ist die Rand-Zellschicht jedes Kanals dünner ausgeführt, um hier genauere Ergebnisse zu produzieren. Für die Stege zwischen den Kanälen wurde eine leicht gröbere Unterteilung in nur 4 x 6 Zellen gewählt, da in den betroffenen Zellen außer Wärme- und elektrischer Leitung nichts von Interesse passiert. Durch die abwechselnde Aneinanderreihung von Kanälen und Stegen wird also die Unterteilung des Modells quer zur Durchströmungsrichtung festgelegt.

Elektroden- und Elektrolytschichten sollten in Richtung ihrer Schichtdicken (y-Richtung im Modell) in mindestens 6 Zellschichten unterteilt werden. Um die Zellenzahl möglichst gering zu halten, wurden die Zellkomponenten auch wirklich in nur 6 Schichten unterteilt. Diese Unterteilung ist in Abbildung 4-1 dargestellt. Die Bezeichnungen der Schichten entsprechen den ab Seite 40 beschriebenen, sogenannten „Cell-Selections“.

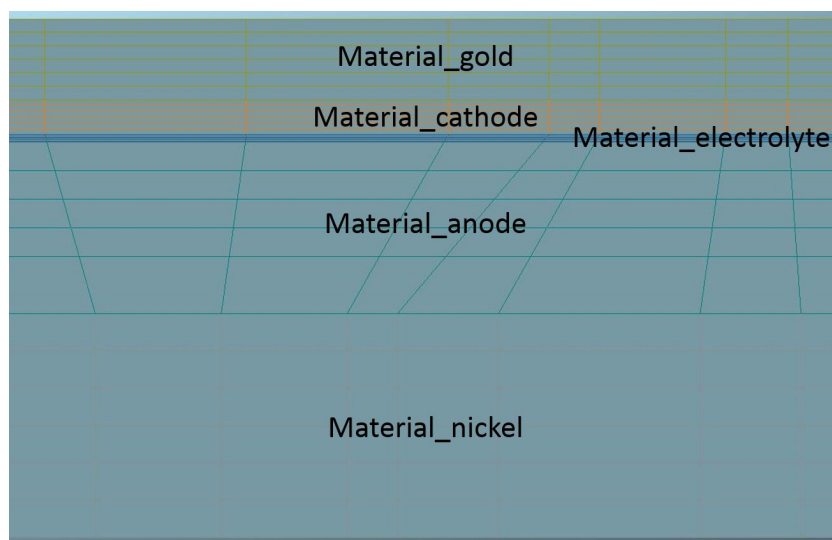


Abbildung 4-1: Unterteilung der Zellschichten

In Strömungsrichtung (z-Richtung im Modell) kann die Auflösung etwas gröber gewählt werden, wobei Abschnitte nahe an quer liegenden Verbindungskanälen, wo Änderungen in der Strömung zu erwarten sind, feiner unterteilt ausgeführt werden sollten.

Die Schichtdicken der simulierten Brennstoffzelle betragen 70  $\mu\text{m}$  für die Kathode, 15  $\mu\text{m}$  für den Elektrolyten und 340  $\mu\text{m}$  für die Anode. Die Unterteilung in 6 Zellschichten bedeutet, dass beispielsweise die Zellen des Elektrolyten eine Stärke von lediglich 2,5  $\mu\text{m}$  haben. Ideal wäre eine gleichmäßige Unterteilung des Modells in alle Koordinatenrichtungen, dementsprechend müsste in jede Richtung eine Unterteilung mit einer Schrittweite von 2,5  $\mu\text{m}$  erfolgen. Dies hätte jedoch eine um etliche Größenordnungen zu hohe Zellenzahl zur Folge. Entlang der Gasströmungsrichtung ist die Brennstoffzelle deshalb in relativ groben Schritten von bis zu 1 mm unterteilt. Die Zellen im betrachteten Bereich des Elektrolyten weisen deshalb Seitenverhältnisse von bis zu 400 : 1 auf. Derart gezerrte und gestauchte Zellen sind schlecht für die Genauigkeit der Berechnung; aufgrund der zuvor beschriebenen Unter- und Obergrenzen für die Modellunterteilung muss dies hier jedoch in Kauf genommen werden. Auf dieses sogenannte „Aspect Ratio“ wird später bei den „Mesh Checks“ nochmals eingegangen.

Für Bohrungen muss eine Vereinfachung getroffen werden. In die Croferplatte, die das anodenseitige Flowfield beinhaltet und gleichzeitig das anodenseitige Interconnect darstellt, sind mehrere Kanäle zur Gaszu- und -abfuhr gebohrt. Der Abbildung eines Zylinders in einem Hexaedernetz ist zwar mit Einschränkungen möglich, aber Stellen, an denen zwei Zylinder miteinander geschnitten werden müssen, lassen sich manuell kaum realisieren. Dies ist insbesondere dann der Fall, wenn die beiden Zylinder unterschiedliche Durchmesser haben.

Aus diesem Grund wurden Bohrungen durch Kanäle mit Rechtecksquerschnitt ersetzt. Als Referenzgröße lassen sich beispielsweise Umfang oder Fläche des Bohrungsquerschnittes wählen. Die Entscheidung fiel auf gleiche Querschnittsflächen, also wurde zum Beispiel eine Bohrung mit Durchmesser 5 mm durch einen Kanal mit quadratischem Querschnitt von 4,431 mm Seitenlänge ersetzt.

Die Auswirkung dieser Vereinfachung kann zwar nicht ohne ein Vergleichsmodell untersucht werden, aufgrund der geringen Strömungsgeschwindigkeiten und Durchflussmengen wird sie jedoch als vernachlässigbar eingeschätzt.

Als weitere Vereinfachung wurden einige Bohrungen nicht im Modell berücksichtigt. Die betroffenen Kanäle dienen im realen Versuch der Gasentnahme im Anoden-Flowfield zur Messung der Gaszusammensetzung. Im Referenz-Versuch waren die Kanäle verschlossen und es wurde kein Gas abgezweigt. Diese „Sackgassen“ haben keinen Einfluss auf die Gaszusammensetzung an den Elektroden und werden folglich als vernachlässigbar betrachtet.

Das gesamte Modell wurde ausgehend von den Flowfield-Kanälen aufgebaut, da deren Unterteilung – wie schon beschrieben – die Unterteilung des gesamten Modells diktiert. Dabei kamen Werkzeuge wie das Extrudieren von Flächen, die Translation einzelner Gitternetzpunkte, Translation und Rotation von Zellsegmenten, Spiegelungen, Korrektur von Unterteilungsschritten usw. zum Einsatz.

Abbildung 4-3 zeigt das neu aufgebaute Gitternetzmodell im Vergleich zum automatisch generierten Gitternetz von Fabian Rasinger in Abbildung 4-2.

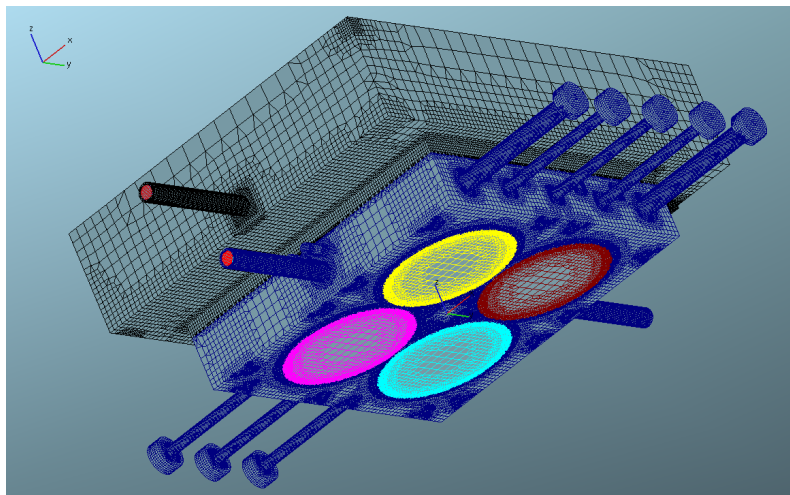


Abbildung 4-2: Fabian Rasingers automatisch generiertes Netzgitter [1]

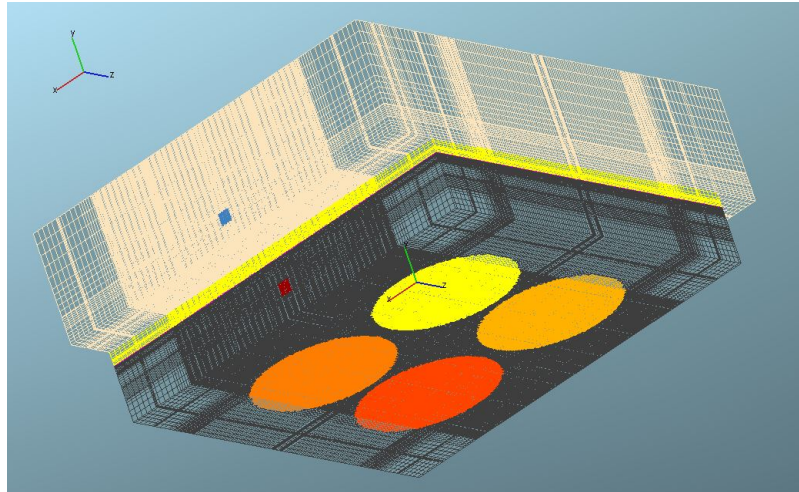


Abbildung 4-3: Hexaeder-basiertes Netzgitter

Die Gasanschlüsse wurden nicht mitmodelliert, da die internen Kanäle ausreichend lang sind, dass sich die Strömung entwickeln kann. Abbildung 4-2 veranschaulicht den großen Vorteil des automatisch generierten Gitternetzes, nämlich die Möglichkeit, runde Geometrien sauber abzubilden, was durch den Einsatz von Nicht-Hexaederzellen geschieht. Die Hexaederzellen weisen quadratische Seitenflächen auf, sodass das Aspect Ratio erfüllt wird.

Abbildung 4-4 zeigt das Gittermodell aus Abbildung 4-3 in seine einzelnen Komponenten zerlegt ohne Darstellung der einzelnen Gitterzellen.

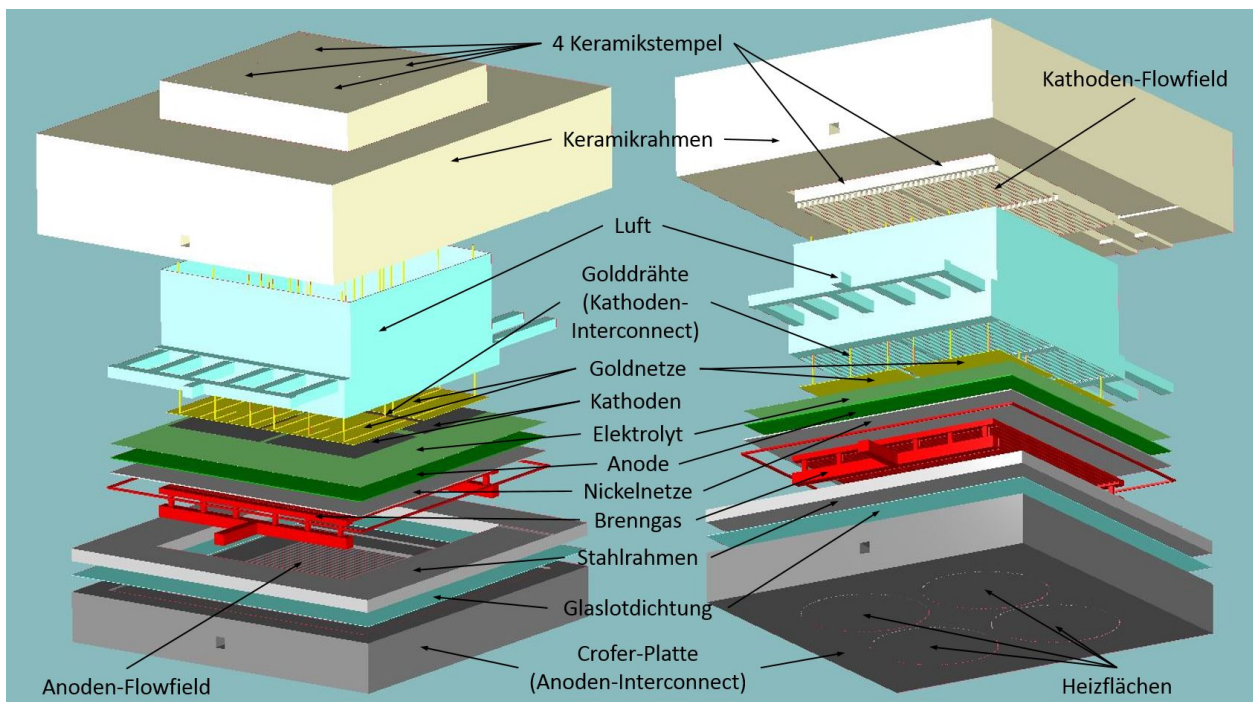


Abbildung 4-4: Explosionsdarstellung des CFD-Gittermodells

Zur Bearbeitung des Modells und der Definition von Materialien und Randbedingungen arbeitet FIRE<sup>®</sup> mit sogenannten „Selections“, die einzelne Bereiche des Modells kennzeichnen. Solche Bereiche können aus „Cells“ (Zellen), „Faces“ (Seitenflächen von Zellen) oder „Nodes“ (Eckpunkten von Zellen) bestehen. Letztere werden für die Modifizierung der Geometrie des Netzgitters bzw. einzelner Zellen benötigt. Mittels Cell-Selections werden Bereiche des Netzgitters unterschieden, um mehrere Materialien festlegen zu können. Face-Selections dienen während der Gitternetzerstellung als Ausgangsflächen für das Extrudieren neuer Zellen und wenn das Gitternetz vollständig aufgebaut ist, werden auf ihnen Randbedingungen definiert.

➤ Cell-Selections:

Da der „Zugriff“ auf Zellen und Zellbereiche im Inneren des Gitternetzes nur über das Ausblenden der äußeren Zellbereiche funktioniert, ist es ratsam, die einzelnen Komponenten des Modells als separate Gitternetze aufzubauen, wobei natürlich auf eine identische Unterteilung geachtet werden muss. Dann wird in jedem Gitternetz eine Cell-Selection erstellt, die sämtliche Zellen des Gitternetzes umfasst. Beim anschließenden Zusammenfügen der einzelnen Gitternetze in ein Gesamt-Gitternetz werden auch die erstellten Cell-Selections übernommen. Somit lassen sich die einzelnen (Material-)Bereiche sauber definieren.

Die Benennung von Festkörper-Cell-Selections muss immer mit „Material\_“ beginnen, damit FIRE® sie als solche erkennt. Gasgefüllte Volumina werden ebenfalls als Cell-Selections definiert, jedoch nicht mit „Material\_“ gekennzeichnet. In Abbildung 4-5 bis Abbildung 4-8 wird die Einteilung des Gesamtmodells mit Benennung der einzelnen Cell-Selections gezeigt. (Zum Vergleich siehe auch Abbildung 4-4.)

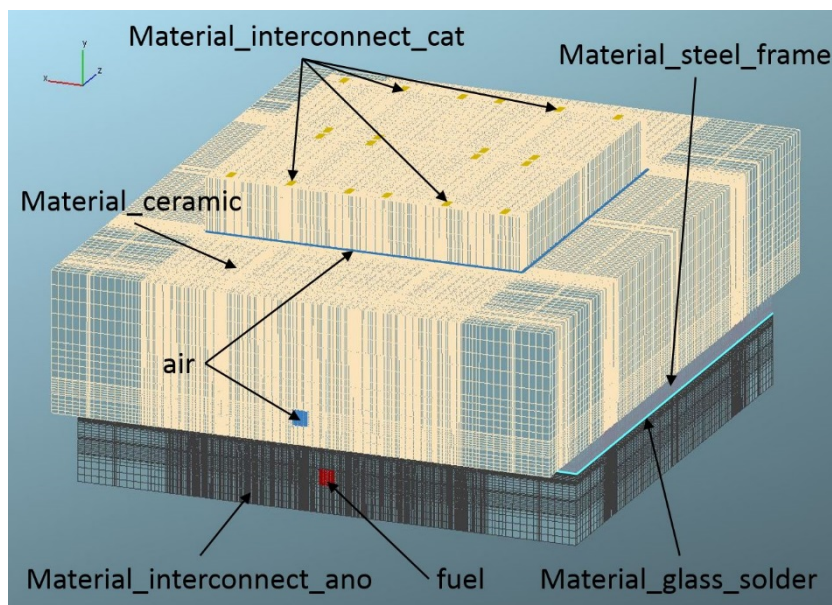


Abbildung 4-5: Cell-Selections, gaseingangsseitige Ansicht

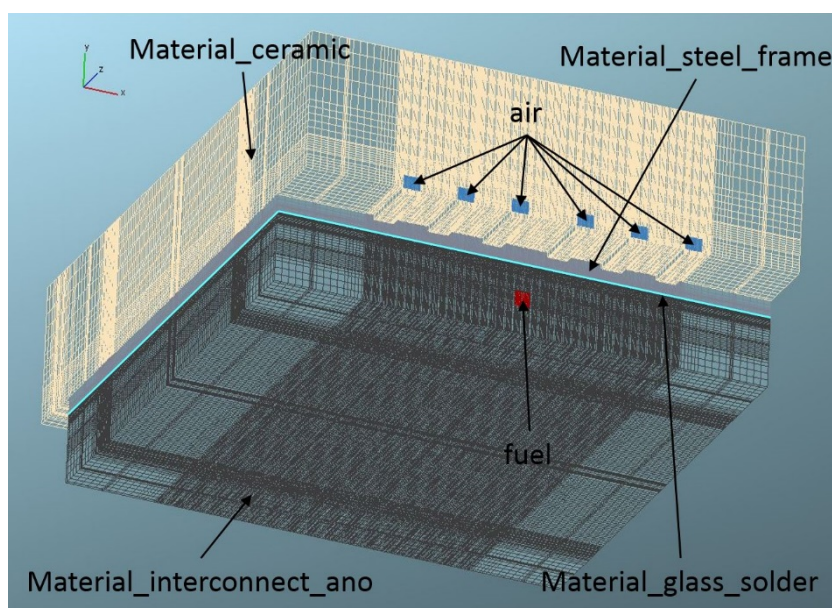


Abbildung 4-6: Cell-Selections, gasausgangsseitige Ansicht

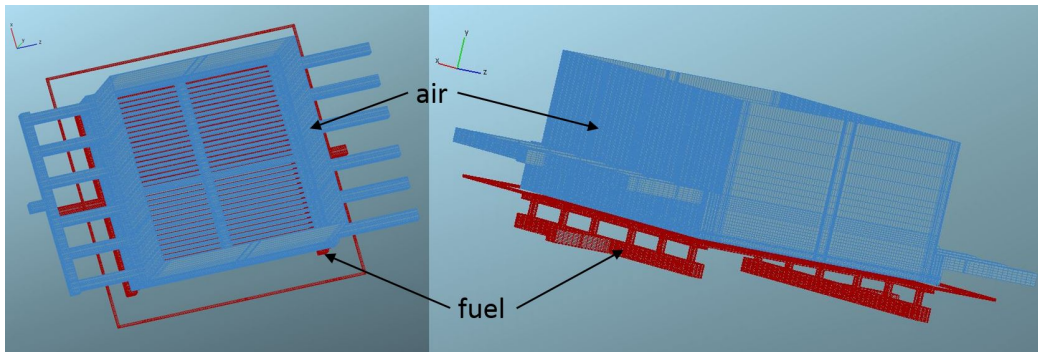


Abbildung 4-7: Gasdurchströmte Volumina

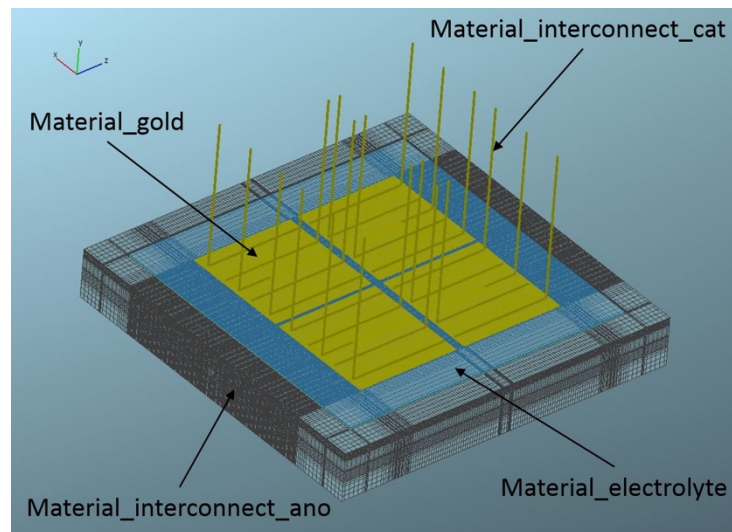


Abbildung 4-8: Interconnect-Cell-Selections

Abbildung 4-8 zeigt die Golddrähte und deren Anordnung auf den Goldnetzen.

- **Material\_anode:** Diese Cell-Selection definiert die Anodenschicht.
- **Material\_anode\_and\_nickel:** Diese Cell-Selection fasst die Anode und die Nickelnetze zusammen. Sie wird benötigt, weil FIRE® direkten Kontakt zwischen der Anode und dem Anodeninterconnect erwartet, das Nickelnetz jedoch dazwischen liegt. Daher wird als Anode die Summe der beiden Teile angegeben und über „if... elseif...“-Bedingungen werden den Cell-Selections der Einzelteile „Material\_anode“ und „Material\_nickel“ die jeweiligen Materialkennwerte zugewiesen.
- **Material\_cathode:** Diese Cell-Selection definiert die Kathodenschicht.
- **Material\_cathode\_and\_gold:** Der Zweck dieser Cell-Selection ist analog zu dem von „Material\_anode\_and\_nickel“.
- **Material\_ceramic:** Diese Cell-Selection definiert die keramischen Bauteile.
- **Material\_electrolyte:** Diese Cell-Selection definiert die Elektrolytschicht.
- **Material\_glass\_solder:** Diese Cell-Selection definiert die Glaslotdichtung.
- **Material\_gold:** Diese Cell-Selection definiert die Goldnetze.
- **Material\_interconnect\_ano:** Diese Cell-Selection definiert das Anodeninterconnect, also die Crofer-Platte, in die das Anoden-Flowfield eingefräst ist.

- **Material\_interconnect\_cat:** Diese Cell-Selection definiert das Kathodeninterconnect, das aus den zwanzig Golddrahnen besteht.
- **Material\_nickel:** Diese Cell-Selection definiert die Nickelnetze.
- **Material\_steel\_frame:** Diese Cell-Selection definiert den Stahlrahmen, der mittels Glaslot auf die Crofer-Platte geklebt wird.
- **air:** Diese Cell-Selection definiert das Volumen, durch welches der Luftstrom gefuhrt wird, bestehend aus diversen Bohrungen und dem Kathoden-Flowfield.
- **fuel:** Diese Cell-Selection definiert das Volumen, durch welches der Brenngasstrom gefuhrt wird, bestehend aus diversen Bohrungen und dem Anoden-Flowfield.

➤ **Face-Selections:**

Abbildung 4-9 und Abbildung 4-10 zeigen die Lage der Face-Selections am Gittermodell. Die genauen Einstellungen der zugehorigen Randbedingungen sind in Kapitel 4.1.4 beschrieben.

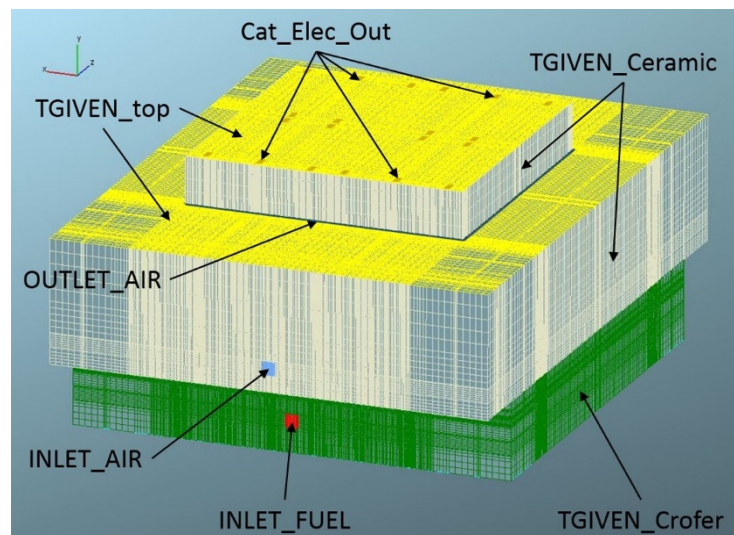


Abbildung 4-9: Face-Selections, gaseingangsseitige Ansicht

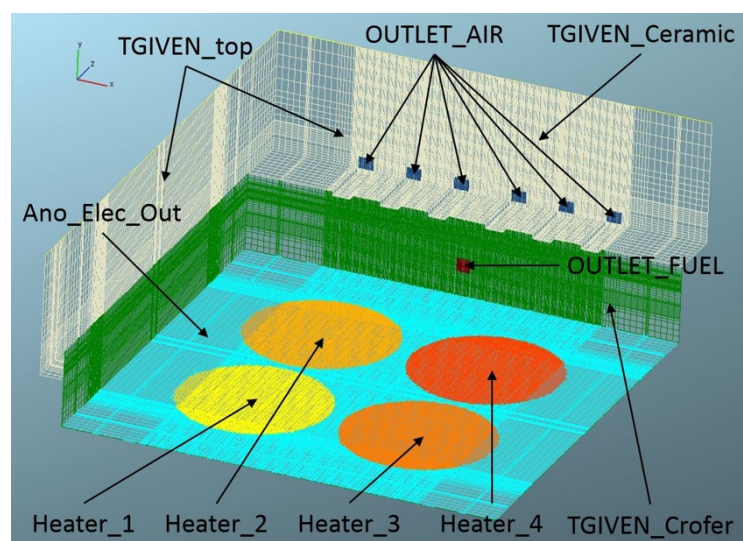


Abbildung 4-10: Face-Selections, gasausgangsseitige Ansicht

- **Ano\_Elec\_Out:** Diese Face-Selection bezeichnet die Unterseite der Crofer-Platte, die das Anodeninterconnect darstellt und Teil des externen Stromkreises ist. Ausgenommen sind die vier Kreisflächen „Heater\_1“ bis „Heater\_4“.
- **Cat1\_Elec\_Out:** Diese Face-Selection an der Oberseite der Keramikstempel stellt die Schnittfläche der fünf Golddrähte des Kathodensegments Nr. 1 dar und definiert dessen elektrischen Ausgang.
- **Cat2\_Elec\_Out:** Diese Face-Selection an der Oberseite der Keramikstempel stellt die Schnittfläche der fünf Golddrähte des Kathodensegments Nr. 2 dar und definiert dessen elektrischen Ausgang.
- **Cat3\_Elec\_Out:** Diese Face-Selection an der Oberseite der Keramikstempel stellt die Schnittfläche der fünf Golddrähte des Kathodensegments Nr. 3 dar und definiert dessen elektrischen Ausgang.
- **Cat4\_Elec\_Out:** Diese Face-Selection an der Oberseite der Keramikstempel stellt die Schnittfläche der fünf Golddrähte des Kathodensegments Nr. 4 dar und definiert dessen elektrischen Ausgang.
- **Cat\_Elec\_Out:** Diese Face-Selection an der Oberseite der Keramikstempel besteht aus den Schnittflächen der zwanzig Golddrähte, die als kathodenseitiges Interconnect fungieren, und stellt den kathodenseitigen elektrischen Ausgang dar. Die Selection ist die Summe der vier Selections „Cat1\_Elec\_Out“ bis „Cat4\_Elec\_Out“. In Abbildung 4-9 sind nur die Schnittflächen der vier Drähte zur Spannungsmessung markiert, jedoch sind auch die anderen sechzehn dunkelgelb markierten Flächen Teil dieser Face-Selection.
- **Heater\_1:** Diese kreisrunde Face-Selection liegt auf der Unterseite der Crofer-Platte und stellt die Fläche dar, über die der Wärmestrom des Heizelements für Segment 1 zugeführt wird.
- **Heater\_2:** Diese kreisrunde Face-Selection liegt auf der Unterseite der Crofer-Platte und stellt die Fläche dar, über die der Wärmestrom des Heizelements für Segment 2 zugeführt wird.
- **Heater\_3:** Diese kreisrunde Face-Selection liegt auf der Unterseite der Crofer-Platte und stellt die Fläche dar, über die der Wärmestrom des Heizelements für Segment 3 zugeführt wird.
- **Heater\_4:** Diese kreisrunde Face-Selection liegt auf der Unterseite der Crofer-Platte und stellt die Fläche dar, über die der Wärmestrom des Heizelements für Segment 4 zugeführt wird.
- **INLET\_AIR:** Diese quadratische Face-Selection liegt auf der Stirnfläche des Keramikrahmens und stellt den Eingang der im Modell integrierten Luftkanäle (Cell-Selection „air“) dar.
- **INLET\_FUEL:** Diese quadratische Face-Selection liegt auf der Stirnfläche der Crofer-Platte und stellt den Eingang der im Modell integrierten Brenngaskanäle (Cell-Selection „fuel“) dar.
- **OUTLET\_AIR:** Diese Face-Selection besteht aus sechs quadratischen Flächen auf der Rückseite des Keramikrahmens. Dazu gehört noch ein schmaler Rahmen aus Faces rund um die Keramikstempel, da auch Luft durch den dünnen Spalt zwischen den Stempeln

und dem Keramikrahmen austritt. Die Selection stellt also den Ausgang der im Modell integrierten Luftkanäle (Cell-Selection „air“) dar.

- OUTLET\_FUEL: Diese quadratische Face-Selection liegt auf der Rückseite der Crofer-Platte und stellt den Ausgang der im Modell integrierten Brenngaskanäle (Cell-Selection „fuel“) dar.
- TGIVEN\_Ceramic: Diese Face-Selection umfasst alle senkrechten Flächen der Keramikbauteile sowie die Unterseite des Keramikrahmens, wo er über den Stahlrahmen hinausragt.
- TGIVEN\_Crofer: Diese Face-Selection beinhaltet die vertikalen Seitenflächen der Crofer-Platte, der Glaslotdichtung und des Stahlrahmens.
- TGIVEN\_top: Diese Face-Selection umfasst die horizontalen Oberseiten der Keramikbauteile.
- contact\_ano\_nickel: Diese Face Selection wird im Inneren des Modells definiert. Sie umfasst alle Faces, die den Kontakt zwischen den Cell-Selections „Material\_anode“ und „Material\_nickel“ herstellen.
- contact\_cat\_gold: Diese Face Selection wird im Inneren des Modells definiert. Sie umfasst alle Faces, die den Kontakt zwischen den Cell-Selections „Material\_cathode“ und „Material\_gold“ herstellen.

Bevor eine Simulation auf dem neuen Gitternetz aufgesetzt wird, ist es ratsam, die Gitterqualität zu überprüfen. Durch die Identifizierung und Beseitigung von unsauberen Stellen im Gitternetz können Probleme während der Berechnung vermieden und die Stabilität der Berechnung erhöht werden. In FIRE<sup>®</sup> lassen sich „schlechte“ Zellen mit dem „Mesh Checks“-Werkzeug finden. Das Netz kann dazu anhand verschiedener Kriterien überprüft werden. Die Kriterien der „Important checks“ müssen erfüllt werden, um eine Berechnung zu gewährleisten, während das Erfüllen der „Additional checks“-Kriterien eine genauere Lösung verspricht. Abbildung 4-11 zeigt das Ergebnis der Gitternetzüberprüfung.

Die Kriterien „Negative volume“ und „Negative normal distance“ suchen Zellen, deren Eckpunkte so weit verschoben wurden, dass sich eigentlich gegenüberliegende Seitenflächen einer Zelle gegenseitig schneiden.

„Partially negative volume“ und „Partially negative volume (alternative)“ betreffen Zellen, die einen Eckpunkt aufweisen, der so weit ins Innere der Zelle geschoben wurde, dass die an den Eckpunkt angrenzenden Seitenflächen eine Konkavität bilden.

„Duplicated cells“ liegen vor, wenn sich zwei Zellen schneiden oder sie sogar deckungsgleich sind.

„Identical vertex“ bezeichnet deckungsgleiche Eckpunkte zweier benachbarter Zellen, deren gemeinsame Seitenfläche nicht verbunden wurde, was beispielsweise nach dem Extrudieren neuer Zellen und dem anschließenden Einfügen ins bestehende Modell passieren kann.

Eine „Irregular connection“ liegt vor, wenn sich zwei Hexaedern nur entlang einer Kante berühren und sonst zwischen ihnen keine Verbindung durch andere Zellen vorhanden ist.

Wie Abbildung 4-11 zeigt, liegt im gesamten Modell keine einzige Zelle vor, die eines dieser Kriterien erfüllen würde. Somit kann das Modell zur Berechnung verwendet werden.

Das Kriterium „Aspect ratio“ unter „Additional checks“ wurde zuvor schon erwähnt. Es beschreibt Zellen mit stark unterschiedlichen Seitenlängen. Hier wird ein maximales Seitenverhältnis von 10 : 1 zugelassen, bevor eine Zelle das Kriterium erfüllt. Wie schon zuvor beschrieben, beinhaltet das Gitternetz beispielsweise im Bereich des Elektrolyten Zellen mit einem Seitenverhältnis von 400 : 1, was aufgrund der geforderten Mindestunterteilung und begrenzten Zellenzahl nicht umgangen werden kann. Insgesamt weist das Modell 3.345.536 Zellen auf, die das Aspect ratio von 10 überschreiten, es sind also 40,281 % aller Zellen betroffen.



Der Mesh Check gibt auch Aufschluss über die Gesamtzellenzahl. Das Gittermodell besteht aus 8.305.582 Hexaederzellen.

<input checked="" type="checkbox"/> Criteria	Number	Percent(%)	Lower limit	Upper limit
<b>Important checks</b>				
<input checked="" type="checkbox"/> Negative volume	0	0.000		
<input checked="" type="checkbox"/> Negative normal distance	0	0.000		
<input checked="" type="checkbox"/> Partially negative volume	0	0.000	1E-020	
<input checked="" type="checkbox"/> Partially negative volume (alternative)	0	0.000	1E-020	
<input checked="" type="checkbox"/> Cell orthogonality [cos alpha]	0	0.000	0.08	
<input checked="" type="checkbox"/> Duplicated cells	0	0.000		
<input checked="" type="checkbox"/> Identical vertex	0	0.000		
<input checked="" type="checkbox"/> Irregular connection	0	0.000		
<b>union set</b>	<b>0</b>	<b>0.000</b>		
<b>Additional checks</b>				
<input checked="" type="checkbox"/> Aspect ratio [-]	3345536	40.281	10	
<input checked="" type="checkbox"/> Aspect ratio (volume based) [-]	0	0.000	3.3	
<input type="checkbox"/> Cell / Edge angle [°]	-	-	0	5
<input type="checkbox"/> Face / Face angle [°]	-	-	0	5
<b>Summary</b>				
<b>Total number of cells</b>	<b>8305582</b>	<b>100.000</b>		
intersection	0	0.000		
<b>union set</b>	<b>3345536</b>	<b>40.281</b>		

Abbildung 4-11: Mesh Checks in AVL FIRE®

### 4.1.3 Materialparameter

Die Integration der Zellkomponenten in die CFD-Simulation verlangt die Angabe ihrer Porositätswerte und Tortuositätswerte sowie die Beschreibung des thermischen bzw. elektrischen Verhaltens ihrer Materialien. Dieses Verhalten wird durch Wärmeleitfähigkeiten und spezifische Wärmekapazitäten bzw. elektrische oder ionische Leitfähigkeiten charakterisiert. Auch die Wärmeleitfähigkeiten, die spezifischen Wärmekapazitäten und Dichten aller anderen Bauteile müssen angegeben werden, um eine möglichst realitätsgetreue Simulation zu erstellen. Viele dieser Größen sind jedoch nicht konstant, sondern temperaturabhängige Funktionen. Tabelle 1 gibt einen Überblick über sämtliche Materialparameter. Im Anschluss wird die Herleitung jeder Formel erläutert bzw. die Quelle der Werte und Formeln angegeben.

## 4 Simulation

Tabelle 1: Materialparameter

Bauteil	Wert/Formel
<b>Porosität <math>\varepsilon</math></b>	
Anode	$\varepsilon_{Ni-YSZ} = 0,4$
Kathoden	$\varepsilon_{LSM} = 0,3$
Goldnetze	$\varepsilon_{GN} = 0,75$
Nickelnetze	$\varepsilon_{NN} = 0,626$
<b>Tortuosität <math>\tau</math></b>	
Anode	$\tau_{Ni-YSZ} = 5$
Kathoden	$\tau_{LSM} = 5$
Goldnetze	$\tau_{GN} = 2.5$
Nickelnetze	$\tau_{NN} = 2.5$
<b>Wärmeleitfähigkeit <math>\lambda</math></b>	
Anode	$\lambda_{Ni-YSZ} = 2 \text{ W}/(\text{m} \cdot \text{K})$
Elektrolyt	$\lambda_{YSZ}(T) = 2,27430 - 1,79104 \cdot 10^{-4} \cdot T \text{ W}/(\text{m} \cdot \text{K})$
Kathoden	$\lambda_{LSM} = 2 \text{ W}/(\text{m} \cdot \text{K})$
Gold	$\lambda_{Au} = 310 \text{ W}/(\text{m} \cdot \text{K})$
Nickel	$\lambda_{Ni} = 85 \text{ W}/(\text{m} \cdot \text{K})$
Crofer	$\lambda_{Crofer}(T) = 23 \cdot (1 - 2,53623 \cdot 10^{-4} \cdot (T - 673,15) + 9,05797 \cdot 10^{-7} \cdot (T - 673,15)^2) \text{ W}/(\text{m} \cdot \text{K})$
Keramik	$\lambda_{Al2O3,1}(T) = 31,9 \cdot (1 - 0,00229 \cdot (T - 293,15) + 1,66666 \cdot (T - 293,15)^2) \text{ W}/(\text{m} \cdot \text{K})$
Glaslot	$\lambda_{GL} = 1 \text{ W}/(\text{m} \cdot \text{K})$
<b>Spezifische Wärmekapazität <math>c</math></b>	
Anode	$c_{Ni-YSZ} = 470 \text{ J}/(\text{kg} \cdot \text{K})$
Elektrolyt	$c_{8YSZ} = 471 \text{ J}/(\text{kg} \cdot \text{K})$
Kathoden	$c_{LSM} = 470 \text{ J}/(\text{kg} \cdot \text{K})$
Gold	$c_{Au} = 130 \text{ J}/(\text{kg} \cdot \text{K})$
Nickel	$c_{Ni} = 444 \text{ J}/(\text{kg} \cdot \text{K})$
Crofer	$c_{Crofer} = 610 \cdot (1 + 3,96175 \cdot 10^{-4} \cdot (T - 673,15) - 4,78142 \cdot 10^{-7} \cdot (T - 673,15)^2) \text{ J}/(\text{kg} \cdot \text{K})$
Keramik	$c_{Al2O3} = 780 \text{ J}/(\text{kg} \cdot \text{K})$
Glaslot	$c_{GL} = 800 \text{ J}/(\text{kg} \cdot \text{K})$
<b>Elektrische Leitfähigkeit <math>\sigma</math></b>	
Anode	$\sigma_{Ni-YSZ}(T) = \frac{9,5 \cdot 10^7}{T} \cdot e^{-\frac{1150}{T}} \Omega^{-1} \cdot \text{m}^{-1}$
Elektrolyt	$\sigma_{YSZ}(T) = \frac{100}{0,3685 + 0,002838 \cdot e^{\frac{10300}{T}}} \Omega^{-1} \cdot \text{m}^{-1}$
Kathoden	$\sigma_{LSM}(T) = \frac{4,2 \cdot 10^7}{T} \cdot e^{-\frac{1200}{T}} \Omega^{-1} \cdot \text{m}^{-1}$
Gold	$\sigma_{Au}(T) = \frac{10^8}{7,96 \cdot (1 + 1,38461 \cdot 10^{-3} \cdot (T - 865) + 6,78743 \cdot 10^{-7} \cdot (T - 865)^2)} \Omega^{-1} \cdot \text{m}^{-1}$
Nickel	$\sigma_{Ni}(T) = \frac{1}{7 \cdot 10^{-8} \cdot (1 + 6 \cdot 10^{-3} \cdot (T - 293,15))} \Omega^{-1} \cdot \text{m}^{-1}$
Crofer	$\sigma_{Crofer}(T) = \frac{10^7}{10,5 \cdot (1 + 3,96825 \cdot 10^{-4} \cdot (T - 873,15) + 3,97 \cdot 10^{-7} \cdot (T - 873,15)^2)} \Omega^{-1} \cdot \text{m}^{-1}$

## 1. Porositätswerte:

Als poröse Materialien müssen natürlich die Elektroden modelliert werden. Da eine geometrische Modellierung der Goldnetze und des Nickelnetzes zur Kontaktierung der Elektroden eine viel zu hohe Auflösung benötigen und dadurch die Rechenkapazität überfordern würde, werden auch diese Netze als poröse Materialien in die Simulation integriert.

## ➤ Anode:

Der Wert der Porosität  $\varepsilon$  des Anodenmaterials Ni-8YSZ nach Gleichung (4-1) stammt von einer AVL-internen Quelle.

$$\varepsilon_{Ni-YSZ} = 0,4 \quad (4-1)$$

## ➤ Elektrolyt:

Der Wert der Porosität  $\varepsilon$  des Elektrolytmaterials YSZ nach Gleichung (4-2) stammt von einer AVL-internen Quelle. FIRE<sup>®</sup> verlangt zwar keine Angabe dieses Wertes, aber der Vollständigkeit halber soll er hier angeführt werden.

$$\varepsilon_{YSZ} < 0,05 \quad (4-2)$$

## ➤ Kathode:

Der Wert der Porosität  $\varepsilon$  des Kathodenmaterials LSM nach Gleichung (4-3) stammt von einer AVL-internen Quelle.

$$\varepsilon_{LSM} = 0,3 \quad (4-3)$$

## ➤ Goldnetze:

Der Porositätswert  $\varepsilon$  der Goldnetze wird aus geometrischen Überlegungen ermittelt. Dazu müssen die Maschenweite und die Drahtstärke bekannt sein. Vereinfachend wird nur eine Masche des Netzes betrachtet. Der Porositätswert  $\varepsilon$ , der sich für eine einzelne Masche berechnen lässt, repräsentiert das gesamte Netz, unabhängig von dessen äußeren Abmessungen.

Die Abmessung einer Masche ist mit 1,4 x 0,92 mm angegeben. Abbildung 4-12 zeigt die idealisierte Geometrie des betrachteten Netzelementes. Das Volumen, welches die Golddrähte im betrachteten roten Bereich einnehmen, beträgt ungefähr den Drahtquerschnitt mal der Drahtlänge. Entlang der vier orange Linien wird der einfache Querschnitt verwendet und entlang der grünen Linien der doppelte, da hier zwei sich überkreuzende Drähte übereinander liegen. Entlang der blauen Linien wird nur die Hälfte des Drahtes betrachtet, da die andere Hälfte zur angrenzenden Masche gezählt wird, aber es liegen wieder zwei sich kreuzende Drähte übereinander, also muss hier wieder mit dem einfachen Drahtquerschnitt gerechnet werden. Der Draht besitzt einen Kreisquerschnitt und der Durchmesser beträgt 0,16 mm. Somit lässt sich das Goldvolumen einer Masche abschätzen. Das „Gesamtvolumen“ einer Masche ergibt sich durch Multiplikation der Fläche des roten Rahmens in Abbildung 4-12 mit der Dicke des Goldnetzes. Letztere muss ungefähr das Doppelte des Drahtdurchmessers betragen, da sich die Drähte ja überkreuzen. Nach Gleichung (2-63) ergibt sich dann die Porosität der Goldnetze zu:

$$\varepsilon_{GN} = 0,75 \quad (4-4)$$

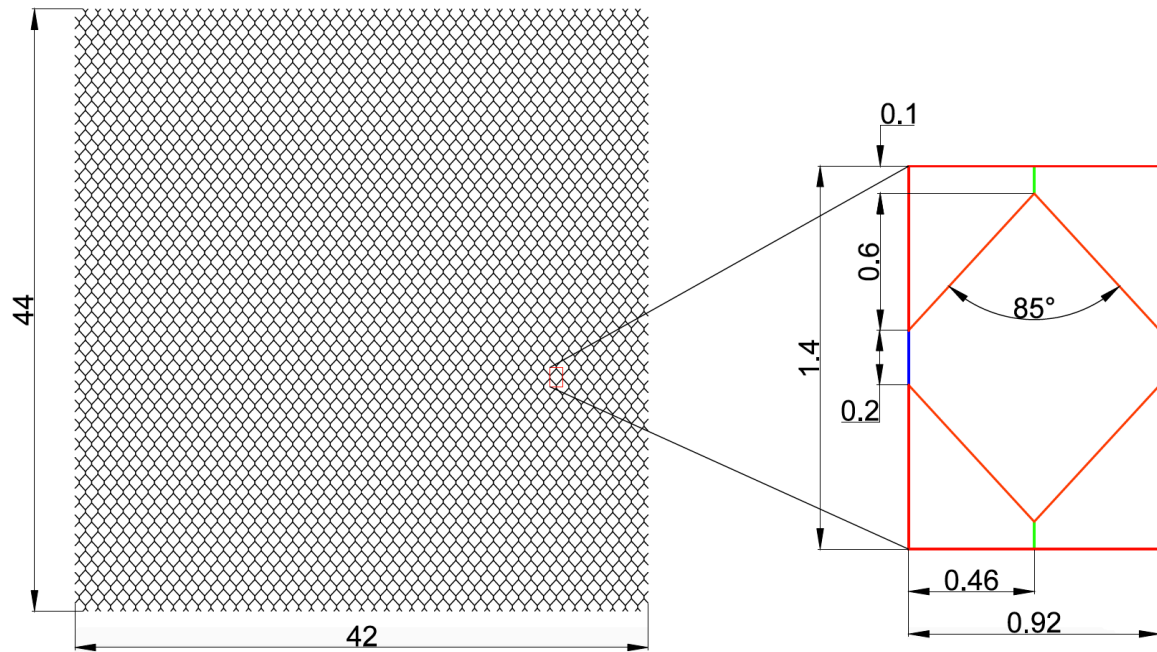


Abbildung 4-12: Goldnetz-Geometrie

➤ Nickelnetze:

Zur Kontaktierung der Anode liegen zwei Nickelnetze unterschiedlicher Feinheit übereinander, die in der Simulation analog zu den Goldnetzen als poröses Material angenommen werden. Die geometrischen Kennwerte der beiden Netze sind in Tabelle 2 aufgelistet.

Tabelle 2: Kennzahlen der Nickelnetze [Quelle: AVL]

	Maschenweite in mm	Drahtdurchmesser in mm
Netz 1	0,25	0,16
Netz 2	0,08	0,056

Ähnlich den Goldnetzen wird für jeweils eine Masche jedes der beiden Nickelnetze das Volumen von Drahtmaterial und Leerraum abgeschätzt, wobei quadratische Maschen mit den Werten aus Tabelle 2 angenommen werden. Wird dann die Summe der Leerraumvolumina mit der Summe der Volumina des Drahtmaterials ins Verhältnis gesetzt, berechnet sich der gemittelte Porositätswert  $\varepsilon$  der beiden Nickelnetze zu:

$$\varepsilon_{NN} = 0,626 \quad (4-5)$$

2. Tortuositätswerte:

➤ Anode:

Laut einer AVL-internen Quelle beträgt der Wert der Tortuosität  $\tau$  des Anodenmaterials Ni-YSZ  $\tau_{Ni-YSZ} = 6$ . Dieser Wert verursacht jedoch einen zu starken Abfall des Potenzials im Bereich der Ohm'schen Geraden. Wie schon in Kapitel 2.3.2 erwähnt, lassen nach [12] neuere Untersuchungen Tortuositätswerte zwischen 1,5 und 4 für Ni-YSZ vermuten. Da der Wert  $\tau_{Ni-YSZ} = 4$  jedoch in Kombination mit den anderen Parametern zu Divergenz führt, wird angenommen:

$$\tau_{Ni-YSZ} = 5 \quad (4-6)$$

➤ Kathoden:

Dieselben Erkenntnisse und Annahmen wie für die Anode bewährten sich auch für die Kathoden.

$$\tau_{LSM} = 5 \quad (4-7)$$

➤ Goldnetze:

Laut einer AVL-internen Quelle hat sich in ähnlichen Simulationen ein Wert von  $\tau = 3$  für derartige Netze bewährt. Hier wird dieser Wert jedoch aufgrund der Definition der Tortuosität hinterfragt. Nach Gleichung (2-64) ist die Tortuosität als das Verhältnis von effektivem zu direktem Diffusionsweg definiert. Die Luft kann auf geradem Weg durch die Maschen der Goldnetze strömen und hat nur die dünnen Drähte des Netzes als Hindernisse zu umgehen, was einen Wert knapp über  $\tau = 1$  vermuten ließe. Ein höherer Wert lässt sich eventuell mit Turbulenzen im Luftstrom begründen, die durch die Drähte verursacht werden. In der vorliegenden Simulation führt jedenfalls folgender Wert zum gewünschten Ergebnis:

$$\tau_{GN} = 2.5 \quad (4-8)$$

➤ Nickelnetze:

Die gleiche Annahme wie für die Goldnetze funktioniert auch für die Nickelnetze, somit gilt wieder:

$$\tau_{NN} = 2.5 \quad (4-9)$$

### 3. Thermische Leitfähigkeiten:

Die thermische Leitfähigkeit oder Wärmeleitfähigkeit ist ein Faktor, der das Verhältnis zwischen der Wärmestromdichte und dem Temperaturgradienten in einem Material beschreibt. Ihre Einheit ist  $W \cdot m / (m^2 \cdot K)$ , wobei  $W/m^2$  auf die Wärmestromdichte hinweist und  $m/K$  den Kehrwert des Temperaturgradienten darstellt. Die Einheit wird meist auf  $W / (m \cdot K)$  gekürzt angegeben. [31]

➤ Anode (Ni-YSZ):

Der Wert der thermischen Leitfähigkeit  $\lambda$  des Anodenmaterials Ni-YSZ nach Gleichung (4-10) stammt von einer AVL-internen Quelle. Dieser Quelle zufolge kann der Wert als konstant betrachtet werden.

$$\lambda_{Ni-YSZ} = 2 \frac{W}{m \cdot K} \quad (4-10)$$

➤ Elektrolyt (YSZ):

Abbildung 4-13 zeigt die thermische Leitfähigkeit von 8YSZ bei verschiedenen Temperaturen nach einem von der AVL bereitgestellten Dokument. Mittels der orangen und blauen Linien wurden zwei Punkte der Kurve ausgelesen. Sie dienen als Endpunkte der grün strichliert eingezeichneten Geraden, mittels welcher die Kurve für die Simulation angenähert werden soll.

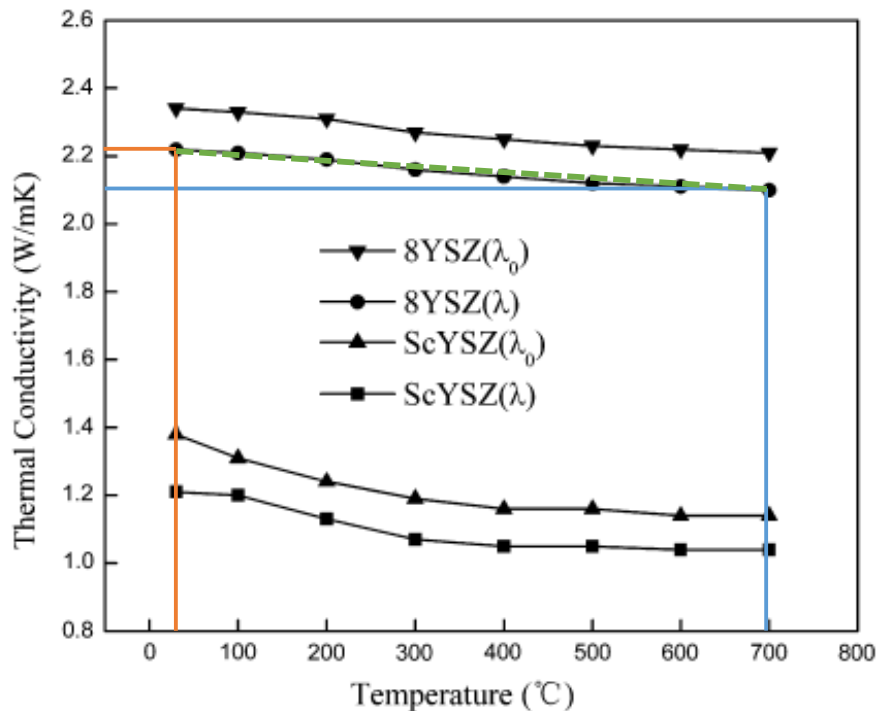


Abbildung 4-13: Thermische Leitfähigkeit von 8YSZ [Quelle: AVL]

Bei 30 °C (303,15 K) beträgt die Wärmeleitfähigkeit ca.  $2,22 \text{ W}/(\text{m} \cdot \text{K})$  und bei 700 °C (973,15 K) ca.  $2,1 \text{ W}/(\text{m} \cdot \text{K})$ . Über die allgemeine Form einer Geradengleichung  $y = k \cdot x + d$  und ein einfaches Gleichungssystem kann mit den gemessenen Werten folgende temperaturabhängige Funktion aufgestellt werden:

$$\lambda_{\text{YSZ}}(T) = 2,27430 - 1,79104 \cdot 10^{-4} \cdot T \frac{\text{W}}{\text{m} \cdot \text{K}} \quad (4-11)$$

➤ Kathode (LSM):

Der Wert der Wärmeleitfähigkeit  $\lambda$  des Kathodenmaterials LSM nach Gleichung (4-12) stammt von einer AVL-internen Quelle. Dieser Quelle zufolge kann der Wert als konstant betrachtet werden.

$$\lambda_{\text{LSM}} = 2 \frac{\text{W}}{\text{m} \cdot \text{K}} \quad (4-12)$$

➤ Gold:

Nach [31] beträgt die Wärmeleitfähigkeit von Gold:

$$\lambda_{\text{Au}} = 310 \frac{\text{W}}{\text{m} \cdot \text{K}} \quad (4-13)$$

➤ Nickel:

Nach [31] beträgt die Wärmeleitfähigkeit von Nickel:

$$\lambda_{\text{Ni}} = 85 \frac{\text{W}}{\text{m} \cdot \text{K}} \quad (4-14)$$

➤ Crofer:

Das Crofer-Datenblatt [32] listet Werte der Wärmeleitfähigkeit bei verschiedenen Temperaturen auf. Tabelle 3 gibt Werte in einem für die Simulation relevanten Temperaturbereich an.

Tabelle 3: Wärmeleitfähigkeit von Crofer bei ausgewählten Temperaturen, nach [32]

$\vartheta$ in °C	T in K	$\lambda$ in W/(m·K)
400	673,15	23
800	1073,15	24
1000	1273,15	27

Der Verlauf einer physikalischen Größe in Abhängigkeit der Temperatur lässt sich durch ein Taylorpolynom nach Gleichung (4-15) approximieren. [33]

$$X(T) = X(T_0) \cdot (1 + \alpha \cdot (T - T_0) + \beta \cdot (T - T_0)^2 + \gamma \cdot (T - T_0)^3 + \dots + k_n \cdot (T - T_0)^n) \quad (4-15)$$

Da die Anzahl der verfügbaren Werte im entsprechenden Temperaturbereich die Berechnung zweier Koeffizienten in Gleichung (4-15) zulässt, wird Gleichung (4-15) auf die 2. Ordnung beschränkt und höhere Potenzen werden vernachlässigt. Es gelte  $T_0 = 400 \text{ °C}$  und  $\lambda_0 = 23 \text{ W/(m} \cdot \text{K)}$ . Mittels den verbleibenden zwei Werten können dann die Koeffizienten  $\alpha$  und  $\beta$  bestimmt werden. Damit folgt Gleichung (4-16) als Näherung für die Wärmeleitfähigkeit von Crofer im Bereich von  $400 \text{ °C}$  bis  $1000 \text{ °C}$ .

$$\lambda_{\text{Crofer}}(T) = 23 \cdot (1 - 2,53623 \cdot 10^{-4} \cdot (T - 673,15) + 9,05797 \cdot 10^{-7} \cdot (T - 673,15)^2) \quad (4-16)$$

$\frac{W}{m \cdot K}$

Der resultierende Verlauf ist in Abbildung 4-14 dargestellt.

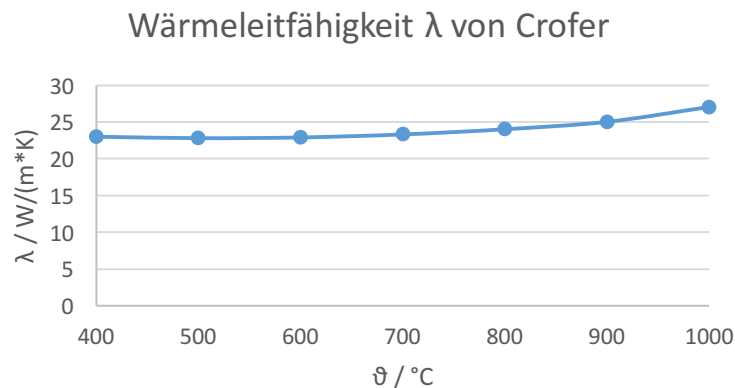


Abbildung 4-14: Wärmeleitfähigkeit von Crofer als Temperaturfunktion

➤ Aluminiumoxidkeramik (Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>):

Die 4 Stempel, die das kathodenseitige Flowfield beinhalten sowie der Dichtrahmen um diese herum sind aus milchig-weißer Aluminiumoxidkeramik Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> mit einer Reinheit von über 99,5 % gefertigt. Dieses Material zeigt eine mit steigenden Temperaturen stark absinkende Wärmeleitfähigkeit entsprechend Abbildung 4-15 und Abbildung 4-16.

- Variante 1:

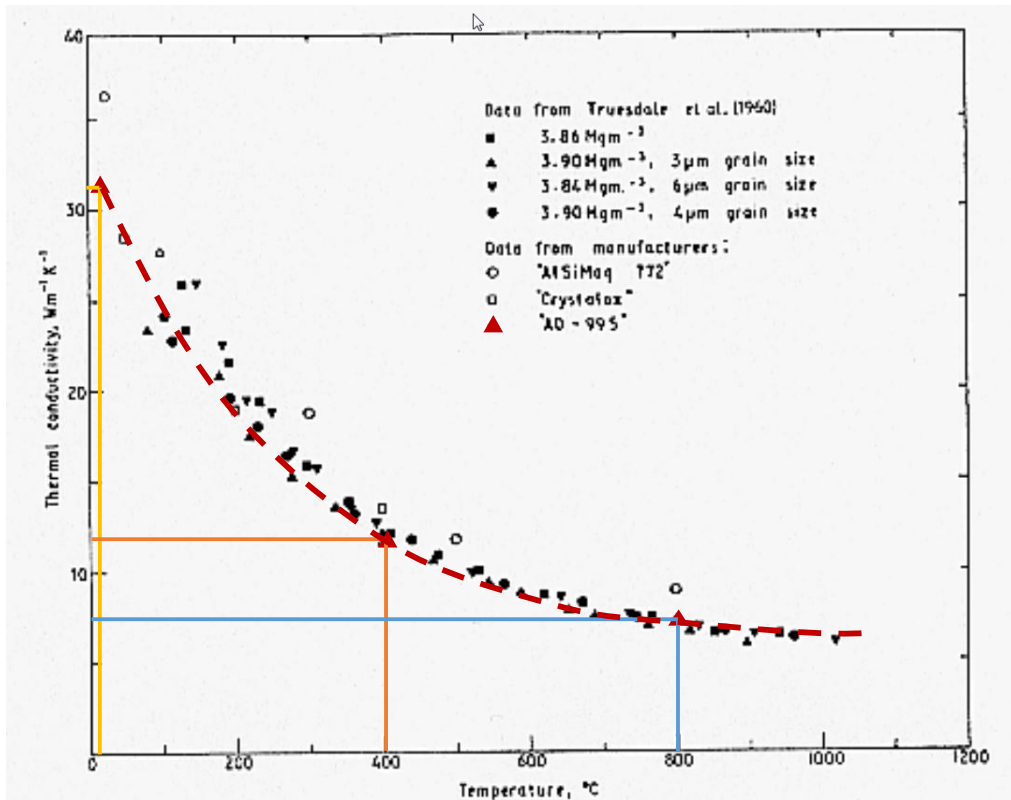


Abbildung 4-15: Wärmeleitfähigkeit von Aluminiumoxidkeramik, modifiziert nach [34]

Aus Abbildung 4-15 können die Werte nach Tabelle 4 ausgelesen werden.

Tabelle 4: Wärmeleitfähigkeit von Crofer bei ausgewählten Temperaturen, nach Abbildung 4-15 [34]

θ in °C	T in K	λ in W/(m·K)
20	293,15	31,9
400	673,15	11,8
800	1073,15	7,23

Ein Ansatz nach Gleichung (4-15) mit Beschränkung auf die 2. Ordnung ergibt:

$$\lambda_{Al_2O_3_1}(T) = 31,9 \cdot (1 - 0,00229 \cdot (T - 293,15) + 1,66666 \cdot (T - 293,15)^2) \frac{W}{m \cdot K} \quad (4-17)$$

- Variante 2:

Aus Abbildung 4-16 können die Werte nach Tabelle 5 ausgelesen werden.

Tabelle 5: Wärmeleitfähigkeit von Crofer bei ausgewählten Temperaturen, nach Abbildung 4-16 [35]

T in °C	T in K	λ in W/(m·K)
29	302,15	31,2
500	773,15	9,333
1000	1273,15	5,333



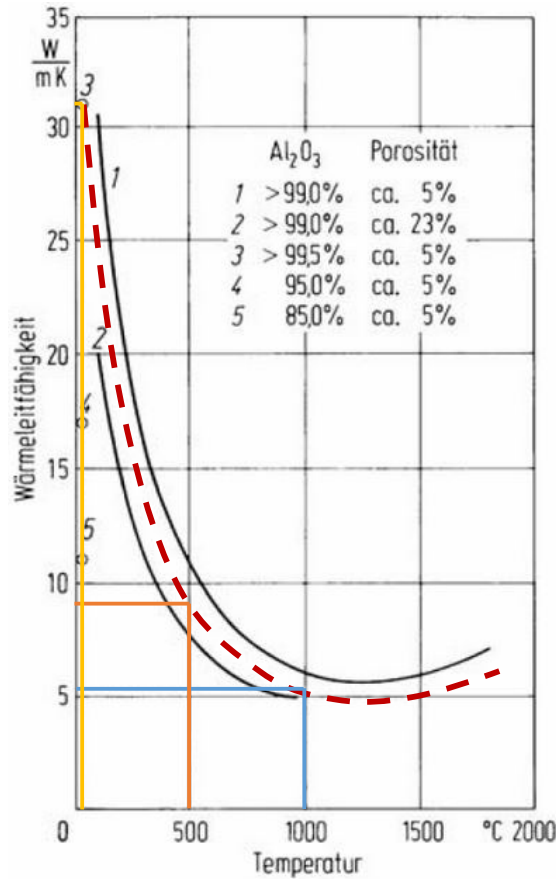


Abbildung 4-16: Wärmeleitfähigkeit von Aluminiumoxidkeramik, modifiziert nach [35]

In Verbindung mit dem Ansatz nach Gleichung (4-15) führen diese Werte zu Gleichung:

$$\lambda_{Al_2O_3}(T) = \frac{31,2 \cdot (1 - 2,08546 \cdot 10^{-3} \cdot (T - 302,15) + 1,26841 \cdot 10^{-6} \cdot (T - 302,15)^2)}{m \cdot K} \quad (4-18)$$

Abbildung 4-17 zeigt einen Vergleich der Varianten 1 und 2. In der Simulation wird Variante 1 verwendet, weil in Abbildung 4-15 tatsächliche Werte markiert sind, während die Kurve in Abbildung 4-16 nur basierend auf dem Anfangswert und ähnlichen Materialien abgeschätzt werden kann. Die zweite Kurve dient jedoch zumindest als Bestätigung für die stark absinkende Wärmeleitfähigkeit bei hohen Temperaturen.

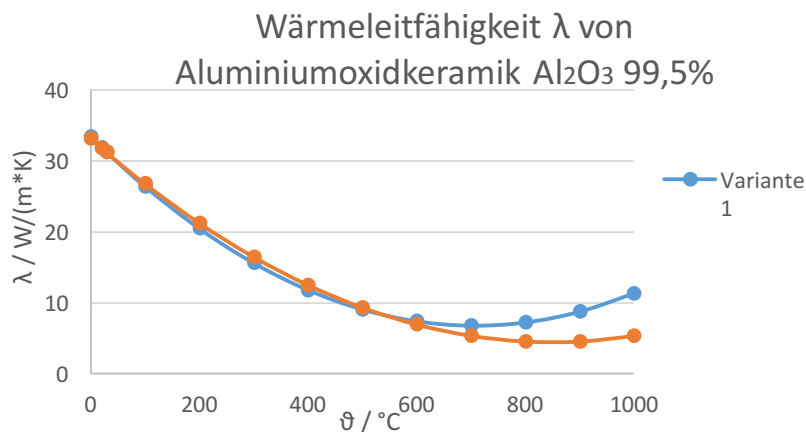


Abbildung 4-17: Wärmeleitfähigkeit von Aluminiumoxidkeramik

## ➤ Glaslot:

Der Wert der thermischen Leitfähigkeit  $\lambda$  des Glaslot-Dichtmittels stammt von einer AVL-internen Quelle. Über die Temperaturabhängigkeit werden keine Angaben gemacht.

$$\lambda_{GL} = 1 \frac{W}{m \cdot K} \quad (4-19)$$

## 4. Elektrische/ionische Leitfähigkeit:

Sowohl elektrische als auch ionische Leitfähigkeit werden in  $A/(V \cdot m)$  gemessen, was auch als  $S/m$  oder  $1/(\Omega \cdot m)$  ausgedrückt werden kann.

## ➤ Anode (Ni-YSZ):

Die Beschreibung der elektrischen Leitfähigkeit des Anodenmaterials Ni-YSZ nach Gleichung (4-20) stammt von einer AVL-internen Quelle.

$$\sigma_{Ni-YSZ}(T) = \frac{9,5 \cdot 10^7}{T} \cdot e^{-\frac{1150}{T}} \Omega^{-1} \cdot m^{-1} \quad (4-20)$$

## ➤ Elektrolyt (8YSZ):

Für die gesuchte Leitfähigkeit als Funktion der Temperatur finden sich hauptsächlich grafische Darstellungen zumeist in logarithmischer Darstellung, siehe z.B. Abbildung 4-18 oder Abbildung 4-19. Unglücklicherweise variieren diese Darstellungen, sodass sich die Frage stellt, welcher Darstellung Vertrauen geschenkt werden darf.

- Variante 1: Abbildung 4-18 zeigt eine solche Darstellung.

Die Endpunkte der YSZ-Geraden liegen bei 500 °C und 1000 °C. Aus einem vergrößerten Ausdruck wurden die Werte nach Tabelle 6 durch Ausmessen und Interpolation ermittelt.

Tabelle 6: Ionenleitfähigkeit von YSZ bei ausgewählten Temperaturen, nach Abbildung 4-18 [36]

$\vartheta$ in °C	T in K	1000/T in K <sup>-1</sup>	$\log_{10} \sigma$
500	773,15	1,293410076	-2,92
1000	1273,15	0,785453403	-0,92

Nach der allgemeinen Form einer Geradengleichung ( $y = k \cdot x + d$ ) kann nun Gleichung (4-21) aufgestellt werden.

$$\log_{10} \sigma = k \cdot \frac{1000}{T} + d \quad (4-21)$$

Werden für  $\log_{10} \sigma$  die Werte der 4. Spalte aus Tabelle 6 eingesetzt und für 1000/T die Werte der 3. Spalte, ergeben sich zwei Gleichungen, aus welchen sich k und d berechnen lassen. Durch Entlogarithmieren der resultierenden Geradengleichung ergibt sich schließlich Gleichung (4-22) für den ionischen Leitwert von YSZ in Abhängigkeit der Temperatur.

$$\sigma_{YSZ}(T) = 10^{4,1726 - 3,9373 \cdot \frac{1000}{T}} \Omega^{-1} \cdot m^{-1} \quad (4-22)$$

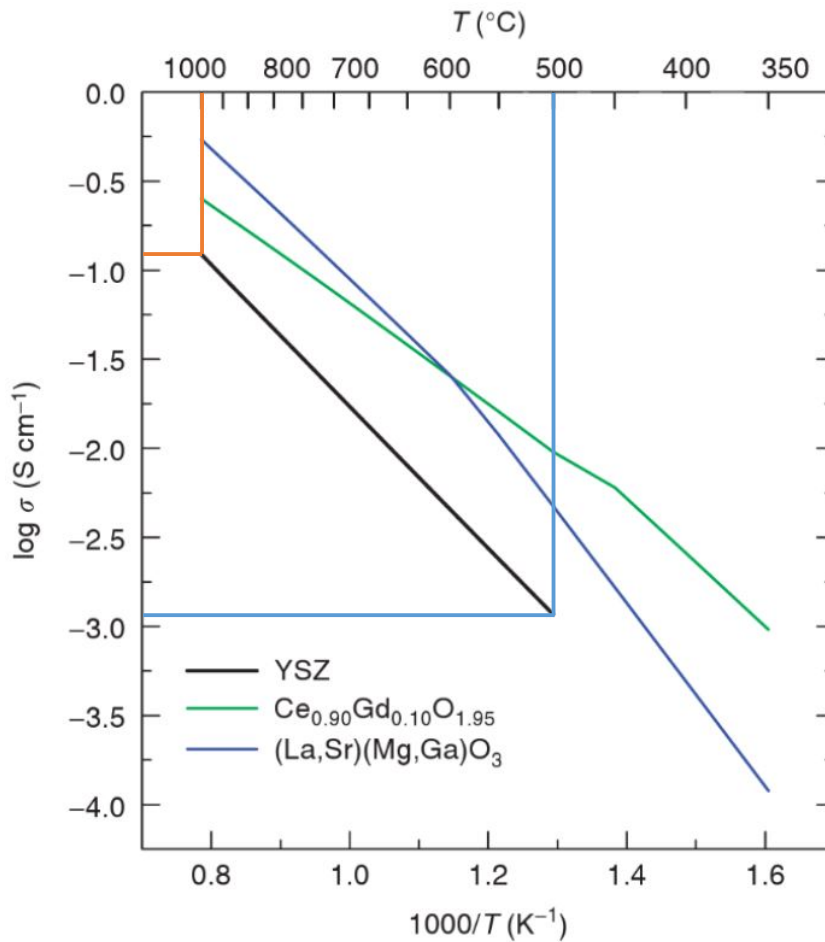


Abbildung 4-18: Ionenleitfähigkeiten [36]

- Variante 2: Eine weitere Darstellung der ionischen Leitfähigkeiten von Elektrolytmaterialien zeigt Abbildung 4-19. Sie wurde Fabian Rasingers Diplomarbeit [1] entnommen und stammt ursprünglich aus [37].

Die Endpunkte der YSZ-Geraden liegen bei 400 °C und 1000 °C. Tabelle 7 listet die Werte auf, die aus Abbildung 4-19 ausgemessen und interpoliert wurden.

Tabelle 7: Ionenleitfähigkeit von YSZ bei ausgewählten Temperaturen, nach Abbildung 4-19 [37]

$\vartheta$ in °C	T in K	1000/T in K <sup>-1</sup>	log <sub>10</sub> σ
400	673,15	1,485552997	-3,9015
1000	1273,15	0,785453403	-1,1194

Wie schon zuvor kann über ein einfaches Gleichungssystem die Geradengleichung ermittelt werden und Entlogarithmieren derselben führt zu Gleichung (4-23) für den ionischen Leitwert von YSZ in Abhängigkeit der Temperatur.

$$\sigma_{YSZ}(T) = 10^{4,0019 - 3,9739 \cdot \frac{1000}{T}} \Omega^{-1} \cdot m^{-1} \quad (4-23)$$

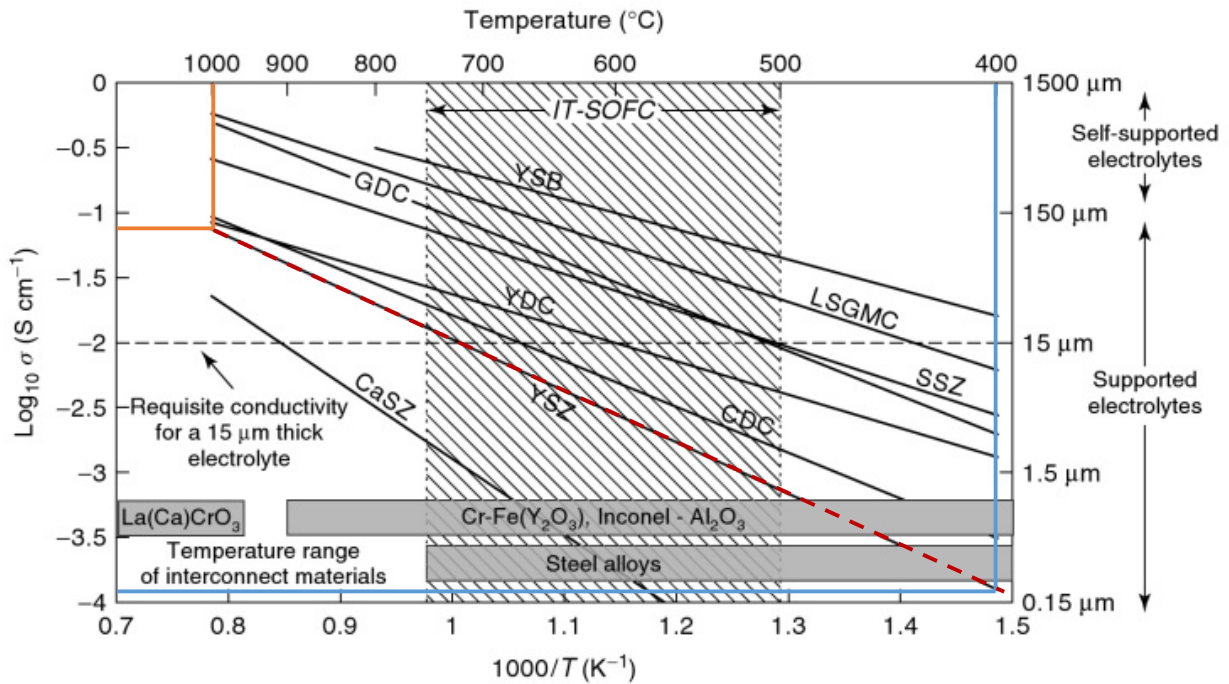


Abbildung 4-19: Ionenleitfähigkeiten verschiedener Elektrolytmaterialien [37]

- Variante 3: Nach [38] beschreibt Gleichung (4-24) den spezifischen Widerstand von YSZ:

$$\rho_{YSZ}(T) = \frac{0,3685 + 0,002838 \cdot e^{\frac{10300}{T}}}{100} \Omega \cdot m \quad (4-24)$$

Der spezifische Widerstand stellt den Kehrwert der Leitfähigkeit dar, dementsprechend folgt Gleichung (4-25) für die ionische Leitfähigkeit.

$$\sigma_{YSZ}(T) = \frac{100}{0,3685 + 0,002838 \cdot e^{\frac{10300}{T}}} \Omega^{-1} \cdot m^{-1} \quad (4-25)$$

Nun liegen drei verschiedene Gleichungen für eine Größe vor. Abbildung 4-20 zeigt die grafische Darstellung der drei Varianten.

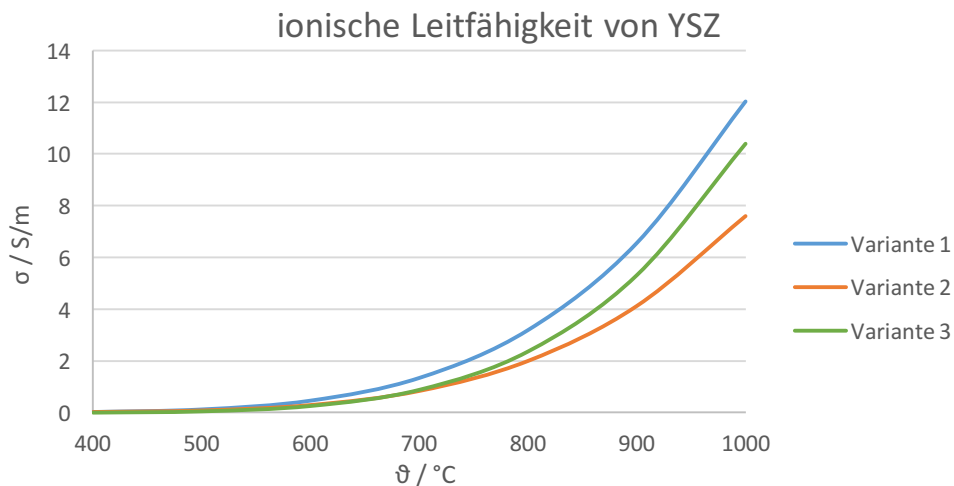


Abbildung 4-20: Ionenleitfähigkeit von YSZ als Funktion der Temperatur

Abbildung 4-20 zufolge sind die Varianten 2 und 3 bis etwa 700 °C beinahe deckungsgleich. Im Bereich zwischen 700 °C und 1000 °C weist Variante 3 ungefähr die gleiche Steigung auf wie Variante 1, während Variante 2 langsamer steigt. Keine der drei Varianten kann durch eigene Messungen bestätigt oder widerlegt werden. Da sie einen Mittelweg zwischen den beiden anderen Varianten darstellt, soll Variante 3 für die Simulation verwendet werden.

➤ Kathode (LSM):

Die Beschreibung der Temperaturabhängigkeit der elektrischen Leitfähigkeit des Kathodenmaterials LSM nach Gleichung (4-26) stammt von einer AVL-internen Quelle.

$$\sigma_{LSM}(T) = \frac{4,2 \cdot 10^7}{T} \cdot e^{-\frac{1200}{T}} \Omega^{-1} \cdot m^{-1} \quad (4-26)$$

➤ Gold:

Da die Literatur nur den spezifischen Leitwert von Gold bei Standardtemperatur anführt, jedoch nicht seine Temperaturabhängigkeit, wird letztere auch hier, wie schon bei Variante 3 für YSZ, über den Kehrwert des spezifischen Widerstandes berechnet.

Wenn die betrachtete Temperatur weit über der Bezugstemperatur liegt, muss der spezifische Widerstand über Gleichung (4-27) angenähert werden. [39] Diese Gleichung lässt sich aus Gleichung (4-15) ableiten, wenn Terme mit einer Ordnung höher als 2 vernachlässigt werden. [33]

$$\rho(T) = \rho(T_0) \cdot (1 + \alpha \cdot (T - T_0) + \beta \cdot (T - T_0)^2) \Omega \cdot m \quad (4-27)$$

In [40] dokumentierte R. A. Matula Untersuchungen zu den spezifischen Widerständen von Kupfer, Gold, Palladium und Silber. Das referenzierte Dokument enthält vier Tabellen mit Messreihen von Gold, die sich mehr oder weniger mit dem für die Simulation interessanten Temperaturbereich überschneiden. Tabelle 8 listet in den linken drei Spalten jeder Messreihe die Messdaten auf.

Tabelle 8: Spezifischer Widerstand von Gold, nach [40]

Reihe 1					Reihe 2				
Temperatur		Messwerte	Näherung	Abweichung	Temperatur		Messwerte	Näherung	Abweichung
ϑ/°C	T/K	ρ/10 <sup>-8</sup> Ω·m		%	ϑ/°C	T/K	ρ/10 <sup>-8</sup> Ω·m		%
600,85	874	7,526	7,526	0,000	568,85	842	8,45	8,450	0,000
617,85	891	7,701	7,702	0,129	613,85	887	8,98	8,914	-6,582
646,85	920	8,015	8,008	-0,655	660,85	934	9,35	9,404	5,362
700,85	974	8,602	8,597	-0,517	711,85	985	9,97	9,940	-2,995
750,85	1024	9,168	9,163	-0,516	759,85	1033	10,45	10,450	0,000
754,85	1028	9,209	9,209	0,000	808,85	1082	11,08	10,976	-10,435
797,85	1071	9,717	9,713	-0,352	859,85	1133	11,67	11,528	-14,179
815,85	1089	9,933	9,929	-0,387	911,85	1185	12,12	12,097	-2,267
846,85	1120	10,307	10,307	-0,027	961,85	1235	12,65	12,650	0,000
850,85	1124	10,371	10,356	-1,498			Mittelwert		-3,455
897,85	1171	10,945	10,945	0,000					
		Mittelwert		-0,347					

## 4 Simulation

Reihe 3					Reihe 4				
Temperatur		Messwerte	Näherung	Abweichung	Temperatur		Messwerte	Näherung	Abweichung
$\vartheta/^\circ\text{C}$	T/K	$\rho/10^{-8} \Omega\cdot\text{m}$		%	$\vartheta/^\circ\text{C}$	T/K	$\rho/10^{-8} \Omega\cdot\text{m}$		%
591,85	865	7,96	7,960	0,000	591,15	864,3	8,1691	8,169	0,000
618,85	892	8,28	8,262	-1,848	643,65	916,8	8,7912	8,787	-0,377
640,85	914	8,53	8,513	-1,698	705,15	978,3	9,5474	9,546	-0,133
675,85	949	8,93	8,924	-0,608	750,95	1024,1	10,1351	10,135	0,000
704,85	978	9,29	9,274	-1,559	820,35	1093,5	11,0594	11,067	0,738
737,85	1011	9,7	9,684	-1,570	867,65	1140,8	11,7236	11,729	0,519
794,85	1068	10,42	10,420	0,000	927,45	1200,6	12,5971	12,597	0,000
822,85	1096	10,78	10,794	1,426			Mittelwert		0,107
850,85	1124	11,16	11,177	1,698					
876,85	1150	11,53	11,540	0,996					
909,85	1183	11,98	12,011	3,118					
930,85	1204	12,29	12,317	2,717					
954,85	1228	12,63	12,673	4,271					
986,85	1260	13,13	13,156	2,645					
1016,85	1290	13,62	13,620	0,000					
Mittelwert				0,639					

Die Messwerte jeweils bei der niedrigsten und höchsten Temperatur sowie möglichst nah an deren Mittelwert sind hellgrau hinterlegt. Diese Werte sollen zur Berechnung einer Näherung in Form von Gleichung (4-27) für jede der vier Messreihen dienen. Die niedrigste Temperatur sei  $T_0$  und der zugehörige Messwert  $\rho_0$ . Aus den anderen beiden Temperaturen und Messwerten lassen sich die Koeffizienten  $\alpha$  und  $\beta$  berechnen.

Die über die Näherungsgleichungen berechneten Werte sind in Tabelle 8 in den Spalten „Näherung“ den Messwerten bei gleichen Temperaturen gegenübergestellt, während die Spalten „Abweichung“ die Abweichung des Näherungswertes vom Messwert in Prozent angeben.

Abbildung 4-21 stellt die Messwerte, dargestellt als Punkte, ihrer Näherungsgleichung, dargestellt als Kurve, grafisch gegenüber.

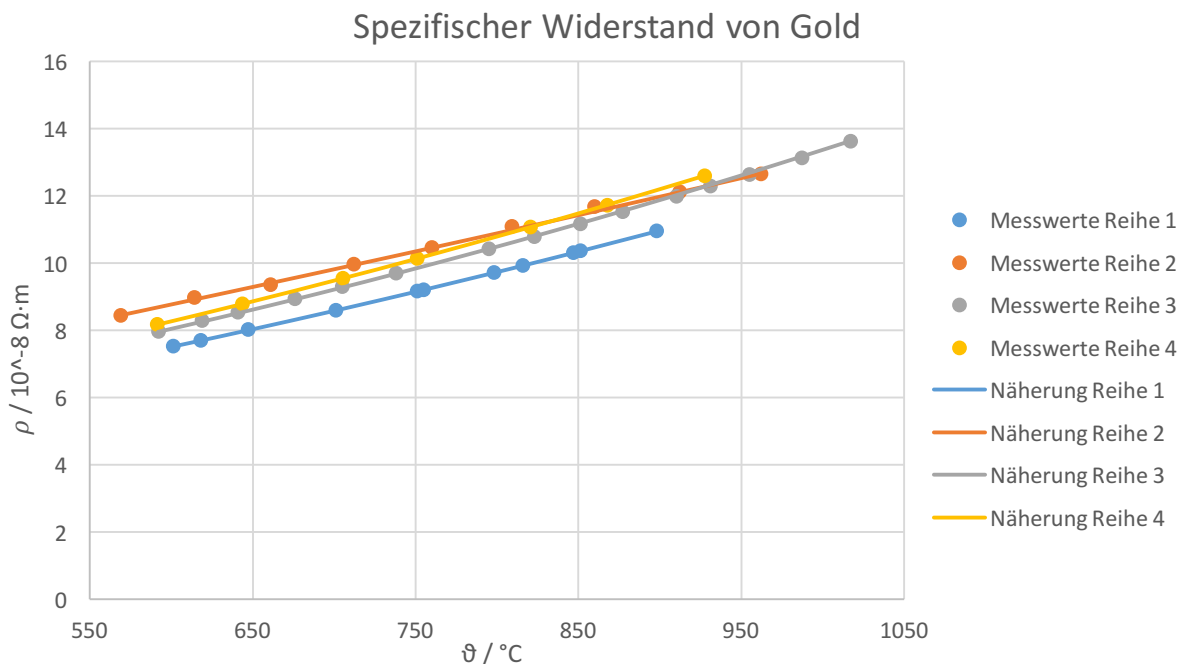


Abbildung 4-21: Spezifischer Widerstand von Gold, nach [40]

Abbildung 4-21 zeigt, dass Messreihe 3 (dargestellt in grau) einem Mittelwert am nächsten kommt und außerdem den größten Temperaturbereich abdeckt. Aus diesem Grund wird sie hier als repräsentativ angenommen. Gleichung (4-28) stellt die Näherungslösung für Messreihe 3 dar.

$$\rho_{Au}(T) = \frac{7,96 \cdot 10^{-8} \cdot (1 + 1,38461 \cdot 10^{-3} \cdot (T - 865) + 6,78743 \cdot 10^{-7} \cdot (T - 865)^2)}{\Omega \cdot m} \quad (4-28)$$

Kehrwertbildung liefert schließlich die Näherungslösung für die elektrische Leitfähigkeit von Gold im Temperaturbereich von ca. 600 °C bis 1000 °C:

$$\sigma_{Au}(T) = \frac{10^8}{7,96 \cdot (1 + 1,38461 \cdot 10^{-3} \cdot (T - 865) + 6,78743 \cdot 10^{-7} \cdot (T - 865)^2)} \Omega^{-1} \cdot m^{-1} \quad (4-29)$$

Je weiter eine betrachtete Temperatur jedoch vom oben angeführten Temperaturbereich entfernt liegt, desto größer wird der Näherungsfehler. Nach Gleichung (4-28) würde der spezifische Widerstand bei Standardtemperatur  $\rho_{20^\circ\text{C}} = 3,424 \cdot 10^{-8} \Omega \cdot m$  betragen, während er nach verschiedenen Quellen, z.B. [41], tatsächlich bei  $\rho_{20^\circ\text{C}} = 2,44 \cdot 10^{-8} \Omega \cdot m$  liegt. Der Fehler beträgt ca. +40 %. Folglich sollten die Gleichungen (4-28) und (4-29) nur im betrachteten Temperaturbereich oder in dessen Nähe Verwendung finden.

➤ Nickel:

Der spezifische Widerstand bei  $T_0 = 20^\circ\text{C} = 293,15\text{ K}$  beträgt  $\rho_0 = 1 \cdot 10^{-7} \Omega \cdot m$ . [42]

Für den Temperaturkoeffizienten 1. Ordnung gilt:  $\alpha = 6,7 \cdot 10^{-3} \text{ K}^{-1}$  [33]

Für den Temperaturkoeffizienten 2. Ordnung finden sich keine Angaben, daher muss eine lineare Näherung des spezifischen Widerstandes genügen. Gleichung (4-30) gibt die elektrische Leitfähigkeit als Kehrwert des linear angenäherten spezifischen Widerstandes an.

$$\sigma_{Ni}(T) = \frac{1}{7 \cdot 10^{-8} \cdot (1 + 6 \cdot 10^{-3} \cdot (T - 293,15))} \Omega^{-1} \cdot m^{-1} \quad (4-30)$$

➤ Crofer:

Die Crofer-Grundplatte stellt das anodenseitige Interconnect dar, deshalb ist ihre elektrische Leitfähigkeit von Bedeutung für die Simulation. Das Crofer-Datenblatt [32] bietet tabellarisch spezifische Widerstandswerte bei verschiedenen Temperaturen. Hier sollen die Werte bei 600 °C, 800 °C und 1000 °C verwendet werden, da diese den für die Simulation relevanten Temperaturbereich abdecken.

Tabelle 9: Spezifische Widerstände von Crofer bei ausgewählten Temperaturen, nach [32]

$\vartheta$ in °C	T in K	$\rho$ in $\mu\Omega \cdot \text{cm}$	$\rho$ in $\Omega \cdot \text{m}$
600	873,15	105	$10,5 \cdot 10^{-7}$
800	1073,15	115	$11,5 \cdot 10^{-7}$
1000	1273,15	120	$12,0 \cdot 10^{-7}$

Die weitere Berechnung folgt unter der Annahme, dass der Verlauf des spezifischen Widerstandes eine Form entsprechend Gleichung (4-27) besitzt. Der spezifische Widerstand bei  $T_0 = 600^\circ\text{C}$  soll als  $\rho_0$  gelten. Mittels den Werten bei 800 °C und 1000 °C lassen sich dann die Koeffizienten  $\alpha$  und  $\beta$  berechnen. Somit gilt für den spezifischen Widerstand:

$$\begin{aligned} \rho_{Crofer}(T) &= \\ &= 10,5 \cdot 10^{-7} \cdot (1 + 3,96825 \cdot 10^{-4} \cdot (T - 873,15) + 3,97 \cdot 10^{-7} \cdot (T - 873,15)^2) \end{aligned} \quad (4-31)$$

$\Omega \cdot m$

Schließlich lässt sich der elektrische Leitwert als Kehrwert des spezifischen Widerstandes berechnen:

$$\frac{\sigma_{Crofer}(T)}{10^7} = \frac{1}{10,5 \cdot (1 + 3,96825 \cdot 10^{-4} \cdot (T - 873,15) + 3,97 \cdot 10^{-7} \cdot (T - 873,15)^2)} \Omega^{-1} \cdot m^{-1} \quad (4-32)$$

#### 5. Spezifische Wärmekapazitäten:

##### ➤ Anode (Ni-YSZ):

Der Wert der spezifischen Wärmekapazität  $c$  des Anodenmaterials Ni-YSZ stammt von einer AVL-internen Quelle.

$$c_{Ni-YSZ} = 470 \frac{J}{kg \cdot K} \quad (4-33)$$

##### ➤ Elektrolyt (8YSZ):

Der Wert der spezifischen Wärmekapazität  $c$  des Elektrolytmaterials 8YSZ stammt von einer AVL-internen Quelle.

$$c_{8YSZ} = 471 \frac{J}{kg \cdot K} \quad (4-34)$$

##### ➤ Kathode (LSM):

Der Wert der spezifischen Wärmekapazität  $c$  des Kathodenmaterials LSM stammt von einer AVL-internen Quelle.

$$c_{LSM} = 470 \frac{J}{kg \cdot K} \quad (4-35)$$

##### ➤ Gold:

Der Wert der spezifischen Wärmekapazität  $c$  von Gold stammt von [43].

$$c_{Au} = 128 \frac{J}{kg \cdot K} \quad (4-36)$$

##### ➤ Nickel:

Der Wert der spezifischen Wärmekapazität  $c$  von Nickel stammt von [43].

$$c_{Ni} = 444 \frac{J}{kg \cdot K} \quad (4-37)$$

##### ➤ Crofer:

Das Crofer-Datenblatt [32] listet die spezifischen Wärmekapazitäten für mehrere Temperaturen auf.



Tabelle 10: Spezifische Wärmekapazität von Crofer bei ausgewählten Temperaturen, nach [32]

$\vartheta$ in °C	T in K	c in J/(kg·K)
400	673,15	610
800	1073,15	660
1000	1273,15	650

Ein polynomischer Ansatz 2. Grades nach Gleichung (4-15) liefert Gleichung (4-38):

$$c_{Crofer} = 610 \cdot (1 + 3,96175 \cdot 10^{-4} \cdot (T - 673,15) - 4,78142 \cdot 10^{-7} \cdot (T - 673,15)^2) \frac{J}{kg \cdot K} \quad (4-38)$$

Aufgrund der gewählten Daten hat Gleichung (4-38) nur im Bereich zwischen 400 °C und 1000 °C Gültigkeit. Dieser Bereich deckt alle Temperaturen ab, die in der Simulation auftreten. Abbildung 4-22 zeigt die Näherung im Vergleich zu den Daten laut Datenblatt.

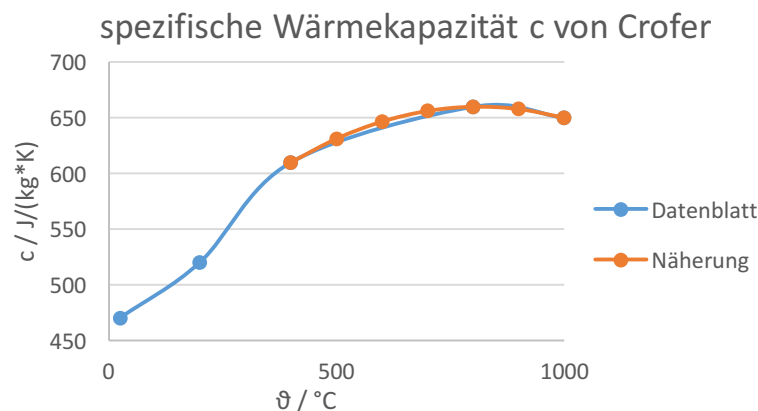


Abbildung 4-22: Spezifische Wärmekapazität von Crofer

➤ Aluminiumoxidkeramik  $Al_2O_3$ :

Der Wert der spezifischen Wärmekapazität stammt von [34].

$$c_{Al_2O_3} = 780 \frac{J}{kg \cdot K} \quad (4-39)$$

➤ Glaslot:

Der Wert der spezifischen Wärmekapazität  $c$  des Glaslot-Dichtmittels stammt von einer AVL-internen Quelle.

$$c_{GL} = 800 \frac{J}{kg \cdot K} \quad (4-40)$$

#### 4.1.4 Randbedingungen

Randbedingungen werden in FIRE<sup>®</sup> immer auf Face-Selections auf Außenflächen des Gitternetzes („Exterior faces“) zugewiesen. Beim Zuweisen einer Randbedingung erhält diese den selben Namen wie die Face-Selection, deshalb heißen die im Folgenden beschriebenen Randbedingungen wie die in Kapitel 4.1.2 aufgelisteten Face-Selections.

Jedes Exterior face sollte genau einer Randbedingung zugewiesen sein. Wird ein Face mehr als einer Randbedingung zugewiesen, besteht ein Konflikt. Erhält ein Face keine Randbedingung, werden automatisch Standard-Umgebungsbedingungen angenommen. Alle Randbedingungen

des vorliegenden Modells geben eine Umgebungstemperatur von 600 °C an. Liegen dann 2 Faces nebeneinander, wobei eines eine Umgebungstemperatur von 600 °C und das angrenzende eine Umgebungstemperatur von nur 20 °C annimmt, verhindert der starke Temperaturgradient die Konvergenz der Simulation. Deshalb ist die Kontrolle einer korrekten und vollständigen Zuweisung von Randbedingungen sehr wichtig.

Die vorliegende Simulation wird von dreizehn Randbedingungen bestimmt. Diese müssen Umgebungstemperaturen, Wärmezufuhr, Wärmeabfuhr durch Strahlung und Konvektion, Gasein- und -ausgänge und elektrische Größen vorschreiben. Im Folgenden sind die dreizehn Randbedingungen im Detail beschrieben.

Alle diese Randbedingungen stellen mehr oder weniger Annahmen und grobe Abschätzungen dar, liefern aber in Kombination Ergebnisse, die nah an die Messungen herankommen.

➤ Ano\_Elec\_Out:

Diese Randbedingung beschreibt die Eigenschaften der Unterseite der Crofer-Platte. Der Randbedingungstyp ist „Wall“ mit der thermischen Einstellung „Convection/Radiation“. Im realen Prüfstands Aufbau sitzt diese Fläche auf dem in Abbildung 3-1 gezeigten Stahlsockel auf, in den die Heizelemente eingelassen sind. Es ist nicht bekannt, ob ein Wärmefluss von der Crofer-Platte in den Stahlsockel stattfindet oder in umgekehrter Richtung. Da aber – wie später bei den Randbedingungen für die Heizelemente beschrieben – angenommen wird, dass der überwiegende Teil der Heizleistung nach oben in die Crofer-Platte fließt, muss weiter ein Wärmefluss von der Crofer-Platte in den Stahlsockel angenommen werden. Eigentlich würde hier Wärmeleitung zwischen zwei Festkörpern stattfinden. Die Randbedingung muss also so gewählt werden, dass die Wärmeabfuhr durch Wärmeleitung im Stahlsockel durch Konvektion und/oder Wärmestrahlung abgebildet wird. Sowohl Konvektion als auch Wärmeleitung sind einer Temperaturdifferenz proportional, Wärmestrahlung hingegen der 4. Potenz der Temperatur. [44] Deshalb wird versucht, die Wärmeleitung durch eine „äquivalente Konvektion“ abzubilden, während Wärmestrahlung deaktiviert wird. Für Konvektion gilt Gleichung (4-41): [44]

$$\dot{Q}_{Konv} = \alpha \cdot A_{Konv} \cdot \Delta T_{Konv} \quad (4-41)$$

Wärmeleitung wird durch Gleichung (4-42) beschrieben. [45]

$$\dot{Q}_{WL} = \lambda \cdot A_{Leit} \cdot \frac{\Delta T_{Leit}}{d} \quad (4-42)$$

Die beiden Wärmeströme sollen nun äquivalent sein.

$$\alpha \cdot A_{Konv} \cdot \Delta T_{Konv} = \lambda \cdot A_{Leit} \cdot \frac{\Delta T_{Leit}}{d} \quad (4-43)$$

$\alpha$  ist hier der gesuchte Wert, also gilt:

$$\alpha = \frac{\lambda \cdot A_{Leit} \cdot \Delta T_{Leit}}{d \cdot A_{Konv} \cdot \Delta T_{Konv}} \quad (4-44)$$

Für den Stahl 1.4841, aus dem der Stahlsockel gefertigt ist, gilt bei den vorherrschenden Temperaturen ungefähr  $\lambda = 24 \text{ W}/(\text{m} \cdot \text{K})$  (extrapoliert nach [46]). Für den Temperaturgradienten in Stahl wurde aus ersten Simulationen ungefähr  $\Delta T_{Leit}/d = 20/0,035 \text{ K}/\text{m}$  gemessen. Zwischen der Crofer-Platte und der Umgebung gilt ungefähr  $\Delta T_{Konv} = 200 \text{ K}$ . Mit  $A_{Konv} = A_{Leit}$  gilt dann für  $\alpha$ :

$$\alpha = 68,571 \frac{W}{m^2 \cdot K} \quad (4-45)$$

➤ Cat\_Elec\_Out:

Diese Randbedingung betrifft die winzigen Flächen, die durch das „Abschneiden“ der Golddrähte an der Modelloberseite entstehen. Der Randbedingungstyp ist „Wall“ mit der thermischen Einstellung „Convection/Radiation“. Da die Golddrähte eigentlich noch weiter laufen würden, müsste die Wärmeabfuhr korrekterweise durch Wärmeleitung erfolgen. Wie schon zuvor bei der Randbedingung „TGIVEN\_Top“ wird Wärmestrahlung deaktiviert und die Wärmeleitung durch Konvektion ersetzt. Wird die gleiche Berechnung eines äquivalenten Wärmeübergangskoeffizienten wie schon zuvor durchgeführt und die hohe Wärmeleitfähigkeit von Gold verwendet, ergibt sich  $\alpha = 1056,869 \text{ W}/(m^2 \cdot K)$ .

Als elektrische Einstellung wird „Current“ gewählt; hier erfolgt also die Vorgabe der Stromstärke, in deren Abhängigkeit sich dann die Zellspannung einstellt. Um unterschiedliche Stromstärken an den vier Kathoden vorzugeben, müssten logischerweise vier Selections für vier Randbedingungen definiert und in jeder Randbedingung die Stromstärke vorgegeben werden. FIRE<sup>®</sup> geht bei einer SOFC aber von einer Anode und auch nur einer Kathode aus. Die vier Kathoden sind im Modell zwar nur als eine einzige Kathode definiert, geometrisch besteht jedoch keine Verbindung zwischen ihnen. Daher kann der Solver drei der vier Kathoden nicht korrekt initialisieren und produziert auf diesen unrealistische Ergebnisse.

Dieses Problem wird umgangen, indem für die Stromstärke ein kurzes Programm vorgegeben wird, das über „if... elseif“-Bedingungen für vier Stromstärken vier Fälle durchrechnet und jeweils einen dieser Fälle auf die Selections „Cat1\_Elec\_Out“ bis „Cat4\_Elec\_Out“ zuweist (siehe Anhang). Da aber jeder dieser vier Fälle mit der Fläche aller vier Kathoden rechnet, muss in Hinsicht auf die Austauschstromdichte die Vorgabe des gewünschten Stromes mit dem vierfachen Wert erfolgen. Zu diesem Zweck wird eine Variable mit dem Wert „4“ definiert. Mit dieser Variablen wird die jeweils eingegebene Stromstärke automatisch multipliziert, sodass direkt die gewünschte Stromstärke eingeben werden kann.

➤ Heater\_1 bis Heater\_4:

Diese vier Randbedingungen sind ident, nur werden die Wärmeströme variiert, um unterschiedliche Fälle zu simulieren. Sie beschreiben die Wärmezufuhr durch die vier Heizelemente. Der Randbedingungstyp ist „Wall“ und als thermische Einstellung wird die Option „Heat Flux“ gewählt. Die elektrische Einstellung ist wieder „Potential“ mit 0 Volt, da die Faces, auf welche die Randbedingungen zugewiesen werden, Teil des Anodeninterconnects (= Crofer-Platte) sind. Die Abschätzung des tatsächlichen Wertes des Wärmestromes stellt ein großes Problem dar, weshalb hier diverse Annahmen getroffen werden müssen.

Die Versorgungsspannung eines jeden Heizelementes wird während eines Versuchs aufgezeichnet. Die elektrische Leistung wird über den inneren Widerstand des Heizelementes in Wärme verwandelt, also gilt: [47]

$$\dot{Q} = P_{el} = U \cdot I = \frac{U^2}{R} \quad (4-46)$$

Der innere Widerstand des Heizelementes beträgt  $R = 1 \Omega$ . Im vorliegenden Versuch beträgt die Versorgungsspannung 15 V, also beträgt der gesamte Wärmestrom  $\dot{Q} = 15^2/1 = 225 \text{ W}$ . Der Anteil dieses Wärmestroms, der nach oben in das Anodeninterconnect fließt und daher für die Randbedingung relevant ist, ist jedoch unbekannt. Abbildung 4-23 zeigt die tatsächliche Einbausituation der Heizspiralen. Sie sitzen auf Keramikscheiben in kreisrunden Vertiefungen in einem Stahlsockel. Auf die Fläche um die Vertiefungen wird die Crofer-Platte gesetzt.



Abbildung 4-23: Einbausituation der Heizelemente [Quelle: AVL]

Die Keramikscheiben werden mit den Heizelementen geliefert, wobei keine Informationen zur Art der Keramik vorliegen. Daher ist die Wärmeleitfähigkeit des Materials unbekannt. Im Spalt zwischen Heizspirale und Anodeninterconnect befindet sich ein von Hand geschnittener Keramikrahmen, der elektrischen Kontakt zwischen Heizelement und Interconnect verhindert. Auch dessen Material und Kennwerte sind nicht bekannt, genauso wenig, ob das Interconnect tatsächlich auf diesem Rahmen aufliegt oder sich noch ein Luftspalt dazwischen befindet. Um Heizspirale und Keramikrahmen befindet sich Luft. Es liegen also verschiedene Materialien mit großteils unbekanntem Materialwerten vor.

Zudem fehlen Informationen über die Richtung des Wärmeflusses zwischen dem Crofer-Interconnect und dem Stahlsockel. Falls sich der Stahlsockel stärker erwärmt als das Crofer-Interconnect, fließt auch abseits der im Modell definierten Heizflächen Wärme ins Interconnect; im umgekehrten Fall ändert sich auch die Richtung des Wärmestromes.

Die Maximaltemperatur der Heizelemente ist mit 1400 °C angegeben und es ist anzunehmen, dass diese Temperatur bei der Maximalleistung von 725 W erreicht wird. [48] Die Temperatur in Abhängigkeit der Versorgungsspannung ist jedoch nicht bekannt. Sie wird am Rand des Luftvolumens, welches das Heizelement umgibt, gemessen. Aufgrund der schlechten Wärmeleitfähigkeit von Luft dürfte der gemessene Wert jedoch deutlich unter der tatsächlichen Temperatur des Heizelementes liegen. Das Thermoelement darf die Heizspirale nicht berühren, um elektrischen Kontakt zu vermeiden, daher ist eine genaue Messung schwer möglich. Im Versuch mit 15 V Versorgungsspannung beträgt die am Rand des Luftspaltes gemessene Temperatur  $717 \pm 5$  °C, während die Thermoelemente im Interconnect 15 mm oberhalb des Luftspaltes noch Temperaturspitzen um 775 °C aufzeichnen. Daher ist der Messwert im Luftspalt wenig aussagekräftig.

Auf der Oberfläche des Anodeninterconnects bildet sich eine raue, dunkle Oxidationsschicht mit hohem Emissionsgrad, wie bei der Randbedingung „TGIVEN\_Crofer“ beschrieben. Im Gegensatz dazu zeigen die Bilder vom Versuchsabbau, dass die Keramikscheiben unter den Heizelementen ihre weiße Farbe und glatte Oberfläche behalten, daher einen im Vergleich zum Crofer-Interconnect relativ niedrigen Emissionsgrad aufweisen und gut reflektieren. Bei hohen Temperaturen (schätzungsweise über 800 °C) dominiert die Wärmestrahlung gegenüber Wärmeleitung in Luft und Konvektion. Daher wird angenommen, dass mehr als 50 % der Wärme in die Crofer-Platte übergehen können.

Der angenommene Betrag muss jedenfalls auf die Fläche bezogen werden, die der Randbedingung unterliegt. Diese Heizfläche beträgt im Modell  $A_{Heiz} = 1,8837 \cdot 10^{-3} \text{ m}^2$ . Mit  $U = 15 \text{ V}$  und  $\dot{Q} = 225 \text{ W}$  liegt die maximale Wärmestromdichte daher bei  $\dot{q}_{max} = 119446 \text{ W/m}^2$ . Der schließlich in der Simulation verwendete Wert wird dann iterativ so angepasst, dass unter den Wärmeabfuhr-Randbedingungen die gemessenen Temperaturen berechnet werden. Für  $U = 15 \text{ V}$  liefert ein Wärmestrom von  $\dot{q} = 75000 \text{ W/m}^2$  die besten Resultate, was 62,79 % des maximalen Wärmestromes entspricht. Ob dieser Prozentsatz auch auf andere Wärmeströme zutrifft, muss durch die Simulation überprüft werden. Da bei anderen Temperaturen das Verhältnis zwischen Wärmestrahlung, Wärmeleitung und Konvektion abweicht, ist es jedoch unwahrscheinlich.

## ➤ INLET\_AIR:

Mit dieser Randbedingung wird der Luftmassenstrom definiert. Als Randbedingungstyp wird „Inlet/Outlet“ gewählt mit der Einstellung „Massflow“. Der Wert des Luftmassenstroms wird aus dem Volumenstrom berechnet, der in den Laborversuchen gemessen wird (Ist- statt Sollwerte). Im Fall des betrachteten Versuchs sind das durchschnittlich  $\dot{V}_L = 105 \text{ NI/h}$ . Davon entfallen 20,95 Vol.-% auf Sauerstoff [49], die restlichen 79,05 Vol.-% werden vereinfachend als Stickstoff angenommen. Damit beträgt der Volumenstrom an Sauerstoff  $\dot{V}_{O_2} = 21,9975 \text{ NI/h}$  und der Volumenstrom an Stickstoff  $\dot{V}_{N_2} = 83,0025 \text{ NI/h}$ . Über die Idealgasgleichung ergeben sich bei Annahme von Normzustand (da Angabe des Volumenstroms in Normlitern pro Stunde) die Massenströme, über die Molmassen die Molenströme und schließlich die Molanteile.

$$v_{O_2} = 0,20950 \text{ und } v_{N_2} = 0,79050 \quad (4-47)$$

Aus den zuvor berechneten Massenströmen wird der Gesamtmassenstrom an Luft von  $\dot{m}_L = 135,103 \text{ g/h}$  berechnet. Es wird eine konstante Temperatur von  $T_{ein} = 600 \text{ °C}$  angenommen sowie fixe Volumsanteile und fixe Turbulenz.

## ➤ INLET\_FUEL:

Mit dieser Randbedingung wird der Brenngasmassenstrom definiert. Als Randbedingungstyp wird „Inlet/Outlet“ gewählt mit der Einstellung „Massflow“. Der Wert des Brenngasmassenstroms wird aus den Volumenströmen berechnet, die in den Laborversuchen gemessen werden (Ist- statt Sollwerte). Im Fall des betrachteten Versuchs sind das durchschnittlich  $\dot{V}_{H_2} = 50,1 \text{ NI/h}$  Wasserstoff und  $\dot{V}_{N_2} = 38,9 \text{ NI/h}$  Stickstoff. Entsprechend der Berechnung für den Luftmassenstrom ergeben sich die Molanteile für das Brenngas zu:

$$v_{H_2} = 0,56298 \text{ und } v_{N_2} = 0,43702 \quad (4-48)$$

Die Berechnung des Gesamt-Brenngasmassenstroms ergibt  $\dot{m}_{BG} = 52,958 \text{ g/h}$ . Es wird eine konstante Temperatur von  $T_{ein} = 600 \text{ °C}$  angenommen sowie fixe Volumsanteile und fixe Turbulenz.

Mit diesen Werten kann die Simulation jedoch nicht rechnen. In FIRE<sup>®</sup> wird die Exchange Current Density  $i_0$  nach Gleichung (4-49) berechnet. [50]

$$i_0 = i_{0,ref} \cdot \left(\frac{p_{O_2}}{p_{ref}}\right)^{b_{O_2}} \cdot \left(\frac{p_{H_2}}{p_{ref}}\right)^{b_{H_2}} \cdot \left(\frac{p_{H_2O}}{p_{ref}}\right)^{b_{H_2O}} \cdot \exp\left[-\frac{E_{act,i_0}}{R} \cdot \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_{ref}}\right)\right] \quad (4-49)$$

$i_{0,ref}$  bezeichnet die Reference-Exchange current density,  $p_{ref}$  den Umgebungsdruck,  $p_i$  die Partialdrücke,  $R$  die allgemeine Gaskonstante,  $E_{act,i_0}$  die Aktivierungsenergie,  $T_{ref}$  die Referenztemperatur und  $T$  die vorliegende Temperatur.  $b_{O_2}$  wird in FIRE<sup>®</sup> Oxygen exponent genannt und  $b_{H_2}$  und  $b_{H_2O}$  dementsprechend Hydrogen exponent und Water exponent. Die Werte der drei Exponenten sind in Kapitel 4.1.5 aufgelistet.

Anhand der ersten Klammerausdrücke ist ersichtlich, dass sich  $i_0$  entlang der Flowfields ändert. Sauerstoff und Wasserstoff werden verbraucht und Wasser wird gebildet. In Folge dessen sinken die Partialdrücke  $p_{O_2}$  und  $p_{H_2}$ , während  $p_{H_2O}$  zunimmt.

Am Start der Simulation ist noch kein Wasser vorhanden, da dies ja erst durch die ablaufenden Reaktionen entsteht. Dadurch ist der Partialdruck zu Beginn  $p_{H_2O} = 0 \text{ Pa}$  und die Exchange Current Density wird zu Null. Aus diesem Grund benötigt die Simulation zur Initialisierung einen geringen Start-Molanteil an Wasser. Es hat sich gezeigt, dass ein Molanteil von 0,7 % Wasser

nicht unterschritten werden sollte. Diese 0,7 % werden vom Molanteil des Stickstoffs abgezogen, da die Summe ja wieder 100 % ergeben muss und Stickstoff die elektrochemischen Reaktionen ohnehin nicht beeinflusst. Gleichung (4-50) zeigt die angepassten Molanteile, die in der Simulation verwendet werden.

$$v_{H_2} = 0,56298 \text{ und } v_{N_2} = 0,43002 \text{ und } v_{H_2O} = 0,007 \quad (4-50)$$

➤ OUTLET\_AIR:

Diese Randbedingung definiert die Auslassöffnungen des Luftvolumens im Modell. Als Randbedingungstyp wird „Inlet/Outlet“ gewählt mit der Einstellung „Static Pressure“. Besagter Druck wird als Umgebungsdruck, welcher im Ofen herrscht, mit  $p_u = 101325 \text{ Pa} = 1 \text{ atm}$  gewählt. Genau umgekehrt zum Lufteinlass werden Austrittstemperatur, Volumsanteile und Turbulenzgrößen als variabel („fixed: no“) angenommen. Es gibt sechs Öffnungen, durch die Luft auf dem Kathodenflowfield in den Ofen geleitet wird. Außerdem besteht ein Spalt von 0,5 mm zwischen den 4 Keramikstempeln und dem Keramikrahmen. Es strömt also auch Luft an den Seiten der Stempel nach oben und in den Ofen.

➤ OUTLET\_FUEL:

Diese Randbedingung definiert die Auslassöffnung des Brenngasvolumens im Modell. Als Randbedingungstyp wird „Inlet/Outlet“ gewählt mit der Einstellung „Static Pressure“. Besagter Druck wird als Umgebungsdruck mit  $p_u = 101325 \text{ Pa} = 1 \text{ atm}$  gewählt. Genau umgekehrt zum Brenngaseinlass werden Austrittstemperatur, Volumsanteile und Turbulenzgrößen als variabel (Einstellung „fixed: no“) angenommen. Es gibt eine einzige Öffnung, durch die das Abgas abgeleitet wird.

➤ TGIVEN\_Ceramic:

Diese Randbedingung umfasst alle Oberflächen der Aluminiumoxidkeramik-Bauteile außer den waagrechten Flächen an der Oberseite. Als Randbedingungstyp wird „Wall“ gewählt. Es wird eine Umgebungstemperatur von 600 °C vorgegeben. Wärmeübertragung findet durch Konvektion und Strahlung statt, deren Koeffizienten im Folgenden ermittelt werden.

Konvektion: Im VDI Wärmeatlas findet sich eine Abschätzung des Wärmeübergangskoeffizienten  $\alpha$  für vertikale Flächen.  $\alpha$  wird dabei über die Nusseltzahl nach Gleichung (4-51) rückgerechnet. [44]

$$\alpha = \frac{Nu \cdot \lambda}{l} \quad (4-51)$$

$\lambda$  ist die Wärmeleitfähigkeit des Fluids (in diesem Fall Luft) und  $l$  bezeichnet die sog. charakteristische Länge, hier z.B. die Höhe der Wärme abgebenden Wand. [44] Die Nusseltzahl wiederum lässt sich nach Gleichung (4-52) als Funktion von Rayleigh- und Prandtlzahl ausdrücken. [44]

$$Nu = \left( 0,825 + 0,387 \cdot (Ra \cdot f_1(Pr))^{1/6} \right)^2 \quad (4-52)$$

Die Funktion  $f_1(Pr)$  ist durch Gleichung (4-53) gegeben: [44]

$$f_1(Pr) = \left( 1 + \left( \frac{0,492}{Pr} \right)^{9/16} \right)^{-16/9} \quad (4-53)$$

Die Prandtlzahl berechnet sich nach Gleichung (4-54): [44]

$$Pr = \frac{\eta \cdot c_p}{\lambda} \quad (4-54)$$

Nach [51] gilt bei 1,01325 bar und 600 °C für die dynamische Viskosität von Luft  $\eta = 39,17186 \cdot 10^{-6} Pa \cdot s$ , für die spezifische Wärmekapazität bei konstantem Druck  $c_p = 1116 J/(kg \cdot K)$  und für die Wärmeleitfähigkeit  $\lambda = 61,14 \cdot 10^{-3} W/(m \cdot K)$ . Damit gilt für die Prandtlzahl nach Gleichung (4-55):

$$Pr = 0,715 \quad (4-55)$$

und weiter nach Gleichung (4-56):

$$f_1(Pr) = 0,34814 \quad (4-56)$$

Zur Berechnung der Nusseltzahl nach Gleichung (4-52) fehlt nun noch die Rayleighzahl, die das Produkt aus der eben schon berechneten Prandtlzahl und der Grashofzahl ist. Die Grashofzahl wiederum berechnet sich nach Gleichung (4-57). [44]

$$Gr = \frac{g \cdot l^3 \cdot \beta \cdot (\vartheta_0 - \vartheta_\infty)}{\nu^2} \quad (4-57)$$

Weiters ist  $\beta = 1/T_\infty = 1/873,15 K^{-1}$ . [44] Die kinematische Viskosität beträgt nach [51]  $\nu = 96,99088 \cdot 10^{-6} m^2/s$ ,  $g$  ist die Gravitationskonstante und  $l$  die schon zuvor erwähnte charakteristische Länge. Aus dem CAD-Modell wird eine mittlere Wandhöhe von  $l = 0,02 m$  ausgelesen. Die Ofentemperatur beträgt  $\vartheta_\infty = 600 °C = 873,15 K$ , während aus ersten Simulationen eine mittlere Temperatur der Wand von  $\vartheta_0 = 940 K$  geschätzt wird. Mit diesen Werten ergibt sich die Grashofzahl nach Gleichung (4-58).

$$Gr = 638,7188719 \quad (4-58)$$

Weiter gilt: [44]

$$Ra = Gr \cdot Pr = 456,68947 \quad (4-59)$$

Nun kann nach Gleichung (4-52) die Nusseltzahl berechnet werden.

$$Nu = 2,97823 \quad (4-60)$$

Schließlich ergibt sich nach Gleichung (4-51) für den Wärmeübergangskoeffizienten  $\alpha$ :

$$\alpha = 9,10447 \frac{W}{m^2 \cdot K} \quad (4-61)$$

Wärmestrahlung: In [52] werden Emissionsgrade für eine Vielzahl an Materialien aufgelistet. Für Aluminiumoxid werden die Werte laut Tabelle 11 angegeben. [52]

Tabelle 11: Emissionsgrade von Aluminiumoxid bei ausgewählten Temperaturen, nach [52]

T in °C	T in K	$\varepsilon$ in J/(kg·K)
500	773,15	0,42
827	1100,15	0,26

Unter Annahme eines linearen Verlaufs über die Temperatur ergibt sich Gleichung (4-62) für die Temperaturabhängigkeit des Emissionsgrades von Aluminiumoxidkeramik.

$$\varepsilon_{Al_2O_3}(T) = -4,89279 \cdot 10^{-4} \cdot T + 0,7983 \quad (4-62)$$

➤ TGIVEN\_Crofer:

Diese Randbedingung gilt für die Seitenflächen der Crofer-Platte, die das anodenseitige Interconnect darstellt. Als Vereinfachung werden auch die Seitenflächen des Stahlrahmens und der Glaslotdichtung von dieser Randbedingung abgedeckt. Der Randbedingungstyp ist wieder „Wall“. Umgebungstemperatur und konvektiver Wärmeübergang sind identisch zur Randbedingung „TGIVEN\_Ceramic“, der Emissionsgrad ist jedoch viel höher, was das Festlegen einer eigenen Randbedingung rechtfertigt. In [52] werden für über längere Zeit erhitzte und oxidierte Stähle verschiedene Werte im Bereich  $\varepsilon_{Stahl} \approx 0,62 - 0,87$  angegeben. Hier wird mit dem Emissionsgrad  $\varepsilon_{Stahl} = 0,8$  und wieder der Umgebungstemperatur  $T_u = 600\text{ °C}$  gerechnet. Da die gesamte Crofer-Platte auch als Anodeninterconnect fungiert, wird – wie an der Unterseite – auch an den Seitenflächen das Nullpotenzial definiert. Dazu muss für die elektrischen Einstellungen die Option „Potential“ ausgewählt und dessen Wert auf 0 Volt gesetzt werden.

➤ TGIVEN\_Top:

Diese Randbedingung gilt für die waagrechten Oberseiten der Keramikbauteile. Der Randbedingungstyp ist „Wall“ mit der thermischen Einstellung „Convection/Radiation“. Im realen Prüfstands Aufbau werden die Keramikteile mit Metallgewichten beschwert, um durch deren Gewicht Druck auf die Goldnetze auszuüben und so die Kathodenkontaktierung zu gewährleisten. Die gleichen Überlegungen wie für „Ano\_Elec\_Out“ gelten also auch hier. Die Umgebungstemperatur beträgt  $T_u = 600\text{ °C}$ . Wärmestrahlung wird deaktiviert und die Wärmeleitung durch Konvektion ersetzt. Es gelte wieder Gleichung (4-43). Der Stahlsockel ist wie die Zusatzgewichte aus Stahl 1.4841 gefertigt, also gilt ebenfalls  $\lambda = 24\text{ W}/(m \cdot K)$ . Die Querschnittsfläche der vier Zusatzgewichte beträgt in Summe  $A_{Leit} = 0,006688\text{ m}^2$  und die Fläche, über die Konvektion stattfindet,  $A_{Konv} = 0,0081\text{ m}^2$ . Für die Temperaturdifferenz gilt in etwa  $\Delta T = 80\text{ K}$ , und wenn diese Differenz über die Höhe des Zusatzgewichtes abgebaut wird, ist  $\Delta T/l = 80/0,25\text{ K}/m$ . Unter diesen Annahmen gilt:

$$\alpha = 79,625 \frac{W}{m^2 \cdot K} \quad (4-63)$$

#### 4.1.5 Einstellung der Brennstoffzelle („Fitting“)

Da das Modell die Realität kaum so exakt wiedergeben kann, dass es die gleichen Werte wie der reale Versuch produziert, kann die Elektrochemie im Modell über mehrere Parameter manipuliert werden. Diese Feineinstellung wird als „Fitting“ bezeichnet. Die entsprechenden Fitting-Parameter sind in Tabelle 12 aufgelistet.

Tabelle 12: Fitting-Parameter

Fitting-Parameter	Kathode	Anode	Einheit
Cathodic transfer coefficient	0,5	0,5	-
Anodic transfer coefficient	0,5	0,5	-
Exchange current density	12000	63266,1	A/m <sup>2</sup>
Oxygen exponent	0,25	-	-
Hydrogen exponent	-	1	-
Water exponent	-	1	-

Die Cathodic transfer coefficients (kathodische Ladungstransferkoeffizienten) und Anodic transfer coefficients (anodische Ladungstransferkoeffizienten) wurden bereits in der Butler-Volmer-Gleichung (Gleichung (2-42)) erklärt. Hierfür werden die Default-Einstellungen benutzt.



Oxygen exponent (Sauerstoffexponent), Hydrogen exponent (Wasserstoffexponent) und Water exponent (Wasserexponent) finden in Gleichung (4-49) Verwendung. Hier kommen ebenfalls die Default-Werte zur Anwendung.

Die Exchange Current Density der Anode wurden von einer AVL-internen Quelle bereitgestellt. Dieselbe Quelle lieferte auch einen Wert für die Exchange Current Density der Kathode, was jedoch zu einem zu starken Abfall des Potentials entlang der Ohm'schen Geraden führte. Daher wurde der Wert iterativ angepasst.

Es konnte beobachtet werden, dass mit steigender Exchange Current Density der Kathode das Potenzial bei hohen Stromstärken steigt, gleichzeitig aber die Potentialdifferenz der „vorderen“ (Segmente 1 & 3) und „hinteren“ (Segmente 2 & 4) Kathoden geringfügig abnimmt.

#### 4.1.6 Sonstige Einstellungen

Sämtliche Einstellungen der Simulation, wie auch schon die zuvor erläuterten Materialparameter (Kapitel 4.1.3), Randbedingungen (Kapitel 4.1.4) und das Fitting (Kapitel 4.1.5) werden im sogenannten „Solver Steering File“ (kurz ssf) festgelegt. Neben dem Gittermodell, welches die Geometrie vorgibt, ist das Solver Steering File der zweite essentielle Bestandteil jedes Simulationsmodells in FIRE<sup>®</sup>. Materialparameter, Randbedingungen und Fitting wurden im Detail betrachtet, da das Erarbeiten der Größen eines der Kern-Aufgabenpakete dieser Arbeit darstellt. Als Referenz für Personen, die mit dem erarbeiteten Modell weiterarbeiten, werden nun die weiteren Einstellungen aufgelistet, die unter anderem die Einbindung des Modells und aller Parameter beschreiben.

##### ➤ Runmode:

Als „Runmode“ wird „Steady“ gewählt. Es erfolgt also die Berechnung einer stationären Lösung, nicht die Entwicklung der physikalischen Größen über die Zeit, wie beispielsweise in einem Aufheizversuch.

##### ➤ Module Activation:

Zusätzlich zu den Grundeinstellungen lassen sich in FIRE<sup>®</sup> einige problemspezifische Zusatzmodule freischalten. Hier muss „Fuel cell“ ausgewählt werden. Als Folge werden automatisch die Module „Porosities“, „Multiphase“ und „Species transport“ aktiviert.

##### ➤ Fluid properties:

In diesem Einstellungsfenster werden alle Materialkenngrößen definiert, die nicht exklusiv bestimmten Zusatzmodulen zugeordnet werden. Das betrifft im vorliegenden Fall alle Bauteile mit Ausnahme der Brennstoffzelle sowie die Gase. Phase 1 wird als „Gas“ festgelegt, Phase 2 als „Solid“.

In der Gasphase erfolgen nur generelle Einstellungen der Gase, also nicht deren Zusammensetzungen, die durch die Randbedingungen vorgegeben werden. **Density** (Dichte) wird vereinfachend als **Ideal Gas** angenommen. Für **Molecular weight**, **Specific heat**, **Dynamic viscosity**, **Thermal conductivity** und **Diffusion coefficient** wird jeweils die Option **Database** selektiert. Die entsprechenden Werte müssen also nicht manuell festgelegt werden, da sie einer Datenbank entnommen werden, sofern die verwendeten Gase in FIRE<sup>®</sup> bekannt sind.

In der Solid-Phase müssen **Density**, **Thermal conductivity**, **Specific heat** und **Electric conductivity** angegeben werden. Für jede dieser Größen wird von einem einfachen Eingabefeld auf **Formula** umgeschaltet, um mehrere Materialien berücksichtigen zu können. Das Modell besteht aus folgenden Materialien:

- Crofer (Stahl) („Material\_interconnect\_ano“)
- Stahl 1.4841 („Material\_steel\_frame“)
- Aluminiumoxidkeramik („Material\_ceramic“)
- Glaslot („Material\_glass\_solder“)
- Gold („Material\_interconnect\_cat“ und „Material\_gold“)
- Nickel („Material\_nickel“)
- Ni-YSZ („Material\_anode“)
- YSZ („Material\_electrolyte“)
- LSM („Material\_cathode“)

Um die Materialien den Cell-Selections zuzuweisen, wird im Formel-Editor zunächst jeder Cell-Selection ein Index zugewiesen. Über diesen Index kann in weiterer Folge mittels „if...elseif“-Bedingungen für jedes Material entweder ein Wert oder eine Formel mit Temperaturabhängigkeit definiert werden. Der Code hierfür findet sich im Anhang.

Bei **Density** und **Specific heat** werden alle Materialien mit Werten oder Formeln versehen. Bei **Thermal conductivity** und **Electrical conductivity** hingegen werden die Zellkomponenten, Netze sowie Interconnects nicht berücksichtigt, da die beiden Größen für diese Komponenten im Einstellungsbereich der Brennstoffzelle abgefragt werden (**Density** und **Specific heat** werden hier nicht verlangt). Würden hier dennoch Werte angegeben, würden sie von den Einstellungen im Fenster **Fuel Cell** → **Parameters and properties** (siehe später) überschrieben werden, um bei unterschiedlichen Angaben einen Konflikt zu vermeiden.

Die verwendeten Werte und Formeln sind Kapitel 4.1.3 zu entnehmen.

➤ Anfangsbedingungen (Initial Conditions):

Für die Festkörper-Teile des Modells müssen Anfangsbedingungen definiert werden. Davon ausgenommen sind Komponenten der Brennstoffzelle, also Elektroden, Elektrolyt sowie Interconnects. Übrig bleiben die Keramikbauteile („Material\_ceramic“), die Glaslot-Dichtung („Material\_glass\_solder“) und der Stahlrahmen („Material\_steel\_frame“). Für alle drei Materialien werden identische Anfangsbedingungen laut Tabelle 13 gewählt. Druck und Temperatur entsprechen den Umgebungsbedingungen, also den Soll-Bedingungen im Ofen. **Turb. kin. Energy** und **Turb. length scale** sind Default-Einstellungen, während **Turb. diss. rate** von FIRE<sup>®</sup> automatisch berechnet wird.

Tabelle 13: Anfangsbedingungen

	Wert	Einheit
Pressure	101325	Pa
Temperature	600	°C
Turb. kin. energy	0,001	m <sup>2</sup> /s <sup>2</sup>
Turb. length scale	0,001	m
Turb. diss. rate	0,00519615	m <sup>2</sup> /s <sup>3</sup>

➤ Solver Control:

- Discretization: Zur Lösung der Navier-Stokes-Gleichungen wird der SIMPLE-Algorithmus (Semi-Implicit Method for Pressure Linked Equations) gewählt. Die Funktionsweise dieses Algorithmus ist Fabian Rasingers Diplomarbeit zu entnehmen. [1]
- Activate equations: Tabelle 14 zeigt die ausgewählten Einstellungen.

Tabelle 14: Activate equations-Einstellungen

	Phase 1
Momentum & Continuity	Yes
Volume fraction	Yes
Turbulence	Laminar
Energy	Yes (Total enthalpy)
Viscous heating	Yes
Pressure work	Yes
Scalar	Yes
Two-stage pressure correction	No
Compressibility	Weakly Compressible
Wall Treatment	Hybrid Wall Treatment
Heat Transfer Wall Model	Standard Wall Function

Dabei stellt sich die Frage, ob die Annahme laminarer Strömung gerechtfertigt ist. Diese Annahme wird über den Wert der dimensionslosen Reynoldszahl  $Re$  überprüft. [53]

$$Re = \frac{\rho \cdot U \cdot l}{\eta} = \frac{U \cdot l}{\nu} \quad (4-64)$$

$\rho$  ist die Dichte des Fluids,  $U$  die Strömungsgeschwindigkeit und  $l$  die charakteristische Länge. Bei geschätzten Werten für Druck  $p = 101325 \text{ Pa}$  und Temperatur  $T = 700^\circ\text{C}$  beträgt die kinematische Viskosität  $\nu = 117,73755330321 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$ . [51]

Für die charakteristische Länge des Flowfields wird der hydraulische Durchmesser für Rechtecksquerschnitte nach Gleichung (4-65) berechnet. [54]

$$d_H = \frac{2 \cdot a \cdot b}{a + b} = \frac{2 \cdot 0,0018 \cdot 0,0012}{0,0018 + 0,0012} = 0,00144 \text{ m} \quad (4-65)$$

Die Simulation zeigt im Luft-Flowfield Geschwindigkeiten von ungefähr  $u = 0,5 \text{ m/s}$ . Nach Gleichung (4-64) ergibt sich dann für die Reynoldszahl im Luft-Flowfield  $Re = 6,115$ .

Die kritische Reynoldszahl für Rohrströmungen liegt bei ungefähr  $Re_{krit} \approx 2300$ . [20] Unterhalb dieses Wertes hat die Strömung zu wenig Energie, um die Wirbel einer turbulenten Strömung aufrecht zu erhalten. [55] Da der berechnete Wert zwei bis drei Größenordnungen unterhalb des kritischen Wertes liegt, kann trotz Unsicherheiten bei den Werten davon ausgegangen werden, dass laminare Strömung vorliegt.

- Unterrelaxationsfaktoren (URFs):

Die Unterrelaxationsfaktoren sind Werte zwischen Null und Eins, mittels welcher die Divergenz-Anfälligkeit einer Berechnung reduziert werden soll. Betrachtet werde eine beliebige physikalische Größe  $X_i$ , die sich von Iteration  $i - 1$  zu Iteration  $i$  ändert. Für die aktuelle Iteration wird nun nicht der gerade neu berechnete Wert  $X_{i,berechnet}$  der physikalischen Größe verwendet. Stattdessen wird zum Wert der vorangegangenen Iteration die Differenz aus aktuellem und vorigem Wert, „abgeschwächt“ um den URF, hinzugezählt. [56]

$$X_{i,neu} = X_{i-1} + URF \cdot (X_{i,berechnet} - X_{i-1}) \quad (4-66)$$

Dadurch wird die Änderung der betrachteten Größe verlangsamt, was sich positiv auf die Stabilität der Berechnung auswirkt. Umgekehrt wird dadurch aber auch das Erreichen der Konvergenz verzögert. [56]

Tabelle 15 gibt eine Übersicht über die verwendeten Unterrelaxationsfaktoren. Phase 1 bezeichnet dabei die Gasströme und Phase 2 die Festkörper.

Tabelle 15: Under-relaxation factors

	Phase 1	Phase 2
Momentum	0,5	0,6
Pressure	0,3	-
Turb. kin. energy	0,4	0,4
Turb. diss. rate	0,4	0,4
Energy	0,99	1
Mass source	1	-
Viscosity	1	1
Scalar	0,6	0,8
Species transport equations	0,97	-
Volume fraction	0,8	0,8
Electric potential	-	1
Reaction current density	0,04	

- Konvergenzkriterien:

Mittels Konvergenzkriterien wird dem Solver mitgeteilt, wann das Ergebnis die gewünschte Genauigkeit erreicht hat, sodass die Berechnung als abgeschlossen betrachtet werden kann. Zu diesem Zweck werden die sogenannten Residuen betrachtet, die die Differenzen verschiedener Größen (z.B. Geschwindigkeitskomponenten, Energie, Impuls, ...) zwischen zwei aufeinanderfolgenden Iterationsschritten der Berechnung darstellen. Wenn alle Residuen ihre vorgegebenen Maximalwerte (= Konvergenzkriterien) unterschreiten, bedeutet das, dass die letzte Iteration keine signifikante Verbesserung zur vorangegangenen Iteration darstellt und auch die nachfolgenden Iterationen die Genauigkeit der Lösung nicht mehr signifikant erhöhen werden. Dann wird die Berechnung abgebrochen und die letzte Iteration als Lösung angesehen. Tabelle 16 bietet eine Aufstellung der verwendeten Konvergenzkriterien.

Tabelle 16: Konvergenzkriterien

	verwendet	Wert
Pressure	ja	$10^{-5}$
Momentum	ja	$10^{-4}$
Turb. kin. energy	nein	$10^{-4}$
Turb. diss. rate	nein	$10^{-4}$
Energy	ja	$10^{-8}$
Scalar	nein	$10^{-4}$
Volume fraction	nein	$10^{-4}$
Electric potential	ja	$10^{-8}$

- Porosities:

Im Porosity-Modul werden Einstellungen für die folgenden sechs Selections festgelegt:

- Material\_anode
- Material\_nickel
- Material\_cathode
- Material\_gold
- contact\_ano\_nickel
- contact\_cat\_gold

Für die vier Cell-Selections „Material\_...“ wird **Porosity Type: Undirected Porosity** angenommen. Die Porositätswerte nach Kapitel 4.1.3 werden jeweils im Eingabefeld der Größe **Volume fraction** eingetragen und die Tortuositätswerte im Eingabefeld **Tortuosity**. Es wird konstante Tortuosität gewählt.

Das verwendete **Pressure drop model** (Druckverlustmodell) ist **Forchheimer** (siehe Kapitel 2.3.4). Hier wird die Angabe des sogenannten **Alpha value** verlangt, der den Kehrwert des Permeabilitätskoeffizienten  $K$  in Gleichung (2-88) darstellt. Die Werte laut Tabelle 17 stammen von einer AVL-internen Quelle.

Tabelle 17: Permeabilitätswerte

Selection (Material)	$K$ in $m^2$	$\alpha$ in $1/m^2$
Material_anode (Ni-YSZ)	$10^{-13}$	$10^{13}$
Material_nickel (Nickel)	$10^{-12}$	$10^{12}$
Material_cathode (LSM)	$10^{-13}$	$10^{13}$
Material_gold (Gold)	$10^{-12}$	$10^{12}$

Etwas anders sehen die Einstellungen für „contact\_ano\_nickel“ und „contact\_cat\_gold“ aus, die keine Cell-Selections, sondern Face-Selections sind. Da kein Volumenelement zugrunde liegt, stehen Porosität und Tortuosität nicht zur Auswahl. Die entscheidende Größe ist hier der elektrische Kontaktwiderstand. Die beiden Selections wurden nur definiert, um diesen vorzugeben. Er beträgt  $10^{-6} V \cdot m^2/A$  für die Kontaktfläche zwischen Anode und Nickelnetzen und  $5 \cdot 10^{-6} V \cdot m^2/A$  für die Kontaktfläche zwischen Kathoden und Goldnetzen. Beide Werte stammen von einer AVL-internen Quelle.

Der thermische Kontaktwiderstand wird für beide Face-Selections mit  $0 m^2 \cdot K/W$  angenommen.

➤ Multiphase → Control:

Hier erfolgt die Festlegung der beiden Phasen als Festkörper oder Gas. Phase 2 wird als **Porosity phase** definiert und stellt damit den Festkörper dar. Folglich kann Phase 1 als Gasphase kein Festkörper sein.

➤ Species transport → Transport model:

Phase 1 wird als **Phase with species transport** festgelegt. Es wird das Einstellungs-Setup **General** anstatt **Standard** gewählt. **Number of species mass fractions** ist 4. Über die Schaltfläche **Edit names of species...** wird ein Tabellenfenster geöffnet, in welches die Spezies eingetragen werden: 1 =  $H_2$ , 2 =  $H_2O$ , 3 =  $O_2$ , 4 =  $N_2$ .  $N_2$  muss als vierte und damit letzte Spezies festgelegt werden, da die letzte Position der Tabelle automatisch in das Eingabefeld **Do not solve equation for species number** eingetragen wird. Der  $N_2$ -Anteil wird durch die elektrochemischen Vorgänge ja nicht verändert. **Multi-component diffusion** wird auf ON gesetzt.

➤ Fuel Cell:

- Global settings:

Als **Fuel cell type** wird **SOFC** gewählt. Dadurch wird die Angabe von Selections gefordert, die die typischen SOFC-Komponenten repräsentieren. Tabelle 18 zeigt die korrekte Zuweisung.

Tabelle 18: SOFC-Selections

	Cathode	Anode
Channel	air	fuel
Channel inlet	INLET_AIR	INLET_FUEL
Channel outlet	OUTLET_AIR	OUTLET_FUEL
Electrode	Material_cathode_and_gold	Material_anode_and_nickel
Electric inlet / outlet	Cat Elec_Out	Ano Elec_Out
Interconnect	Material_interconnect_cat	Material_interconnect_ano

- Parameters and properties:

Dieses Einstellungsfenster verlangt die Angabe der Materialeigenschaften der Zellkomponenten sowie die Einstellung der Elektrochemie, die schon in Kapitel 4.1.5 als „Fitting“ genauer betrachtet wurde. Das Fenster enthält mehrere Registerkarten: **Electrodes**, **Electrolyte**, **Interconnect**, **Electrochemistry**, **Chemical reactions** und **Underrelaxation factors**.

In **Electrodes**, **Electrolyte** und **Interconnect** müssen, wie schon bei **Fluid properties** → **Phase 2**, **Electrical conductivity** und **Thermal conductivity** für die jeweilige Komponente angegeben werden. Die entsprechenden Formeln bzw. Werte sind in Kapitel 4.1.3 erklärt. Hierbei ist zu beachten, dass unter **Fuel Cell** → **Global settings** für die Elektroden jeweils die Summe aus Elektrode und Kontaktierungsnetz angegeben wurde (siehe Tabelle 18). Entsprechend muss sowohl für **Material\_cathode\_and\_gold** als auch für **Material\_anode\_and\_nickel** in der Formel eine Unterscheidung in tatsächliche Elektrode und Netz getroffen werden. Dies geschieht wieder durch Zuweisung von Indices zu den Cell-Selections der Einzelkomponenten und Zugriff auf die Indices über „if...elseif...“-Bedingungen. Der entsprechende Code ist dem Anhang zu entnehmen.

Die Registerkarte **Electrochemistry** enthält die Fitting-Parameter nach Tabelle 12.

Unter **Chemical reactions** können bei Bedarf die Wassergas-Shift-Reaktion und die Reformierungsreaktion aktiviert werden. Da die vorliegende Simulation keine Kohlenwasserstoffe enthält, finden diese beiden Reaktionen jedoch nicht statt und werden dementsprechend auf „**Off**“ gesetzt. Soll die Simulation in Zukunft mit Kohlenwasserstoffbasierten Brennstoffen erfolgen, sind einerseits die gewünschten Gase an den Inlets vorzugeben und andererseits hier die beiden erwähnten Reaktionen zu aktivieren. Die Aktivierung fordert dann die Vorgabe weiterer Parameter wie z.B. Gleichgewichtskonstanten.

Als möglicher **Underrelaxation factor** liegt nur derjenige für die **Reaction current density** vor. Es wird der Default-Wert von 0,04 verwendet.

- Electromagnetics → Control:

Für Phase 1 (die Gase) werden sowohl **Electric potential** als auch **Magnetic potential** auf „**Off**“ gesetzt. In Phase 2 (den Festkörpern) wird für **Electric potential** „**On**“ und für **Magnetic potential** „**Off**“ gewählt.

## 4.2 Simulationsergebnisse und Vergleich mit Messdaten

In [6] setzen sich Wang et al. mit verschiedenen SOFC-Modellen auseinander. Die gültige Validierung eines Modells kann ihnen zufolge nur durch den Vergleich von Mess- und Simulationsdaten erfolgen. Je nach Zielsetzung kommen verschiedene Validierungskriterien in Frage: [6]

- die Spannung-Strom-Kurve, zusammengesetzt aus stationären Betriebspunkten
- elektrische Leistung und Wirkungsgrad unter verschiedenen Lasten und Bedingungen
- instationäres Verhalten bei Lastwechsel

Die hier durchgeführten Simulationen berechnen stationäre Lösungen, also wird die Spannung-Strom-Kurve als Validierungskriterium verwendet.

Wang et al. weisen aber auch darauf hin, dass eine Übereinstimmung nur innerhalb eines gewissen Toleranzbereiches stattfinden wird. Das liegt aber nicht nur daran, dass eine Modellbildung immer auch eine Vereinfachung darstellt. Eine Simulation wird bei erneuter Berechnung immer die selben Ergebnisse produzieren, während die erneute Durchführung eines Experiments am Prüfstand nie völlig identische Messwerte zum vorangegangenen Versuch liefert. Zumindest diese Messungenauigkeit muss als Toleranzbereich berücksichtigt werden. [6] Generell erwarten sich Wang et al. eine niedrigere elektrische Performance im realen Experiment, da die hohen Temperaturen das Auftreten verschiedener kleiner Materialdefekte wahrscheinlich machen. [6]

Das hier erstellte Modell wird nun zuerst bzgl. der Temperaturverteilung und anschließend auf die Validität der U-I-Kurve hin überprüft. Zur Temperaturverteilung muss angemerkt werden, dass alle relevanten Messpunkte (Thermoelemente) in einer Ebene ca. 5 mm unter dem Anoden-Flowfield sitzen (siehe Kapitel 3, speziell Abbildung 3-12). Die vertikale Temperaturverteilung, also normal zu den Zellschichten, wird nicht gemessen und ist daher nicht bekannt. Zumindest auf die elektrische Performance wirkt sich entsprechende Fehler nicht sehr stark aus. Einerseits werden die nachfolgenden Ergebnisse zeigen, dass sich die Temperaturdifferenzen zwischen der Messebene und der 5 mm darüber gelegenen Zelle in einer Größenordnung von 5 °C bewegen; andererseits zeigen derart geringe Temperaturunterschiede kaum signifikante Auswirkungen auf das Zellpotenzial.

### 4.2.1 Temperaturverteilung

Die Einstellung des thermischen Modells, also aller Parameter, die Wärmezufuhr und -abfuhr festlegen, erfolgte anhand eines Versuchs, bei dem alle vier Heizelemente mit einer Spannung von 15 V versorgt wurden (Fall 1 auf der folgenden Seite). Die problematische Formulierung von entsprechenden Randbedingungen, insbesondere des Wärmestroms, ist in Kapitel 4.1.4 beschrieben.

Von Interesse ist nun, ob der angenommene Wärmestrom auch dann zu akzeptablen Ergebnissen führt, wenn nicht alle vier Heizelemente aktiviert sind bzw. ob die getroffene Annahme, dass 62,79 % der Wärmeleistung in die Crofer-Platte fließen, auch für andere Wärmeleistungen Gültigkeit hat. Um dies festzustellen, werden vier in weiterer Folge beschriebene Fälle durchgerechnet. In allen vier Fällen ist die elektrische Last gleich Null. Die Temperaturwerte in den folgenden Tabellen wurden auf ganze Zahlen gerundet. Die Angabe von Nachkommastellen macht keinen Sinn, da die Messungenauigkeit der Thermoelemente mehrere Kelvin beträgt.

Die Grafiken Abbildung 4-25, Abbildung 4-28, Abbildung 4-32 und Abbildung 4-34 zeigen Gegenüberstellungen von gemessener und simulierter Temperaturverteilung sowie deren

Differenz für den jeweils betrachteten Fall. Auf der linken Seite ist immer eine zweidimensionale Darstellung zu sehen, die durch einen Schnitt durch die Crofer-Platte auf Ebene der Thermoelemente entsteht. Der äußere Rahmen der Grafik entspricht den Abmessungen der Crofer-Platte, der große schwarze Rahmen im Inneren zeigt die Dimensionen von Anode und Elektrolyt an und die vier kleinen Rahmen im Zentrum die der Kathoden. Das Koordinatensystem der Grafik zeigt die Abstände vom Nullpunkt in der linken unteren Ecke in Zentimetern und die weißen Pfeile geben die Gasflussrichtung an.

Neben jeder 2D-Grafik ist auch eine dreidimensionale Darstellung zu sehen, die auf der vertikalen Achse die Temperatur über den Koordinaten in Millimetern zeigt.

Für gemessene und simulierte Temperaturverteilung aller vier betrachteten Fälle wurde eine identische Skalierung gewählt. Dazu wurden die Temperaturen in der Messebene aller vier Fällen betrachtet. Die höchste Temperatur bildet die obere Grenze der Skala und die niedrigste die untere. Die obere Skala auf der rechten Seite gilt für die Temperaturverteilung und die untere für die Verteilung der Differenzen. Entsprechend der Temperaturskala ist auch die Differenzskala in allen vier Fällen gleich gewählt.

Sowohl 2D- als auch 3D-Grafik enden an den äußeren Thermoelementen. Tatsächlich treten in der Messebene außerhalb der äußeren Messpunkte niedrigere Temperaturen auf, da die Platte zum Rand hin weiter abkühlt. In den Grafiken wird jedoch nicht über die äußeren Messpunkte hinaus extrapoliert.

- Fall 1: Alle vier Heizelemente werden mit 15 V versorgt.

Abbildung 4-24 zeigt die aktivierten Heizelemente in rot. Die weißen Pfeile geben die Gasflussrichtung an.

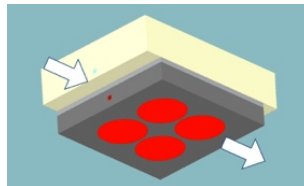


Abbildung 4-24: aktivierte Heizelemente Fall 1

Tabelle 20 im Anhang zeigt einen Vergleich der berechneten Temperaturen mit den vom Labor bereitgestellten Messwerten sowie die jeweilige Abweichung. Die Werte in Tabelle 20 liegen den Grafiken in Abbildung 4-25 zugrunde.

Die von den Thermoelementen  $T_{h34}$  und  $T_{h42}$  (vgl. auch Abbildung 3-14) gemessenen Spitzentemperaturen von ungefähr  $775\text{ °C}$  werden mit einer betragsmäßigen Abweichung von unter  $1\text{ K}$  ziemlich genau wiedergegeben, da Fall 1 zur Einstellung der Wärmeströme verwendet wurde. Die Temperaturen in den Eckpunkten ( $T_{v1}$ ,  $T_{v4}$ ,  $T_{v5}$ ,  $T_{v6}$ ,  $T_{v15}$  und  $T_{v16}$ ) weichen alle weniger als  $7\text{ K}$  von der Messung ab; die Temperaturen im Zentrum und am äußeren Rand werden also ganz gut wiedergegeben. Im Bereich dazwischen werden allerdings etwas zu hohe Temperaturen berechnet; die betragsmäßig größte Abweichung beträgt  $23\text{ K}$ . Werden die Beträge der Differenzen von Messung und Simulation betrachtet, so beträgt die mittlere Abweichung aller Messpunkte  $7\text{ K}$ .

Die Simulation zeigt eine homogenere und symmetrischere Temperaturverteilung als die Messung. Laut Messung treten die Temperaturspitzen nicht ganz im Zentrum der Crofer-Platte auf, sondern in etwa über den Zentren der Heizflächen. Die Simulation dagegen berechnet die höchsten Temperaturen weiter im Zentrum der Crofer-Platte, wo die Wärmeströme aller vier Heizelemente zusammenfließen. Als Ursache für diesen Unterschied wird die Definition der Heizflächen-Randbedingungen vermutet. Diese geben eine konstante Wärmestromdichte über die gesamte Heizfläche vor. In der Realität nimmt die Wärmestromdichte vom Zentrum der Heizfläche nach außen zum Rand hin höchstwahrscheinlich ab. Dadurch treten die Temperaturspitzen eben über den Zentren der Heizflächen auf, während die Temperatur im Zentrum der Crofer-Platte (Thermoelemente  $T_{v8}$ ,  $T_{v10}$ ,  $T_{v11}$  und  $T_{v13}$ ) geringfügig tiefer liegt.



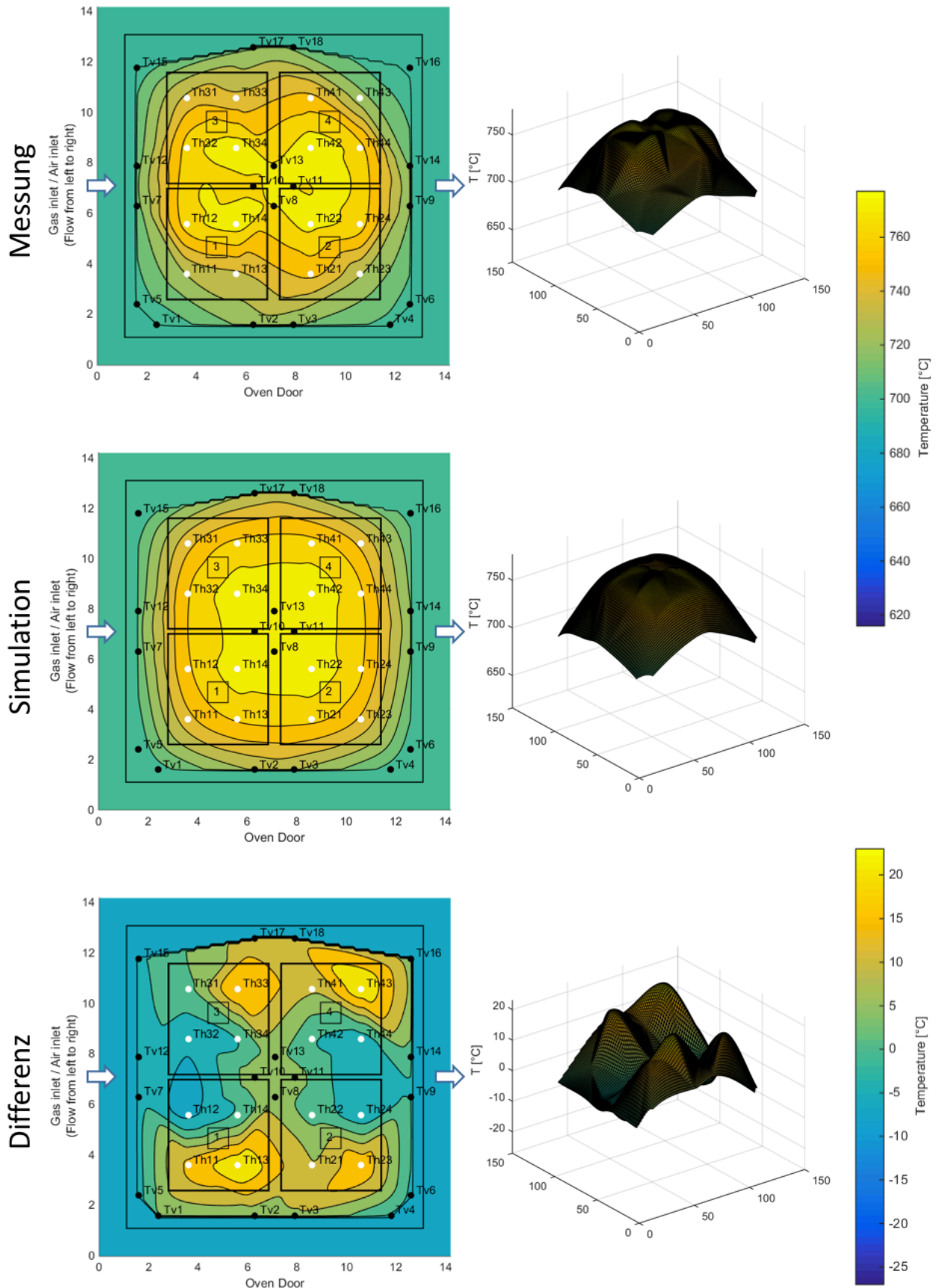


Abbildung 4-25: Temperaturverteilung Fall 1

Der Differenzplot zeigt die höchsten Abweichungen in den äußeren Ecken der Rahmen, die die Lage der Kathoden angeben. Auch hierfür wird als Ursache die Heizflächen-Randbedingung gesehen. Die Thermoelemente T\_h13, T\_h23, T\_h33 und T\_h43, in denen

die simulierten Temperaturen die gemessenen am weitesten überschreiten, liegen über dem Rand der Heizflächen. Die Randbedingungen geben hier eine zu hohe Wärmestromdichte vor, wodurch der Temperaturgradient falsch abgebildet wird.

Abbildung 4-26 zeigt die Temperaturverteilung auf der Oberfläche des Netzgittermodells für Fall 1. Die höchsten Temperaturen treten logischerweise auf den kreisrunden Wärmezufuhrflächen auf und betragen ca. 806 °C. Während die Außenflächen der Crofer-Platte eine relativ konstante Temperatur von ungefähr 700 °C aufweisen, stellt sich in den keramischen Bauteilen zufolge der geringeren Wärmeleitfähigkeit ein stärkerer Temperaturabfall ein. Obwohl die Glaslotdichtung zwischen der Crofer-Platte und dem dünnen Stahlrahmen eine sehr niedrige Wärmeleitfähigkeit besitzt, ist hier kein außerordentlicher Temperaturabfall sichtbar, da die Schichtdicke der Glaslotdichtung äußerst gering ist.

Die über die Crofer-Platte hinausragenden Sektionen des Keramikrahmens sind am weitesten von den Heizelementen entfernt, daher treten hier in den oberen Ecken die niedrigsten Temperaturen von ca. 630 °C auf. Die niedrigsten Oberflächentemperaturen liegen also ca. 30 K über der Umgebungstemperatur. Von dieser Betrachtung ausgenommen sind die Inlets für Luft und Brenngas, deren Temperaturen ja von den Randbedingungen mit 600 °C vorgegeben werden.

Deutlich zu erkennen ist ein Temperatursprung von etwa 30 K - 40 K zwischen den Keramikstempeln und der horizontalen Oberseite des Keramikrahmens. Die Ursache dafür ist der dünne Spalt zwischen diesen Bauteilen, durch den Luft entweicht. Die niedrige Wärmeleitfähigkeit von Luft verursacht den Temperatursprung. Die Stempel im Zentrum liegen noch über den Heizelementen, während der Keramikrahmen von den heißeren Stempeln durch den Luftstrom isoliert wird.

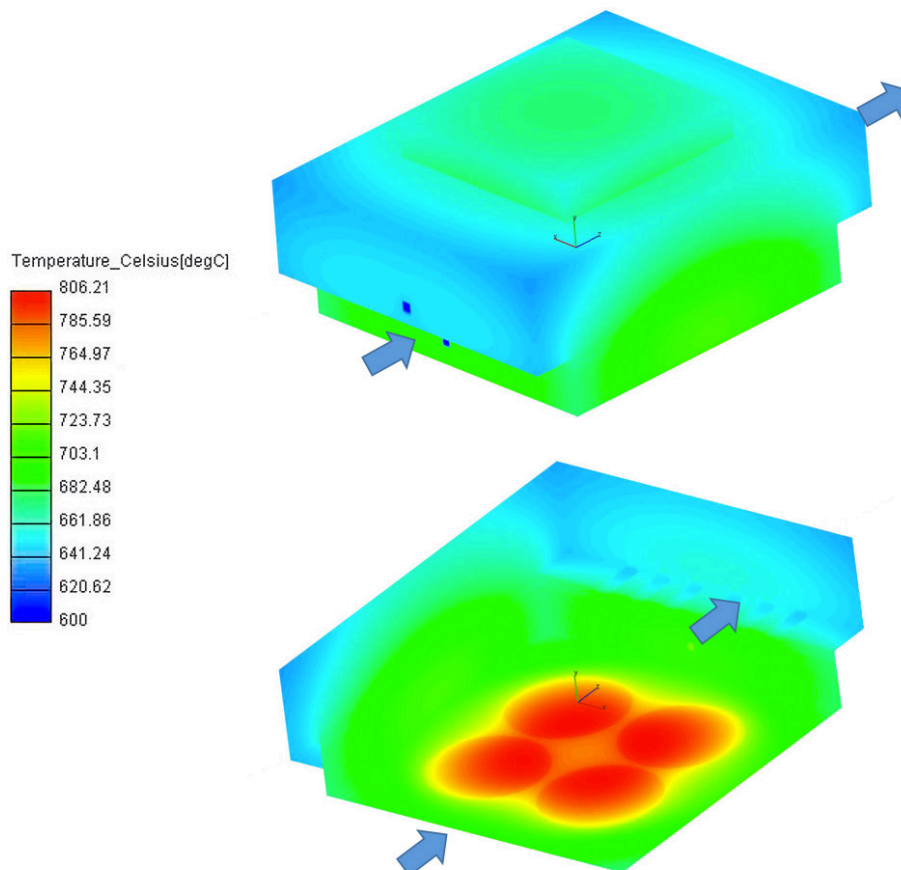


Abbildung 4-26: Oberflächentemperaturverteilung Fall 1

- Fall 2: Die Heizelemente 2 und 3 werden mit 15 V versorgt.

Abbildung 4-27 zeigt die aktivierten Heizelemente in rot. Die weißen Pfeile geben die Gasflussrichtung an.

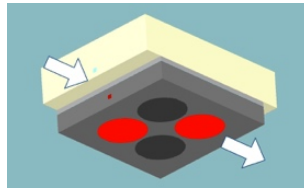


Abbildung 4-27: aktivierte Heizelemente Fall 2

Tabelle 21 im Anhang zeigt einen Vergleich der berechneten Temperaturen mit den vom Labor bereitgestellten Messwerten sowie die jeweilige Abweichung. Die Werte in Tabelle 21 liegen den Grafiken in Abbildung 4-28 zugrunde.

In diesem Fall berechnet die Simulation in sämtlichen Messpunkten zu niedrige Temperaturen, wie auch anhand des Differenzplots ersichtlich wird. Eine eindeutige Tendenz lässt sich nicht erkennen; die Temperaturen sind sowohl im Zentrum als auch am Rand zu niedrig. Der Differenzplot zeigt die höchsten Abweichungen mit ca. -27 K in den Thermoelementen  $T_{h24}$  und  $T_{h32}$  an. Werden die Beträge der Differenzen betrachtet, so beträgt die mittlere Abweichung 16 K.

Die simulierten Temperaturspitzen sind viel schwächer ausgeprägt als die gemessenen; sie liegen bei niedrigeren Temperaturen und sind großflächiger. Da in Fall 2 nur zwei Heizelemente aktiviert sind, ist das Temperaturniveau allgemein deutlich niedriger als in Fall 1. Die Spitzentemperaturen liegen laut Messung bei ca. 720 °C und laut Simulation 27 K darunter. Damit liegen die höchsten gemessenen Temperaturen in Fall 1 55 K über den gemessenen Spitzentemperaturen in Fall 2.

Die 3D-Plots zeigen, dass auch der „Sattel“ zwischen den beiden Temperaturspitzen in der Simulation schwächer ausgeprägt ist als in der Messung.

Als Ursache wird wieder die Heizflächen-Randbedingung vermutet.

Dieser Fall zeigt die schlechteste Übereinstimmung mit den Messwerten.

Abbildung 4-29 zeigt die Temperaturverteilung auf der Oberfläche des Netzgittermodells für Fall 2. Die Wärmezufuhr über die Diagonale zwischen den Segmenten 2 und 3 zeichnet sich auch noch an der Oberfläche ab.

Die Temperaturskala zeigt, dass die höchste Oberflächentemperatur von ca. 732 °C mehr als 70 K unter der höchsten Oberflächentemperatur in Fall 1 liegt. Auch der Bereich zwischen den Heizflächen wird viel weniger erhitzt.

Hier stellt sich durch das Fehlen zweier Wärmeströme auch in der Crofer-Platte ein deutlicher Temperaturgradient über die Seitenflächen ein. Die niedrigsten Temperaturen in den Ecken des Keramikrahmens liegen mit ca. 615 °C ungefähr 15 K unter jenen in Fall 1. Der durch den Luftspalt zwischen den Keramikstempeln und dem Keramikrahmen verursachte Temperatursprung ist wieder deutlich sichtbar und in jenen Segmenten ausgeprägter, wo die Heizelemente deaktiviert sind.

## 4 Simulation

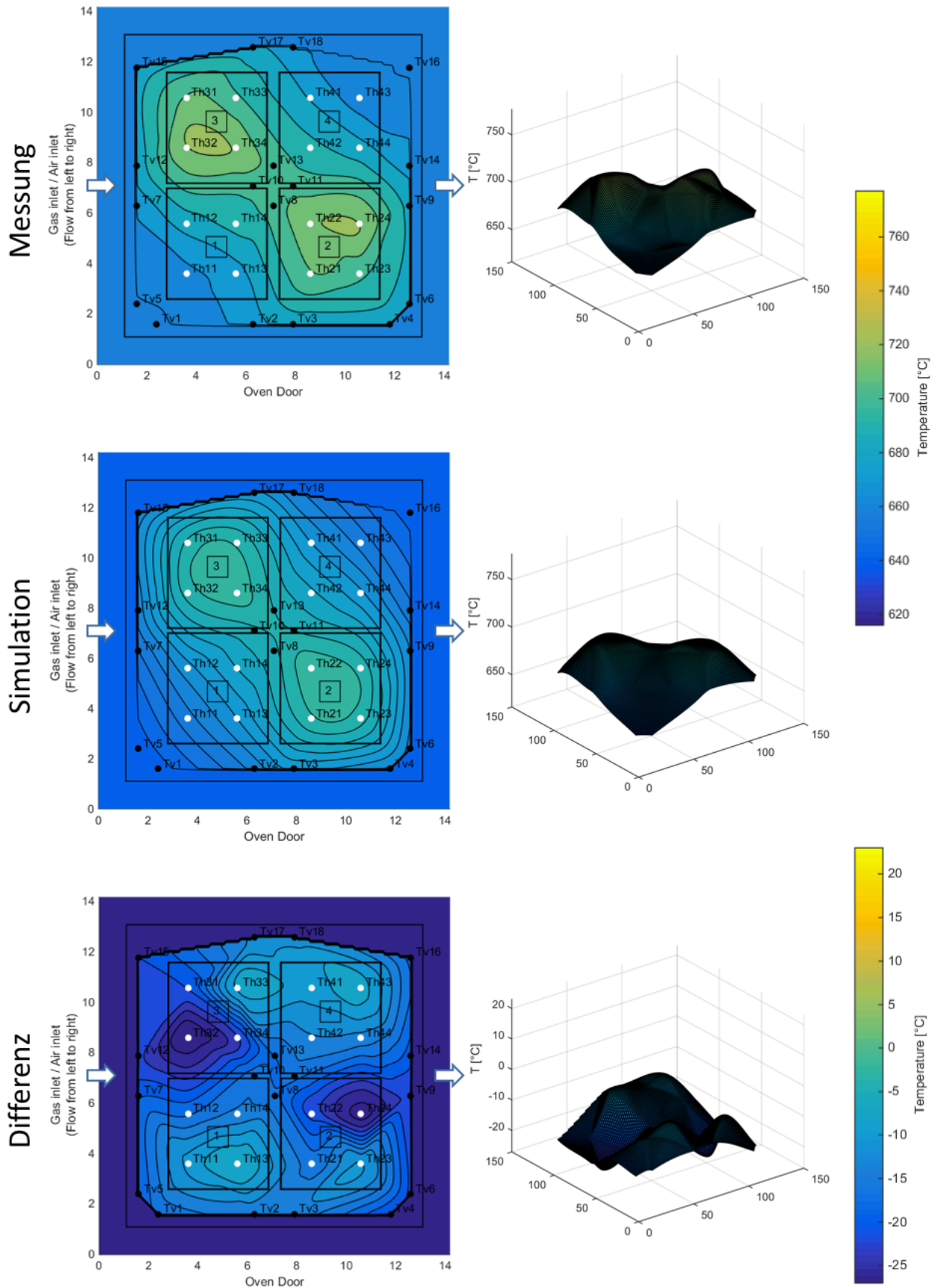


Abbildung 4-28: Temperaturverteilung Fall 2

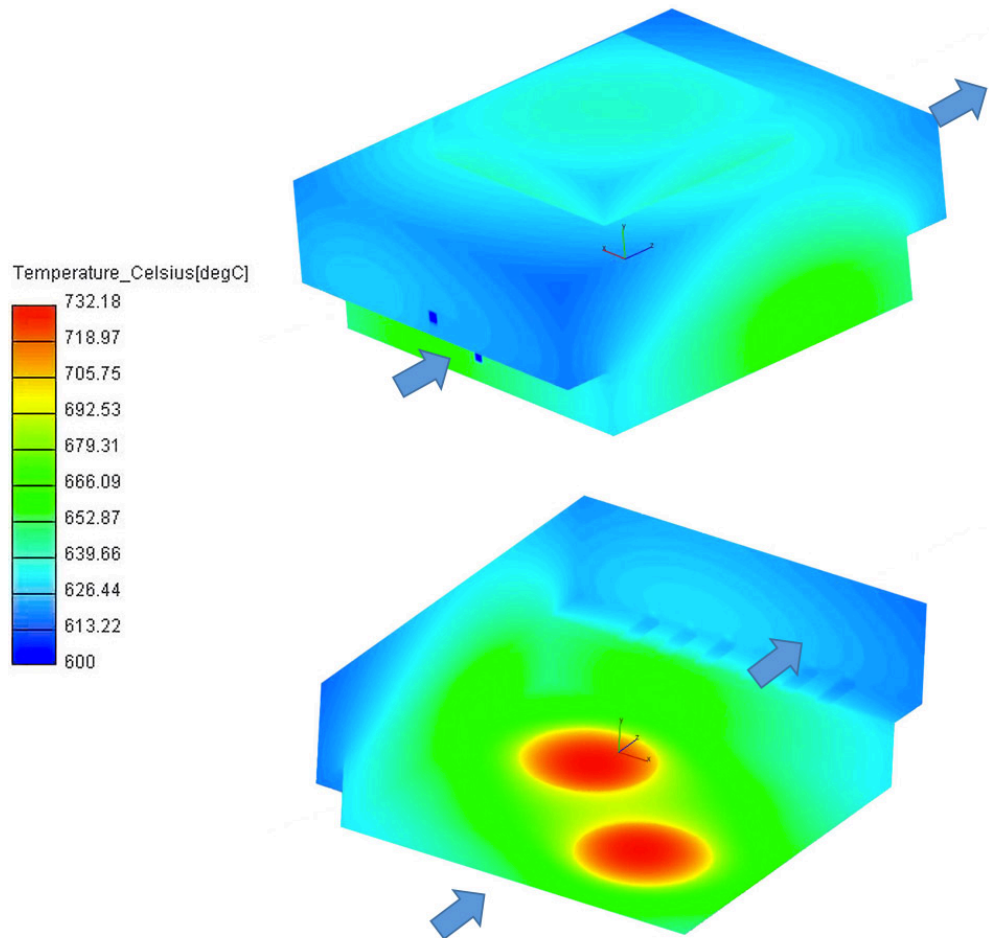


Abbildung 4-29: Oberflächentemperaturverteilung Fall 2

- Fall 3: Die Heizelemente 3 und 4 werden mit 15 V versorgt.

Abbildung 4-30 zeigt die aktivierten Heizelemente in rot. Die weißen Pfeile geben die Gasflussrichtung an.

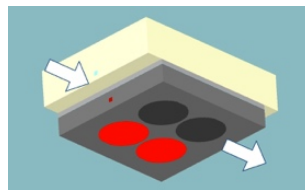


Abbildung 4-30: aktivierte Heizelemente Fall 3

Tabelle 22 im Anhang zeigt einen Vergleich der berechneten Temperaturen mit den vom Labor bereitgestellten Messwerten sowie die jeweilige Abweichung. Die Werte in Tabelle 22 liegen den Grafiken in Abbildung 4-32 zugrunde.

In Fall 3 fallen die in Abbildung 4-32 dargestellten Temperaturdifferenzen deutlich geringer aus als in den Fällen 1 und 2. Werden die Beträge der Differenzen betrachtet, so beträgt die mittlere Abweichung 5 K. Die betragsmäßig größte Abweichung beträgt nur mehr 14 K, also fast die Hälfte der maximalen Abweichung in Fall 2.

Die simulierte Temperaturverteilung ist wieder homogener als die gemessene. Die Messung zeigt zwei schwach ausgeprägte Temperaturspitzen, wohingegen die Simulation im 3D-Plot einen länglich ausgeprägten „Grat“ angibt. Die Simulation verzeichnet die höchsten

Temperaturen in den Thermoelementen T\_h33 und T\_h41 anstatt in T\_h34 und T\_h42 laut Messung, also weiter vom Zentrum entfernt. Abgesehen davon, dass die Simulation die höchsten Temperaturen an den falschen Positionen angibt, wird deren Wert von ca. 711 °C ziemlich genau getroffen.

Der Differenzplot zeigt diese Verlagerung der Spitzentemperaturen. Die Temperaturen der Thermoelemente T\_h34 und T\_h42 werden um 4 K zu niedrig und jene der Thermoelemente T\_h33 und T\_h41 um 10 K bzw. 4 K zu hoch berechnet.

Abbildung 4-31 zeigt die Temperaturverteilung auf der Oberfläche des Netzgittermodells für Fall 3. Die einseitige Einfluss der Heizelemente nahe der Ofenrückwand ist auf der gesamten Oberfläche erkennbar. Da die aktivierten Heizelemente nun direkt nebeneinander anstatt diagonal gegenüber liegen und dadurch die Distanz zwischen ihnen geringer ist, ist die höchste Oberflächentemperatur geringfügig höher als in Fall 2. Mit 745 °C liegt sie aber immer noch ca. 60 K unter der höchsten Temperatur, die in Fall 1 auftritt. Die niedrigsten Oberflächentemperaturen (abgesehen von den Inlets) treten wieder in den Ecken des Keramikrahmens auf, die am weitesten von den Heizelementen entfernt sind und betragen ähnlich wie in Fall 2 ca. 615 °C.

Die isolierende Wirkung des Luftspaltes zwischen den Keramikstempeln und dem Keramikrahmen zeichnet sich wieder deutlich ab, wobei der Temperatursprung abermals in den Segmenten stärker ist, die nicht zusätzlich beheizt werden. Die Oberseite der Keramikstempel hat ein Temperaturmaximum von ca. 640 °C, was in etwa Fall 2 entspricht.

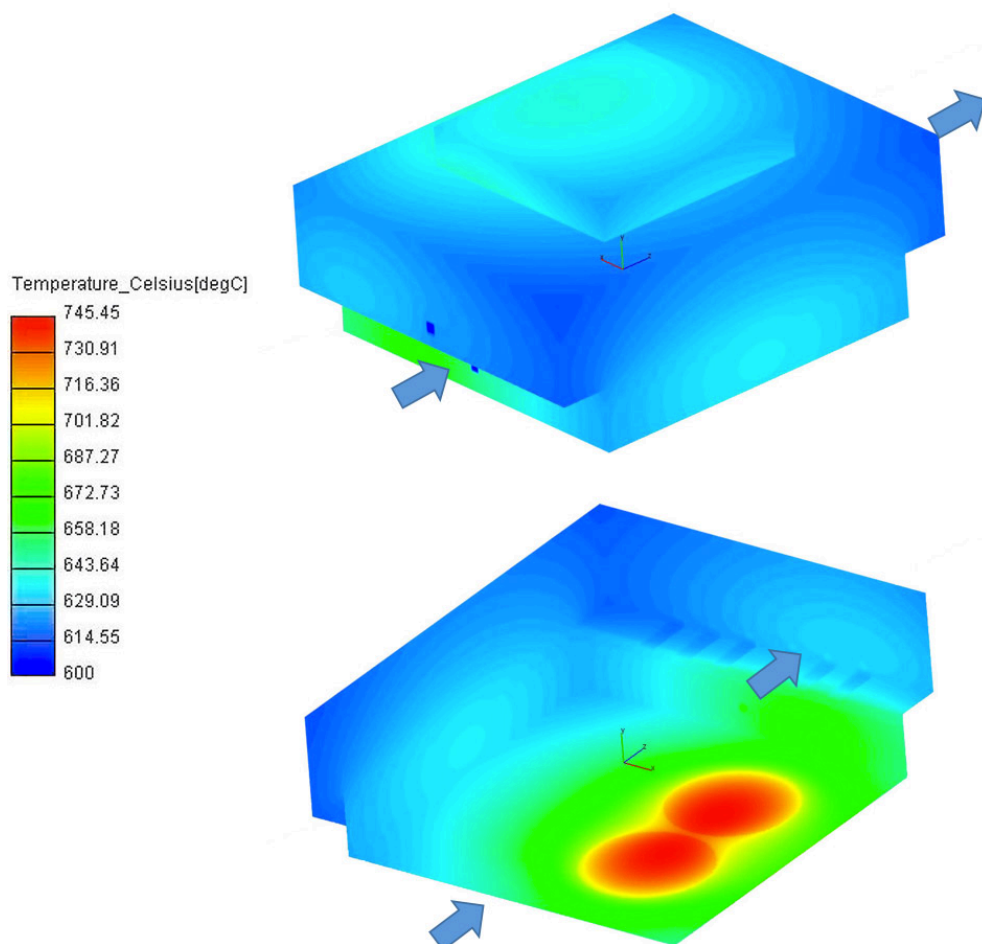


Abbildung 4-31: Oberflächentemperaturverteilung Fall 3

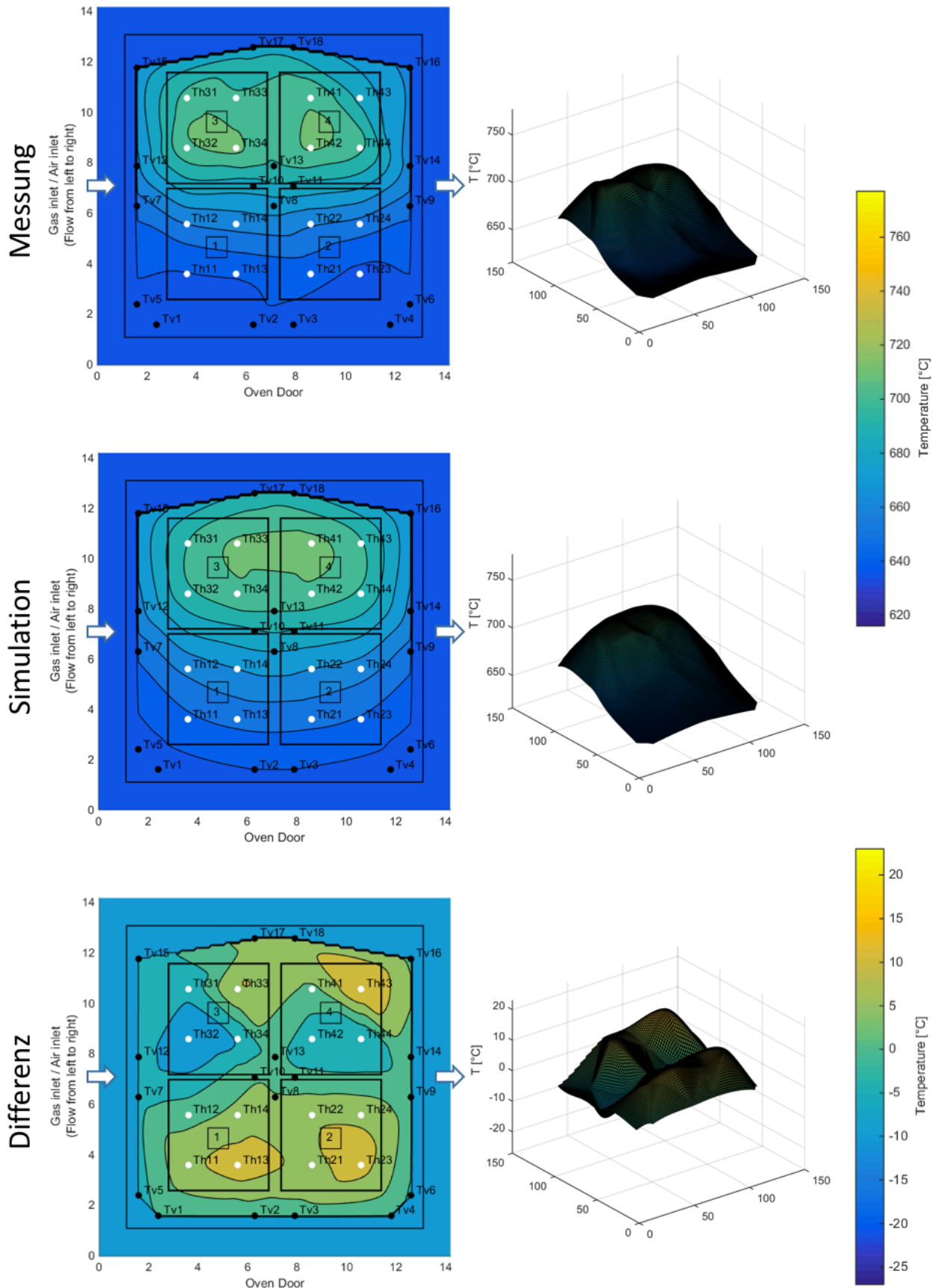


Abbildung 4-32: Temperaturverteilung Fall 3

- Fall 4: Heizelement 4 wird mit 16,5 V versorgt.

Abbildung 4-33 zeigt das aktivierte Heizelement in rot. Die weißen Pfeile geben die Gasflussrichtung an.

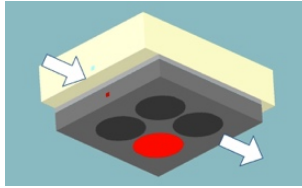


Abbildung 4-33: aktiviertes Heizelement Fall 4

Im entsprechende Laborversuch wurden die Heizelemente mit einer geringfügig höheren Versorgungsspannung betrieben als in den Fällen zuvor, daher müssen die Einstellungen angepasst werden. Nach Gleichung (4-46) beträgt die Wärmeleistung  $\dot{Q} = 272,25 \text{ W}$ . Bezogen auf die Heizfläche ergibt das eine maximale Wärmestromdichte von  $\dot{q}_{max} = 144529 \text{ W/m}^2$ . Wird angenommen, dass wieder 62,79 % der Wärmeleistung der Crofer-Platte zugeführt werden, beträgt die Wärmestromdichte  $\dot{q} = 90750 \text{ W/m}^2$ .

Tabelle 23 im Anhang zeigt einen Vergleich der berechneten Temperaturen mit den vom Labor bereitgestellten Messwerten sowie die jeweilige Abweichung. Die Werte in Tabelle 23 liegen den Grafiken in Abbildung 4-34 zugrunde.

Werden maximale und mittlere Abweichung betrachtet, so zeigt dieser Fall die beste Übereinstimmung zwischen Simulation und Messwerten. Werden die Beträge der Differenzen betrachtet, so beträgt die mittlere Abweichung nur mehr 3 K. Die betragsmäßig größte Abweichung beträgt lediglich 11 K. Die Abweichungen von den Messwerten sind jedoch gerade direkt über der aktivierten Heizfläche 4 am größten. Interessanterweise ist hier im Gegensatz zu den vorigen drei Fällen die Temperaturspitze in der Simulation stärker ausgeprägt als in der Messung. In den Thermoelementen T\_h41, T\_h42 und T\_h44 liegen die Temperaturen 4 K bis 11 K unter den gemessenen Werten, während T\_h43 10 K darüber liegt. In der Messung weist T\_h44 mit 693 °C den höchsten Wert auf, in der Simulation ist es T\_h43 mit 687 °C.

In den unbeheizten Segmenten dagegen betragen die Abweichungen in fast allen Messpunkten weniger als 4 K.

Das mittlere Temperaturniveau ist in diesem Fall natürlich am geringsten, da nur ein Heizelement aktiviert ist. In diesem Fall tritt in der Messebene die niedrigste Temperatur von 616 °C auf, die als untere Grenze für die einheitlichen Temperaturskalen gewählt wurde.

Ob die Annahme, dass ungefähr 63 % der verfügbaren Wärmeleistung als Wärmestrom für die Randbedingung anzunehmen sind, gerechtfertigt ist, lässt sich nur schwer beantworten. Dafür sprechen die insgesamt geringen Temperaturdifferenzen, dagegen spricht, dass die Abweichungen gerade im beheizten Segment am höchsten sind.

Abbildung 4-35 zeigt die Temperaturverteilung auf der Oberfläche des Netzgittermodells für Fall 4. Der etwas höhere Wärmestrom in Segment 4 kann das Fehlen der übrigen Wärmeströme bei Weitem nicht kompensieren und sämtliche Temperaturen fallen viel geringer aus. Das Maximum der Oberflächentemperaturen liegt nur mehr bei 731 °C. Die Ecken des Keramikrahmens in Segment 1, also diagonal gegenüber des beheizten Segments 4, weisen nun nur mehr die Umgebungstemperatur von 600 °C auf.

Der Temperatursprung zwischen Keramikstempeln und -rahmen ist deutlich erkennbar, beträgt aber nur mehr ca. 10 K.



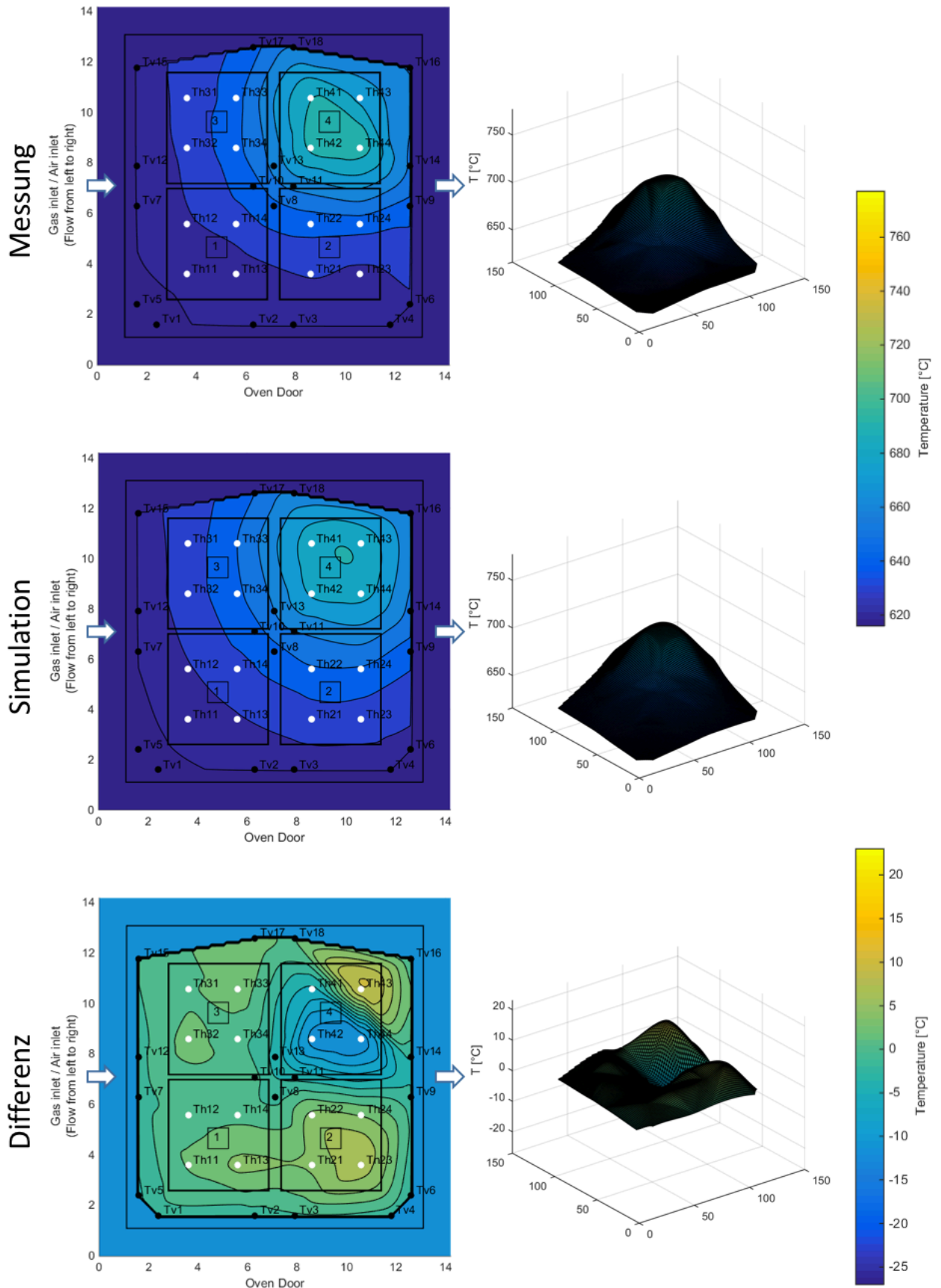


Abbildung 4-34: Temperaturverteilung Fall 4

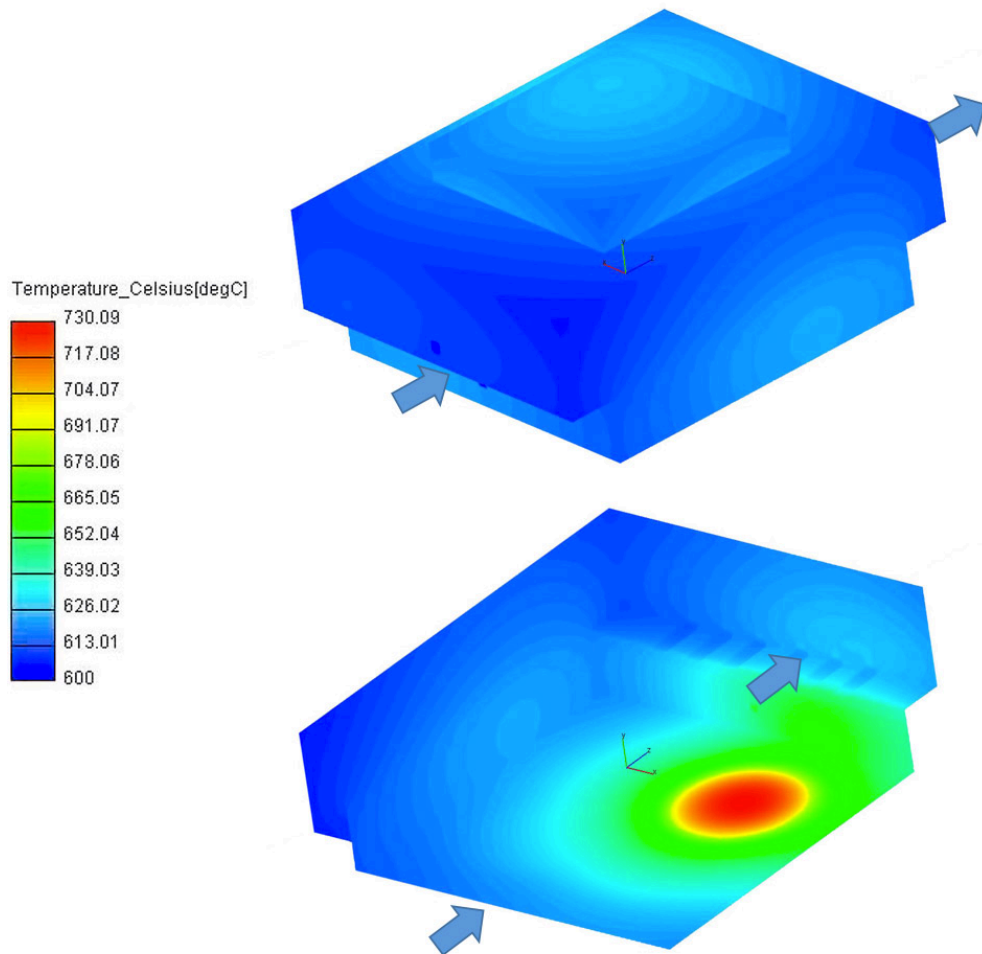


Abbildung 4-35: Oberflächentemperaturverteilung Fall 4

Ein abschließender Vergleich der vier Fälle zeigt, dass stärkere Abweichungen von den Messwerten vermehrt bei „inhomogenen“ Temperaturverteilungen bzw. starken Temperaturgradienten auftreten, wie sie beispielsweise Fall 2 zeigt. Auch Fall 4 bestätigt diese Tendenz: In den drei unbeheizten Segmenten, wo keine hohen Temperaturgradienten auftreten, stimmen Simulations- und Messwerte recht gut überein. Im beheizten Segment 4 dagegen treten stark variierende Abweichungen auf.

Wie schon erwähnt wird als Ursache die Definition der Heizflächen-Randbedingungen vermutet.

#### 4.2.2 Änderung der Temperatur mit steigender Stromdichte

Es wird der Einfluss des Stroms auf die Temperaturverteilung betrachtet. Um diesen zu untersuchen wurden die Simulationsdaten und Messwerte der Thermolemente in den in Kapitel 4.2.3 gelisteten Betriebspunkten bei unterschiedlichen elektrischen Lasten ausgelesen. Tabelle 24 im Anhang bietet eine Übersicht über sämtliche berechnete Temperaturen in Abhängigkeit der vorgegebenen Stromstärken bzw. Stromdichten.

Die Auswertung von Tabelle 24 ergibt einen minimalen Temperaturanstieg von 4 °C in den Thermolementen T\_v1, T\_v5, T\_v6 und T\_v17 und einen maximalen Temperaturanstieg von 9 °C in den Thermolementen T\_v 8, T\_v 10, T\_v 11, T\_v 13, T\_h13, T\_h 22, T\_h 42 und T\_h 43. Sämtliche Werte sind wieder auf ganze Zahlen gerundet. In Hinsicht auf die Positionen der besagten Thermolemente lässt sich feststellen, dass der Temperaturanstieg im Zentrum der Messebene ungefähr doppelt so hoch ist wie an den Rändern.

Abbildung 4-36 zeigt den Vergleich der Simulationsergebnisse mit den Messdaten über der Stromdichte (Messwerte siehe Tabelle 25 im Anhang). Zur Betrachtung wurden je zwei Thermoelemente im Zentrum der Crofer-Platte ( $T_{v8}$  und  $T_{v13}$ ) und zwei in den gaseingangsseitigen Ecken ( $T_{v5}$  und  $T_{v15}$ ), also möglichst nahe am Rand der Messebene, gewählt (vgl. Abbildung 3-14).

Aussagekräftig ist nur der Bereich bis  $500 \text{ mA/cm}^2$ , da im Laborversuch von dieser Stromdichte aufwärts die Versorgungsspannung der Heizelemente aus unersichtlichen Gründen von  $18 \text{ V}$  auf  $15 \text{ V}$  gesenkt wurde. Der Einfluss der Heizelemente auf die Temperatur ist deutlich stärker ausgeprägt als der Einfluss der Stromdichte und der resultierende Temperaturabfall macht eine Betrachtung dieses Bereichs sinnlos.

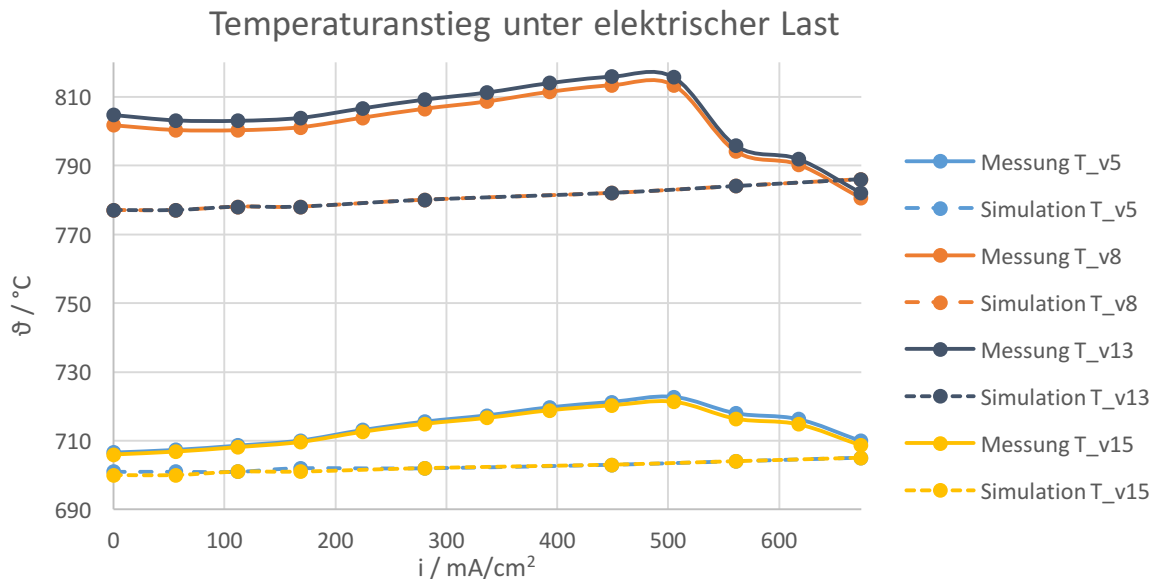


Abbildung 4-36: Temperaturen in Abhängigkeit des Stroms

Das Temperaturniveau der Messungen ist allgemein leicht höher, da die Heizelemente mit  $18 \text{ V}$  statt  $15 \text{ V}$  Versorgungsspannung betrieben wurden. Der direkte Vergleich veranschaulicht, dass die Simulation den Temperaturgradienten zu schwach abbildet. Im Bereich von  $150 \text{ mA/cm}^2$  bis  $500 \text{ mA/cm}^2$ , wo die Messung einen relativ konstanten Temperaturanstieg verzeichnet, steigen die Temperaturen von  $T_{v5}$  und  $T_{v15}$  um  $11 \text{ °C}$ , während die Simulation hier eine Differenz von lediglich  $1,5 \text{ °C}$  berechnet. Für  $T_{v8}$  und  $T_{v13}$  werden Differenzen von nur ca.  $4 \text{ °C}$  ausgegeben, während die Messung einen Temperaturanstieg von ca.  $12 \text{ °C}$  ergibt.

### 4.2.3 Spannung-Strom-Kurve

Die Spannung-Strom-Kurve, in weiterer Folge U-I-Kurve genannt, wurde für Fall 1 aus Kapitel 4.2.1 simuliert, d.h. unter Wärmezufuhr durch alle vier Heizelemente. FIRE<sup>®</sup> kann die U-I-Kurve nicht automatisch berechnen; sie muss aus einzelnen Betriebspunkten erstellt werden. Zu diesem Zweck wurden Simulationen mit den Stromstärken  $0 \text{ A}$ ,  $1 \text{ A}$ ,  $2 \text{ A}$ ,  $3 \text{ A}$ ,  $5 \text{ A}$ ,  $8 \text{ A}$ ,  $10 \text{ A}$  und  $12 \text{ A}$  gerechnet. Der Bereich zwischen  $0 \text{ A}$  und  $3 \text{ A}$  wurde feiner aufgelöst, um den durch die Aktivierungspolarisation  $\eta_{Act}$  verursachten, charakteristischen Spannungsabfall genauer verfolgen zu können. Die angegebenen Stromstärken beziehen sich auf nur eins der vier Segmente, in Summe wird der Zelle jeweils der vierfache Strom entzogen. Um Missverständnissen vorzubeugen, wird in weiterer Folge statt der Stromstärke die Stromdichte verwendet. Dazu werden die oben genannten Stromstärken auf die Fläche einer Kathode bezogen. Eine Kathode misst  $40,5 \text{ mm} \times 44 \text{ mm}$  und hat somit eine Fläche von  $17,82 \text{ cm}^2$ . Die Kathodenfläche wird deshalb als Bezug gewählt, weil die Kathoden in Summe eine kleinere

Fläche als die Anode haben. Tabelle 19 zeigt die Umrechnung von Stromstärke  $I$  in Stromdichte  $i$ .

Tabelle 19: Umrechnung Stromstärke in Stromdichte

$I$ in A	$i$ in mA/cm <sup>2</sup>
0	0,000
1	56,117
2	112,233
3	168,350
4	224,467
5	280,584
6	336,700
7	392,817
8	448,934
9	505,051
10	561,167
11	617,284
12	673,401

Tabelle 26 im Anhang bietet eine Gegenüberstellung der am Prüfstand gemessenen und der simulierten Zellspannungen. Wie schon erwähnt wurden nicht für alle ganzzahligen Stromstärken Simulationen durchgeführt, die entsprechenden Felder sind daher leer.

In Abbildung 4-37 und Abbildung 4-38 sind die resultierenden U-i-Kurven in blau für die Messwerte und orange für die berechneten Werte dargestellt. Zwecks Übersichtlichkeit wurden die U-i-Kurven der Segmente 1 und 2 nahe der Ofentür sowie der Segmente 3 und 4 nahe der Ofenrückwand in separate Abbildungen aufgeteilt.

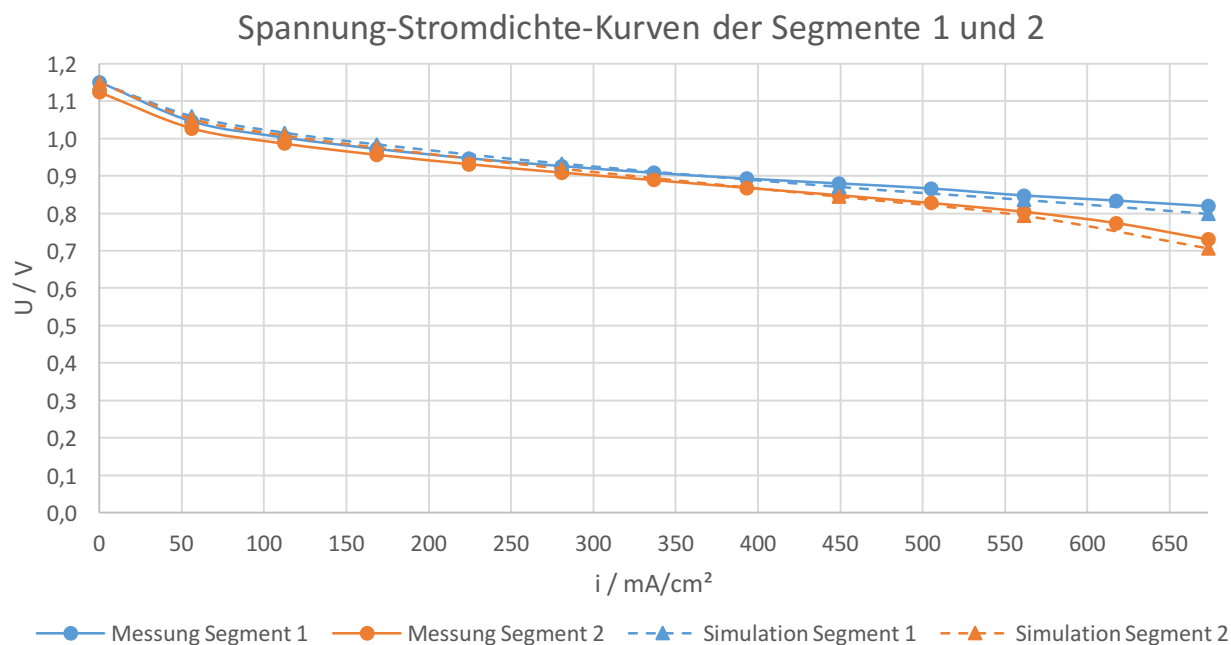


Abbildung 4-37: Spannung-Stromdichte-Kurve der Segmente 1 und 2

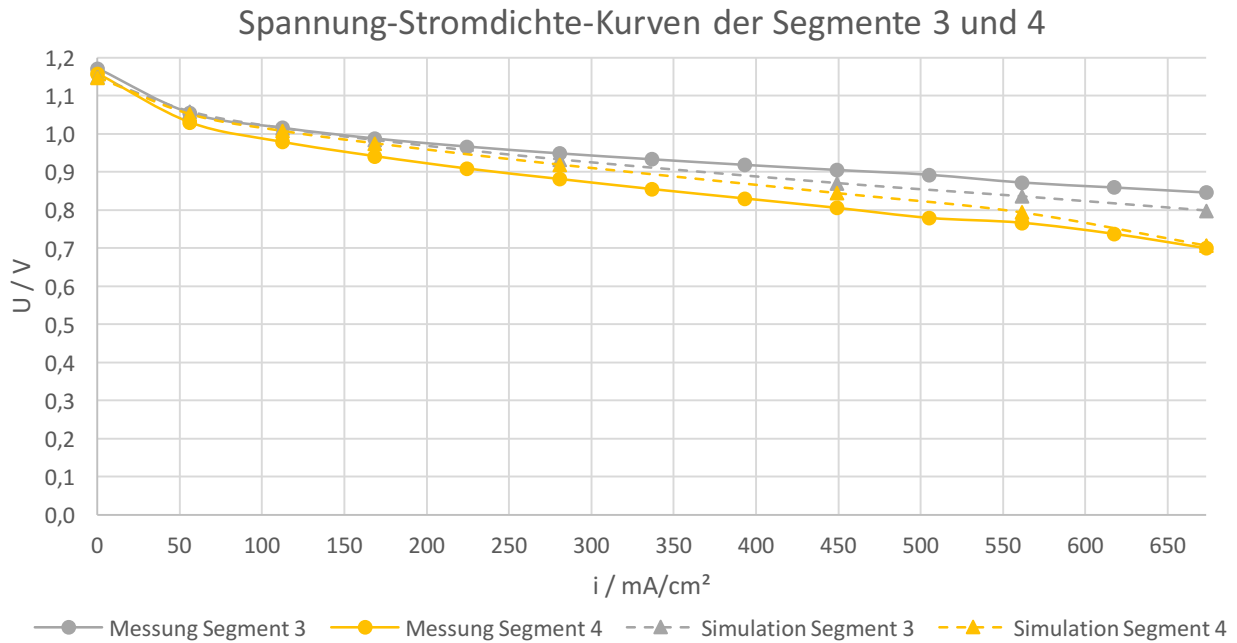


Abbildung 4-38: Spannung-Stromdichte-Kurve der Segmente 3 und 4

Hier zeigt sich ein drastischer Unterschied zwischen Messung und Simulation: Die Zellspannungen der Segmente 1 und 3 (nahe dem Gaseingang) sowie 2 und 4 (nahe dem Gasausgang) sind in der Simulation aufgrund der Symmetrie so gut wie identisch, daher sind auch die orangenen Kurven in Abbildung 4-37 und Abbildung 4-38 deckungsgleich. Sie unterscheiden sich erst im Zehntel-Millivolt-Bereich. Bei den Messungen ist dies nicht der Fall. Segment 3, welches näher an der Ofenrückwand liegt, weist eine höhere Zellspannung als Segment 1 nahe der Ofentür auf, während Segment 2, nahe der Ofentür, eine höhere Zellspannung hat als Segment 4 nahe der Ofenrückwand. Im hinteren Teil des Ofens nahe der Rückwand wurden um etwa 30 °C höhere Temperaturen gemessen als nahe der Ofentür; die umgekehrten Spannungsdifferenzen schließen jedoch die Temperaturdifferenzen als Ursache aus.

Die Spannungsdifferenz zwischen den Segmenten 3 und 4 nahe der Ofenrückwand beträgt bis zum Dreifachen der Spannungsdifferenz zwischen den Segmenten 1 und 2 nahe der Ofentür.

Die simulierte Spannungsdifferenz zwischen den Segmenten 1/3 und 2/4 folgt in etwa den Messwerten der Segmente 1 und 2. Bis zu einer Stromdichte von ungefähr 350 mA/cm<sup>2</sup> sind die berechneten Spannungen geringfügig zu hoch, bei höheren Stromdichten fallen sie dagegen etwas schneller ab als die Messwerte. Die starke Spreizung zwischen den gemessenen U-i-Kurven der Segmente 3 und 4 konnte in der Simulation nicht erreicht werden.

Nun sollen die Zellspannungen noch in Abhängigkeit der Brennstoffausnutzung  $U_f$  (siehe Kapitel 2.2.6) dargestellt werden. Dazu wurden für jede Stromstärke/-dichte die Molanteile  $v_{H_2}$  von Wasserstoff am Outlet sowie der Gesamtdruck  $p$  an Inlet und Outlet der Brenngaskanäle aus der Simulation ausgelesen. Der konstante Molanteil  $v_{H_2}$  am Inlet entspricht der Inlet-Randbedingung.

Es gelten folgende Zusammenhänge für Molanteile und Partialdrücke: [57]

$$v_i = \frac{n_i}{n_{gesamt}} = \frac{p_i}{p_{gesamt}} \text{ bzw. } p_i = v_i \cdot p_{gesamt} \quad (4-67)$$

Damit kann für jede Stromdichte der Partialdruck  $p_{H_2}$  berechnet werden.  $U_f$  lässt sich dann nach Gleichung (2-54) berechnen. Sämtliche Werte finden sich in Tabelle 27 im Anhang.

Abbildung 4-39 zeigt die Zellspannung in Abhängigkeit der berechneten Brennstoffausnutzung  $U_f$  sowie der Sauerstoffausnutzung. Der Verlauf der Kurve unterscheidet sich nicht von jenem der U-I-Kurve in Abbildung 4-37 und Abbildung 4-38, was im Anschluss anhand von Abbildung 4-40 erklärt wird.

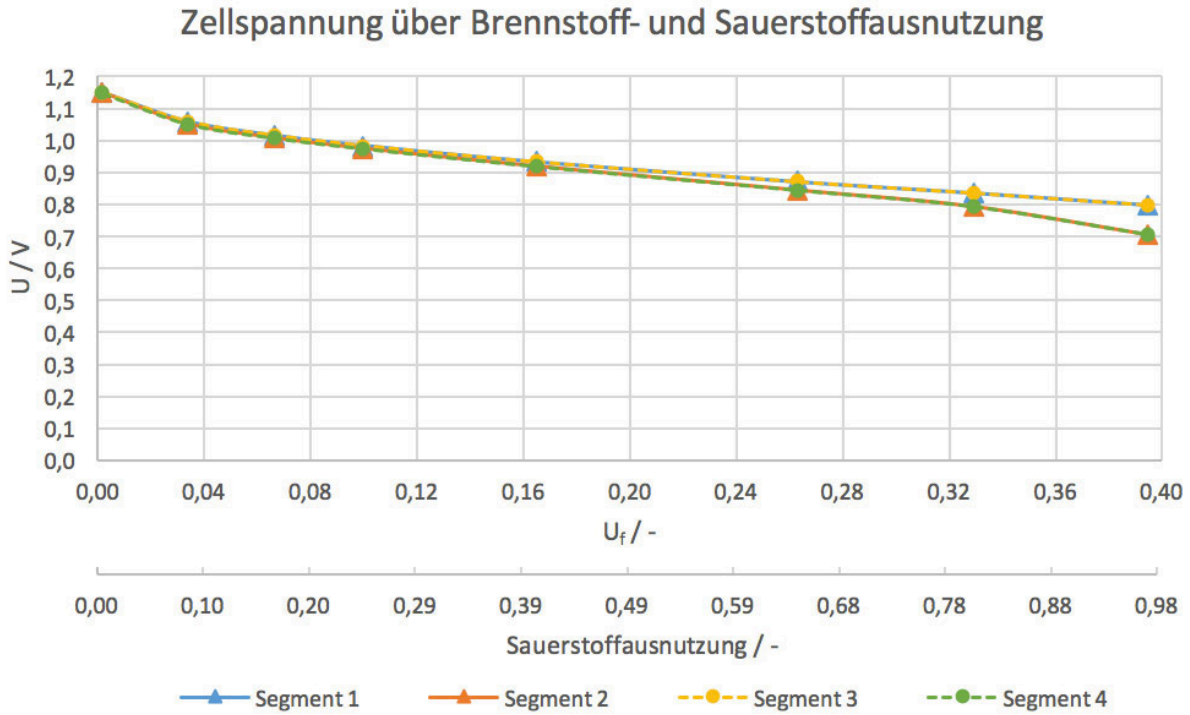


Abbildung 4-39: Zellspannung über Brennstoff- und Sauerstoffausnutzung

Nach Gleichung (2-56) ist die Stromstärke direkt proportional zum Elektronenstrom, der wiederum von der Anzahl der reagierenden und damit verbrauchten  $H_2$ -Moleküle (und auch  $O_2$ -Moleküle) abhängt. Demzufolge besteht ein linearer Zusammenhang zwischen der Stromstärke/-dichte und der Brennstoffausnutzung (sowie zwischen der Stromstärke/-dichte und der Sauerstoffausnutzung), weshalb die Potenzialkurven identisch aussehen, wenn sie über der Stromdichte oder der Brennstoffausnutzung aufgetragen werden. Abbildung 4-40 zeigt diesen linearen Zusammenhang.

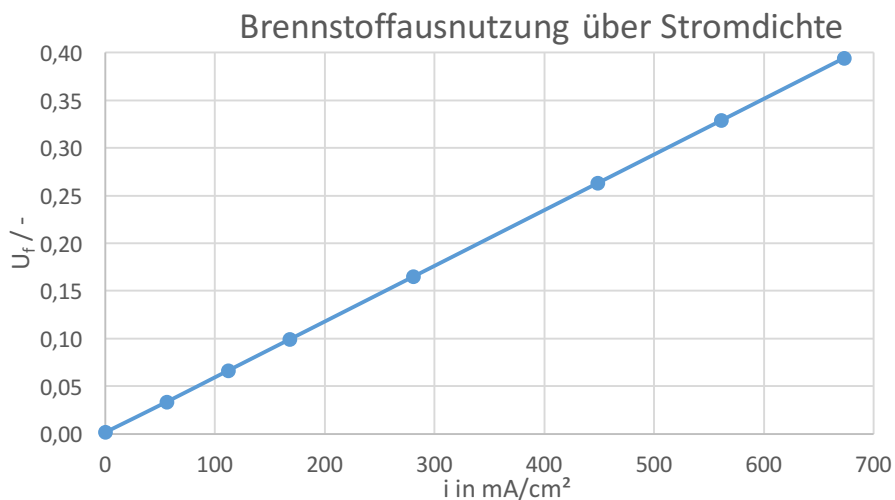


Abbildung 4-40: Brennstoffausnutzung über Stromdichte

Nach Gleichung (4-46) berechnet sich die elektrische Leistung als Produkt von Spannung und Stromstärke. Abbildung 4-41 und Abbildung 4-42 zeigen einen Vergleich zwischen den elektrischen Leistungen, die aus den Messdaten berechnet wurden, und jenen basierend auf Simulationsdaten. Aufgrund der Symmetrie des Modells sind die Kurven der aus den Simulationsdaten berechneten Leistungen der Segmente 1 und 3 sowie der Segmente 2 und 4 beinahe deckungsgleich.

Da die Stromstärken je Segment auch im Versuch beinahe identisch waren, muss sich das gleiche Resultat wie bei den Potenzialen/Spannungen einstellen. Die Leistungen von Segment 1 und 2 werden relativ gut getroffen; deutliche Abweichungen werden erst oberhalb einer Stromdichte von 500 mA/cm<sup>2</sup> erkennbar.

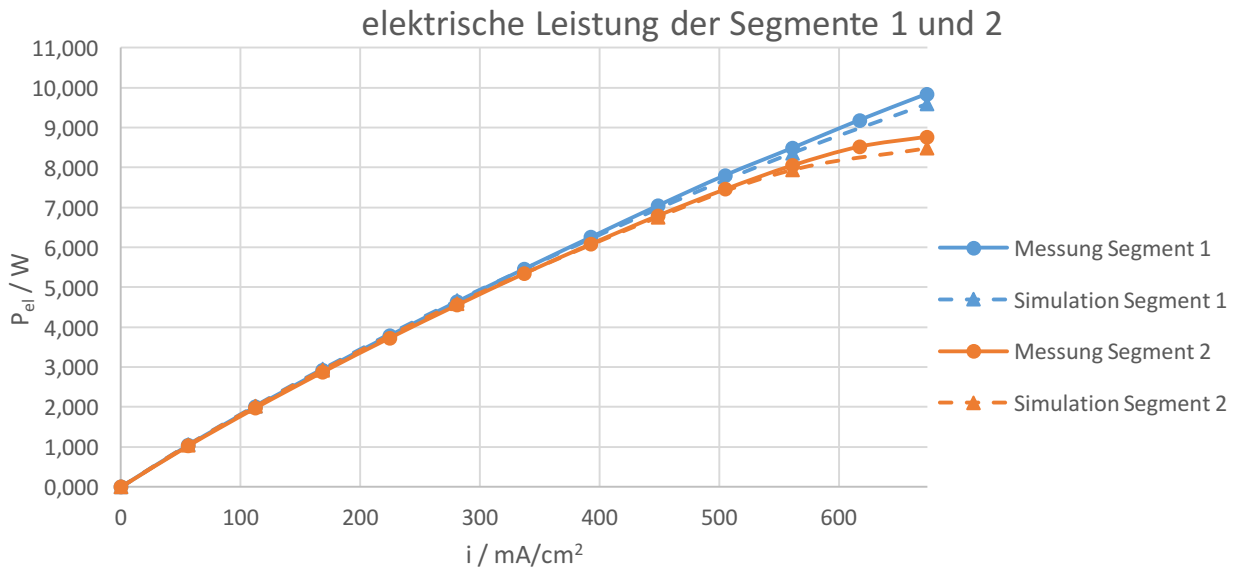


Abbildung 4-41: elektrische Leistung der Segmente 1 und 2

Genau wie bei den Potenzialen treten auch bei den Leistungen der Segmente 3 und 4 größere Diskrepanzen zwischen Messung und Simulation auf. Segment 3, welches im Versuch ein höheres Kathodenpotenzial als in der Simulation hatte, weist naturgemäß auch eine höhere gemessene als berechnete Leistung auf. Der umgekehrte Fall gilt für Segment 4.

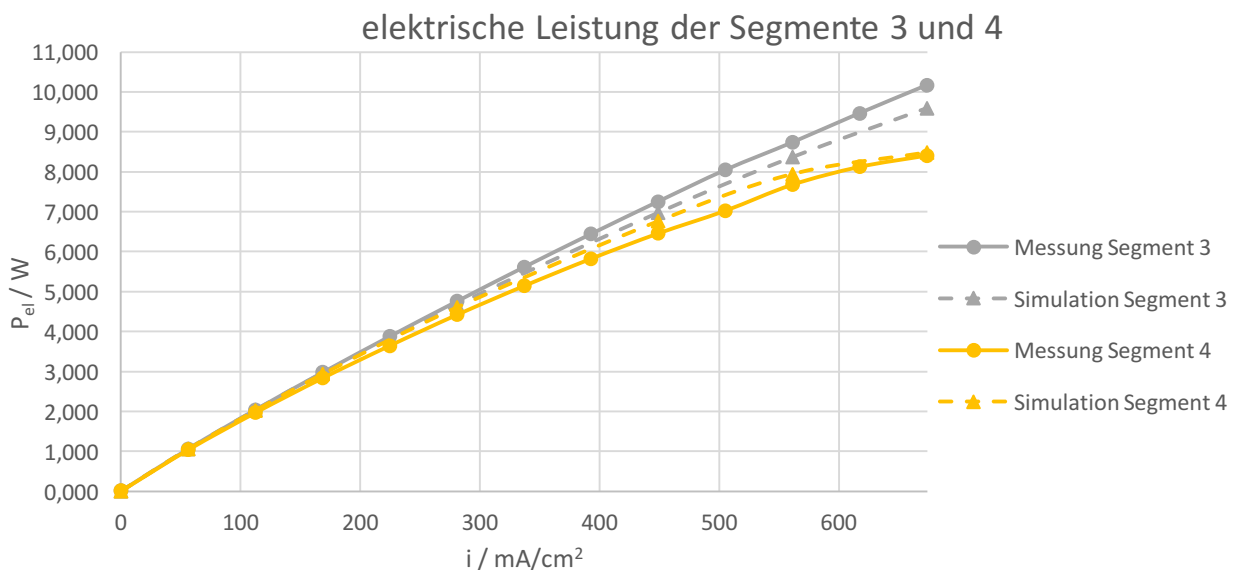


Abbildung 4-42: elektrische Leistung der Segmente 3 und 4

Die Abbildung 4-41 und Abbildung 4-42 zugrunde liegenden Werte sind im Anhang in Tabelle 28 aufgelistet.

Die folgenden Grafiken Abbildung 4-43 bis Abbildung 4-50 zeigen für jeden gerechneten Betriebspunkt eine Gegenüberstellung von Potenzialverteilung über die Kathoden, Verteilung des Sauerstoff-Molanteils in den Goldnetzen, Verteilung von Wasserstoff- und Wasser-Molanteilen in den Nickelnetzen und Temperaturverteilungen in den Kathoden und der Anode.

Für die Betrachtung der Molanteile wurden die Kontaktierungsnetze gewählt, da hier die noch unverfälschte Gaszusammensetzung vorliegt, bevor sie der jeweiligen Kathode zugeführt wird.

Die Skalierung der Kathodenpotenziale wurde für jeden Betriebspunkt einzeln so gewählt, dass das geringste in den Kathoden auftretende Potenzial den unteren und das höchste auftretende Potenzial den oberen Grenzwert der Skala bildet. Dadurch werden die innerhalb der Kathoden auftretenden Potenzialdifferenzen sichtbar.

Ohne elektrische Last tritt in jeder Kathode das höchste Potenzial dort auf, wo die niedrigsten Temperaturen herrschen, also in den äußeren Eckpunkten. Sobald eine elektrische Last angelegt wird, kehrt sich dieses Bild um und die höchsten Potenziale finden sich in den Eckpunkten im Zentrum. Dies ist wahrscheinlich mit der mittigen Anordnung der Gaszufuhr zu begründen, welche die mittleren Flowfieldkanäle besser mit Gas versorgt.

Bis zum fünften Betriebspunkt bei einer Stromdichte von  $281 \text{ mA/cm}^2$  steigt auf allen vier Kathoden die Inhomogenität der Potenzialverteilung bzw. die Potenzialdifferenz zwischen Zentrum und äußeren Ecken. Von dieser Stromdichte aufwärts wird die Potenzialverteilung auf den gaseingangsseitigen Kathoden wieder homogener, während die Potenzialdifferenz auf den gasausgangsseitigen Kathoden weiter zunimmt.

Die jeweiligen Skalen der Molanteile von Sauerstoff, Wasserstoff und Wasser wurden für alle Betriebspunkte einheitlich gewählt. Die höchsten Sauerstoff- und Wasserstoff-Molanteile treten logischerweise im Betriebspunkt ohne elektrische Last auf, da hier weder Sauerstoff noch Wasserstoff verbraucht wird. Die Molanteile bleiben hier über den gesamten betrachteten Bereich konstant und entsprechen den Randbedingungen am jeweiligen Inlet. Gleichzeitig findet sich hier der geringste Wasser-Molanteil von 0,7 Mol-%, der ebenfalls der Randbedingung am Brenngaseinlass entspricht, da hier kein zusätzlicher Wasserdampf gebildet wird.

Bei einer Steigerung der Stromdichte sinken nach dem zuvor gezeigten linearen Zusammenhang die Molanteile von Sauerstoff und Wasserstoff, während der Wasser-Molanteil kontinuierlich zunimmt. Die Grafiken zeigen nun zwei Effekte, die sich überlagern. Erstens nehmen natürlich die  $\text{H}_2$ - und  $\text{O}_2$ -Molanteile aufgrund des Verbrauchs über die Länge der Flowfields kontinuierlich ab, während der  $\text{H}_2\text{O}$ -Molanteil steigt. Zweitens zeigen die gleichmäßig verteilten Streifen die Einflüsse der Flowfields. Dort, wo direkt darunter ein Flowfield-Kanal liegt, nehmen die  $\text{H}_2$ - und  $\text{O}_2$ -Molanteile über die Länge der Flowfields langsamer ab, da eine gute Versorgung mit frischem Gas gewährleistet ist. Der  $\text{H}_2\text{O}$ -Molanteil ist hier niedriger, da die Strömung den produzierten Wasserdampf schnell abtransportiert. Die Bereiche hingegen, die direkt über den Stegen zwischen den Flowfieldkanälen liegen, werden schlechter mit frischem Gas versorgt. Deshalb sinken dort die  $\text{H}_2$ - und  $\text{O}_2$ -Molanteile schneller und der  $\text{H}_2\text{O}$ -Molanteil steigt, weil sich hier durch die geringere Strömung der Wasserdampf aufstaut. Es ist fraglich, ob dieser Effekt in der Realität auch so stark ausgeprägt ist, oder die Modellierung der Netze als poröse Körper diesen Einfluss intensiviert.

Bei der höchsten vorgegebenen Stromdichte von  $673 \text{ mA/cm}^2$  werden der niedrigste  $\text{H}_2$ -Molanteil von 0,31 und der niedrigste  $\text{O}_2$ -Molanteil von 0,0014 am Ende der Flowfields erreicht. Anhand dieser Werte lässt sich feststellen, dass zwar immer noch genügend Wasserstoff für einen Betrieb der SOFC vorhanden, der Sauerstoff jedoch beinahe aufgebraucht ist und somit unter den vorliegenden Randbedingungen den limitierenden Faktor für die Leistung der SOFC darstellt. Für zukünftige Laborversuche ist daher anzuraten, den Luftmassenstrom zu erhöhen.

Die Temperaturskalen für Anode und Kathoden sind identisch und für alle Betriebspunkte konstant gewählt. Die niedrigste Temperatur der Elektroden tritt mit  $688,5 \text{ °C}$  in den Ecken der Anode im Fall ohne elektrische Last auf; die höchste Temperatur von  $783,17 \text{ °C}$  herrscht im Zentrum der Anode bei der höchsten Stromdichte von  $673 \text{ mA/cm}^2$ . Da die Wärmezufuhr anodenseitig erfolgt und aufgrund der schlechten Wärmeleitfähigkeit der Zellkomponenten liegen die Temperaturen in den Kathoden ungefähr  $5 \text{ °C}$  unter den Anodentemperaturen.



Stromdichte  $i = 0 \text{ mA/cm}^2$   
 (alle 4 Heizelemente:  $U = 15 \text{ V}$ )

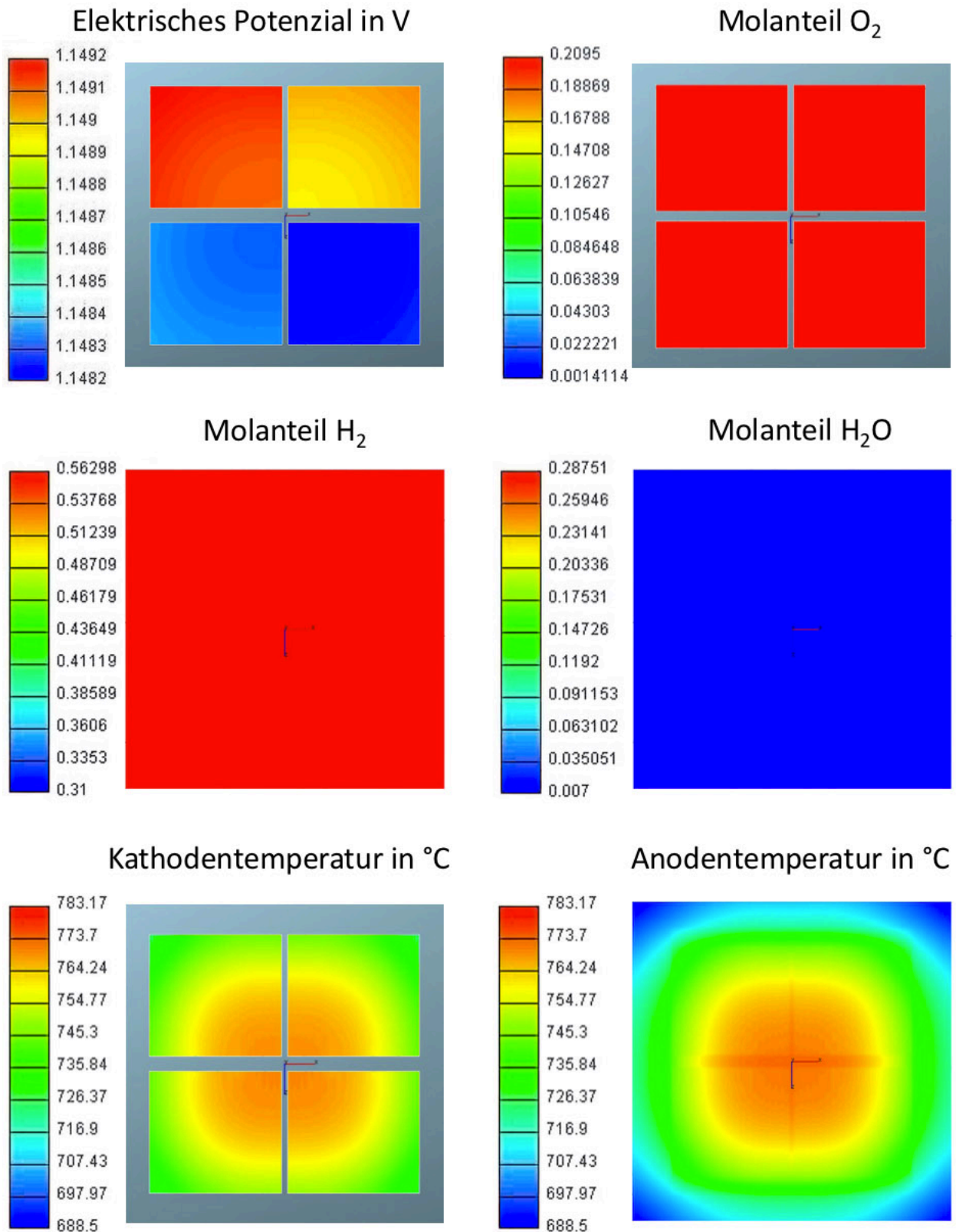


Abbildung 4-43: Gegenüberstellung physikalischer Größen bei  $0 \text{ mA/cm}^2$

Stromdichte  $i = 56 \text{ mA/cm}^2$   
 (alle 4 Heizelemente:  $U = 15 \text{ V}$ )

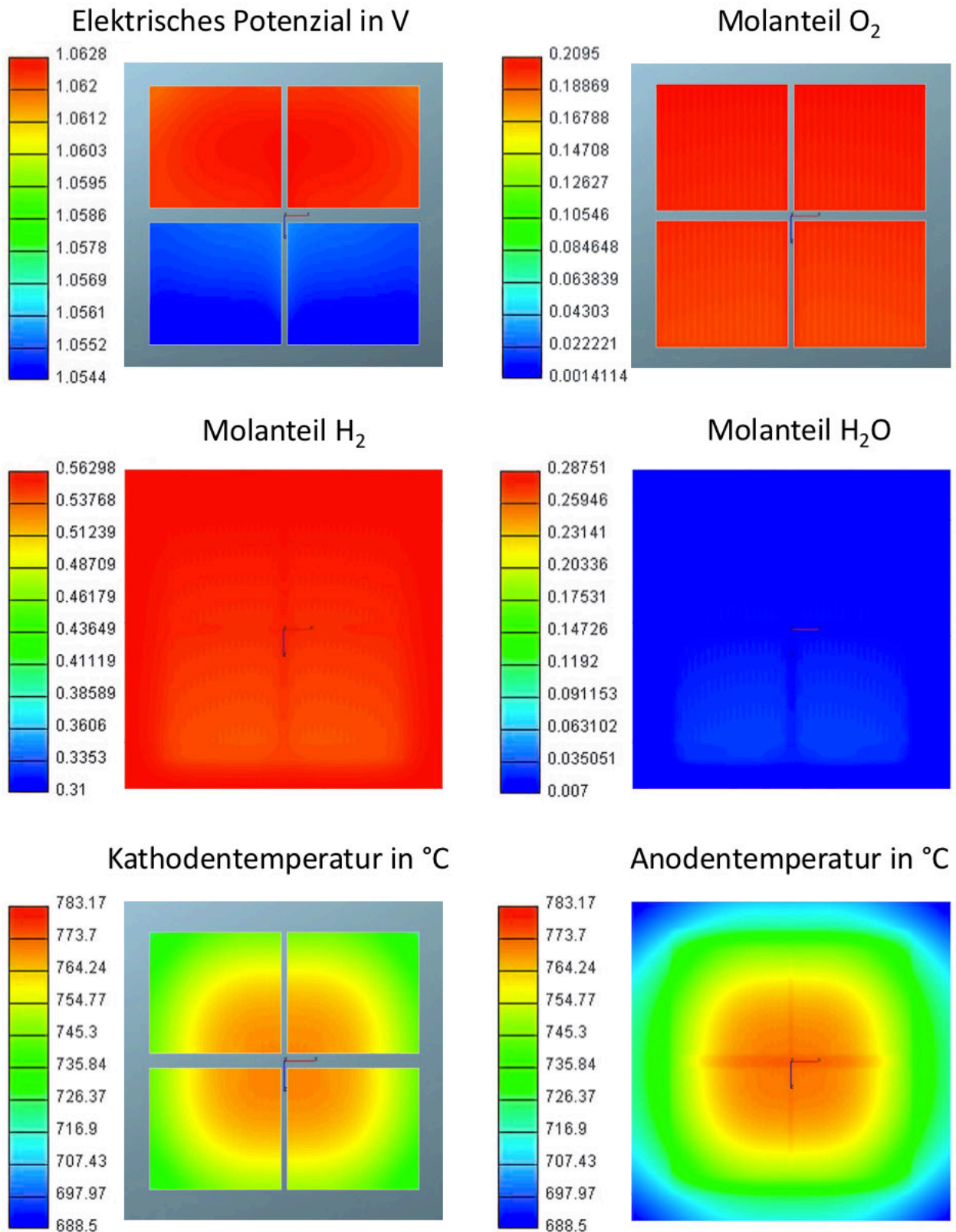


Abbildung 4-44: Gegenüberstellung physikalischer Größen bei  $56 \text{ mA/cm}^2$

Stromdichte  $i = 112 \text{ mA/cm}^2$   
 (alle 4 Heizelemente:  $U = 15 \text{ V}$ )

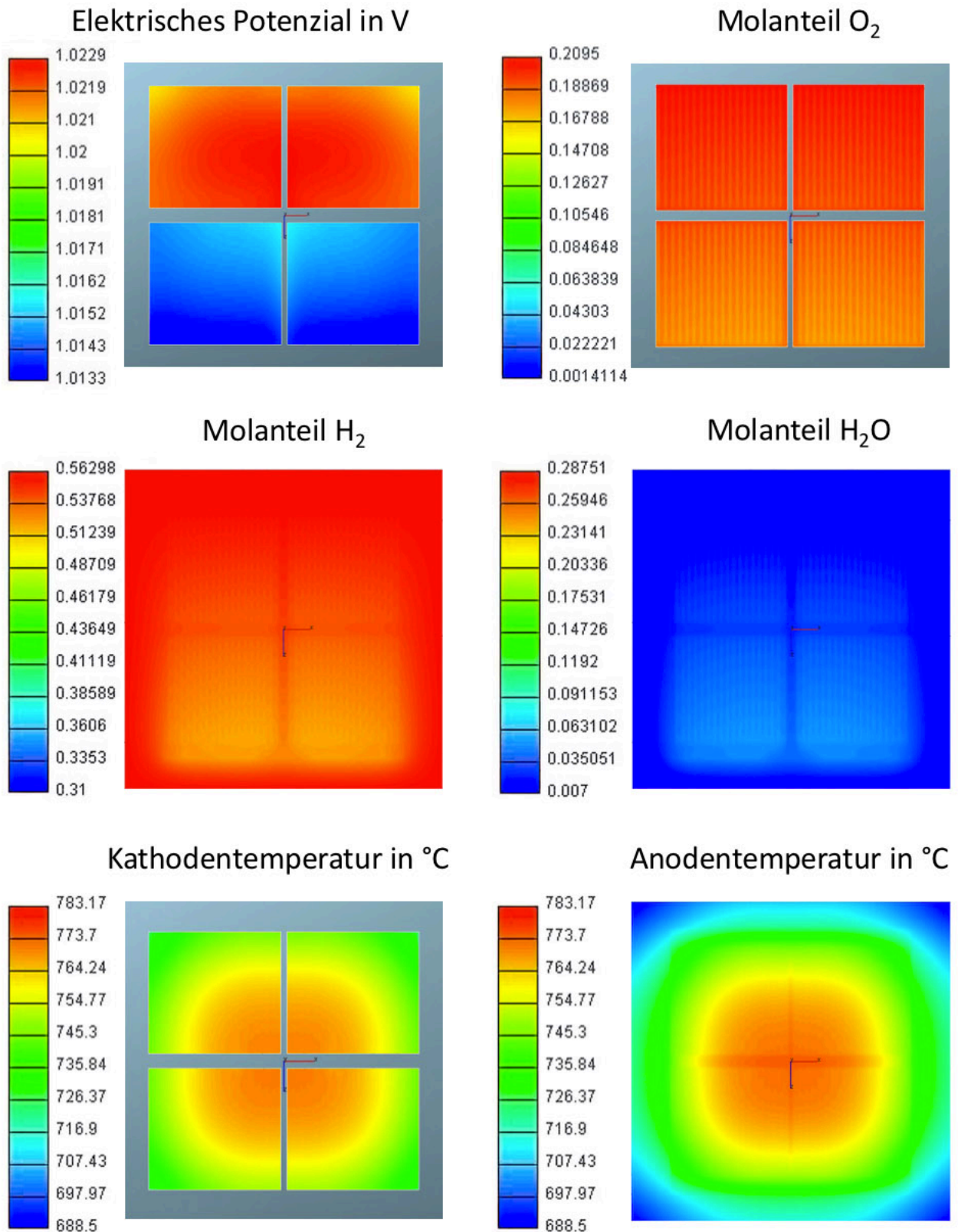


Abbildung 4-45: Gegenüberstellung physikalischer Größen bei  $112 \text{ mA/cm}^2$

Stromdichte  $i = 168 \text{ mA/cm}^2$   
 (alle 4 Heizelemente:  $U = 15 \text{ V}$ )

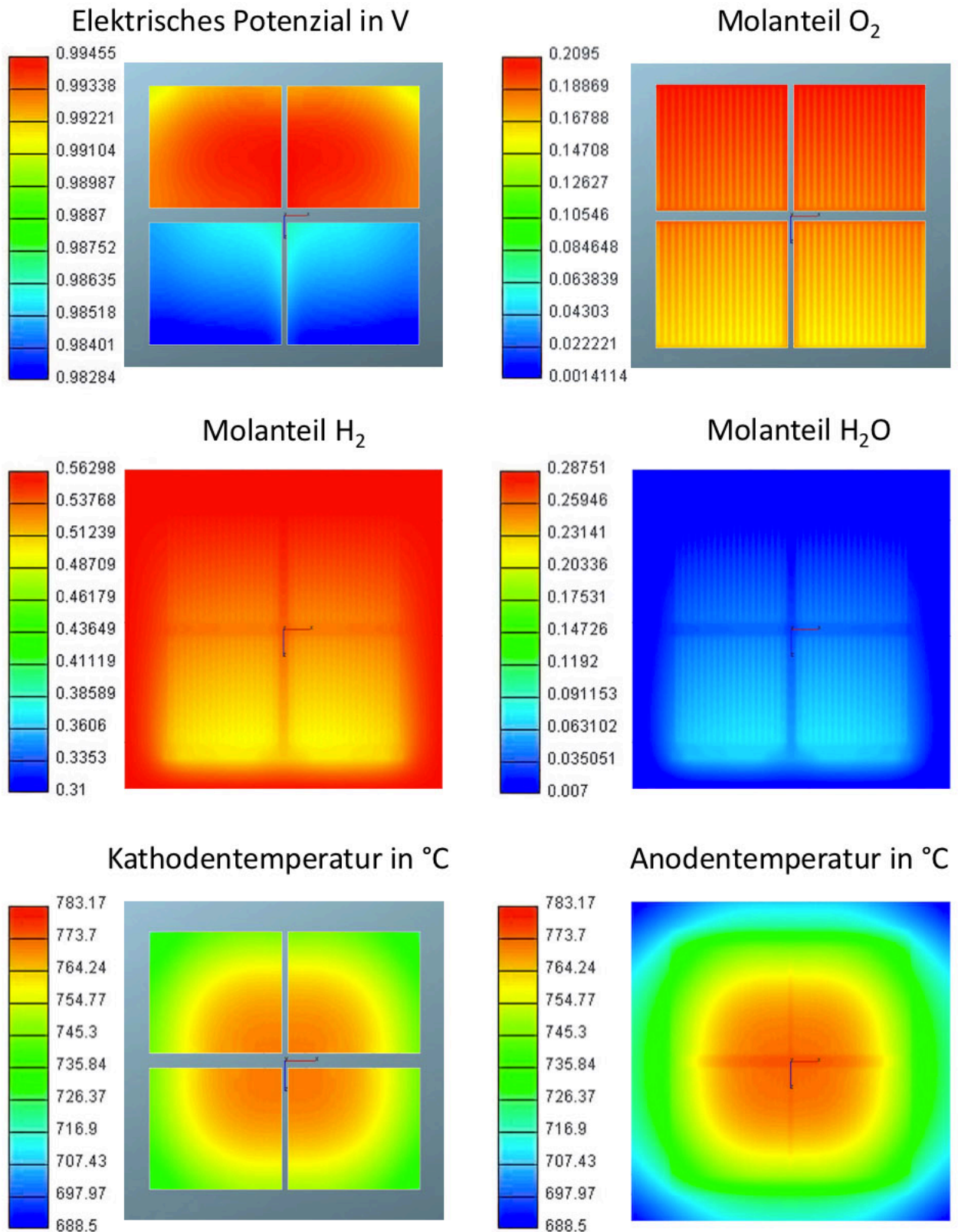


Abbildung 4-46: Gegenüberstellung physikalischer Größen bei  $168 \text{ mA/cm}^2$

Stromdichte  $i = 281 \text{ mA/cm}^2$   
 (alle 4 Heizelemente:  $U = 15 \text{ V}$ )

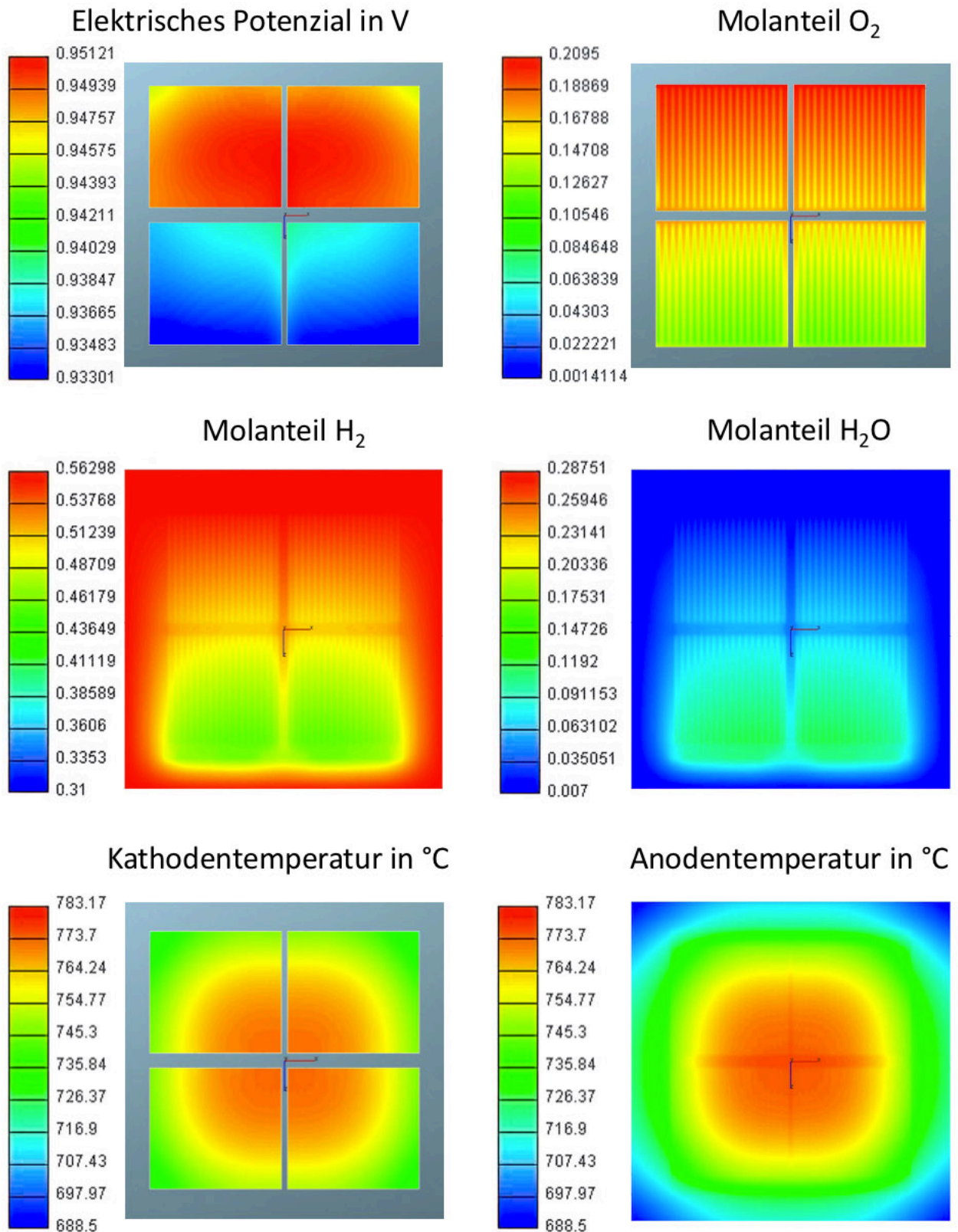


Abbildung 4-47: Gegenüberstellung physikalischer Größen bei  $281 \text{ mA/cm}^2$

Stromdichte  $i = 449 \text{ mA/cm}^2$   
 (alle 4 Heizelemente:  $U = 15 \text{ V}$ )

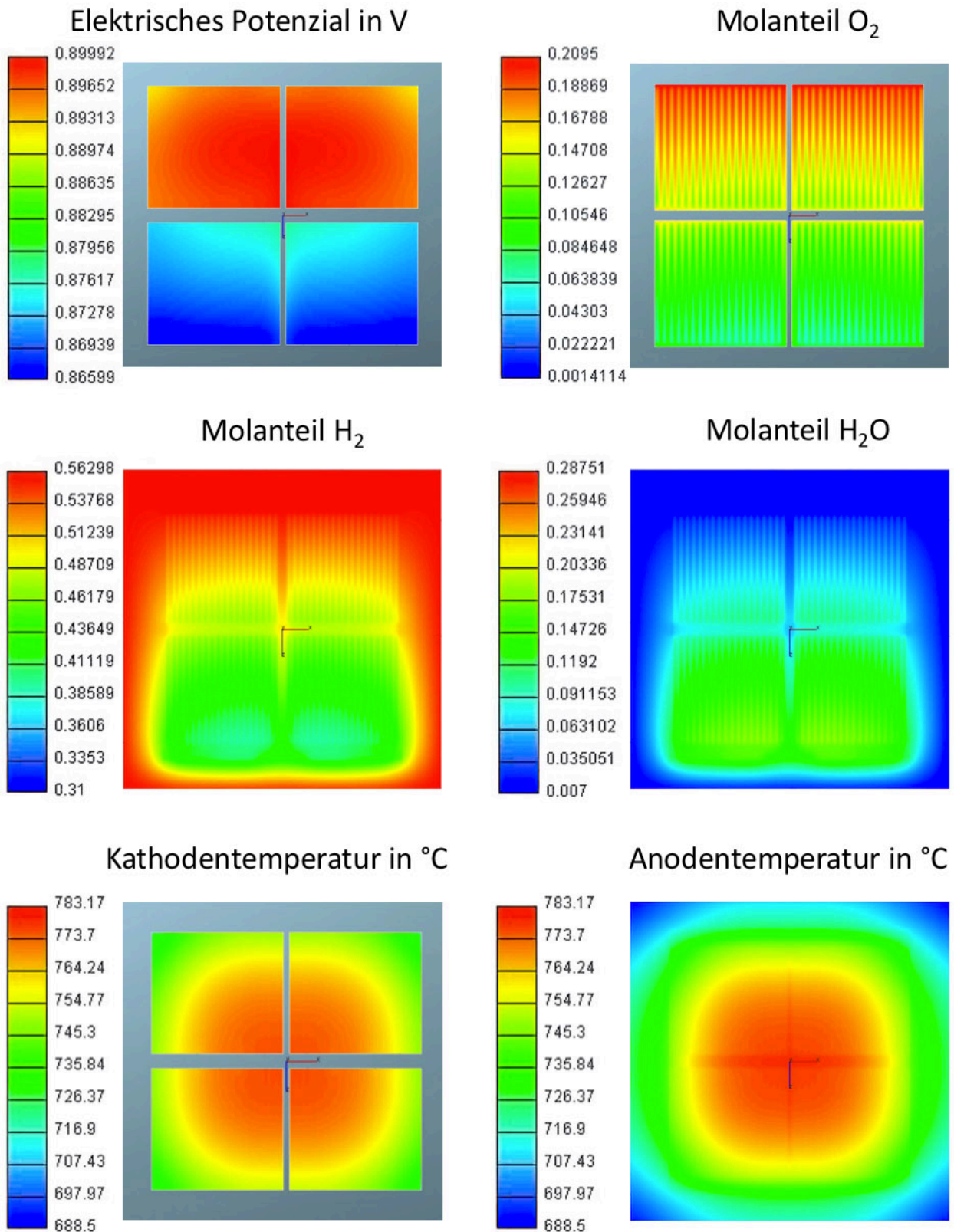


Abbildung 4-48: Gegenüberstellung physikalischer Größen bei  $449 \text{ mA/cm}^2$

Stromdichte  $i = 561 \text{ mA/cm}^2$   
 (alle 4 Heizelemente:  $U = 15 \text{ V}$ )

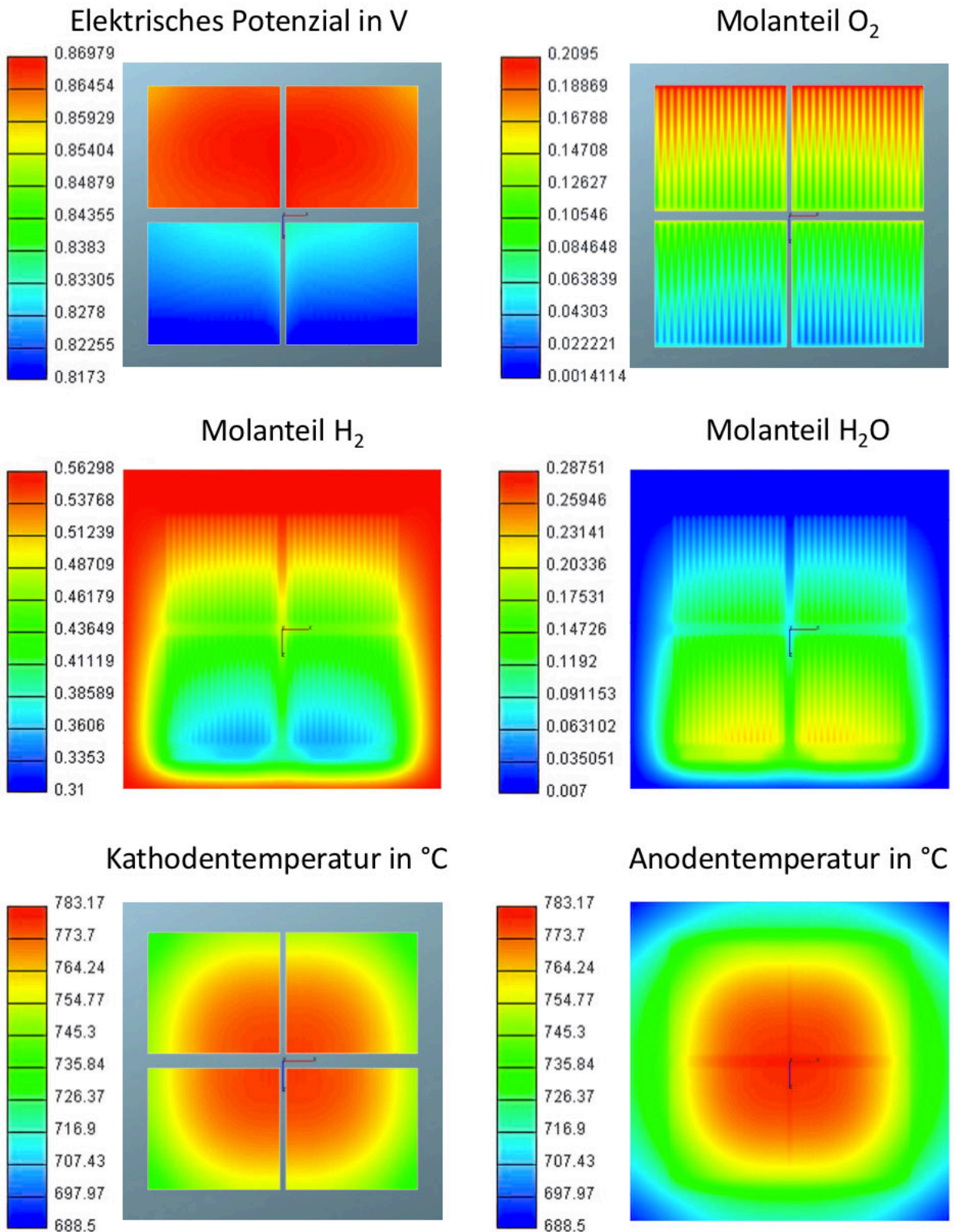


Abbildung 4-49: Gegenüberstellung physikalischer Größen bei  $561 \text{ mA/cm}^2$

Stromdichte  $i = 673 \text{ mA/cm}^2$   
 (alle 4 Heizelemente:  $U = 15 \text{ V}$ )

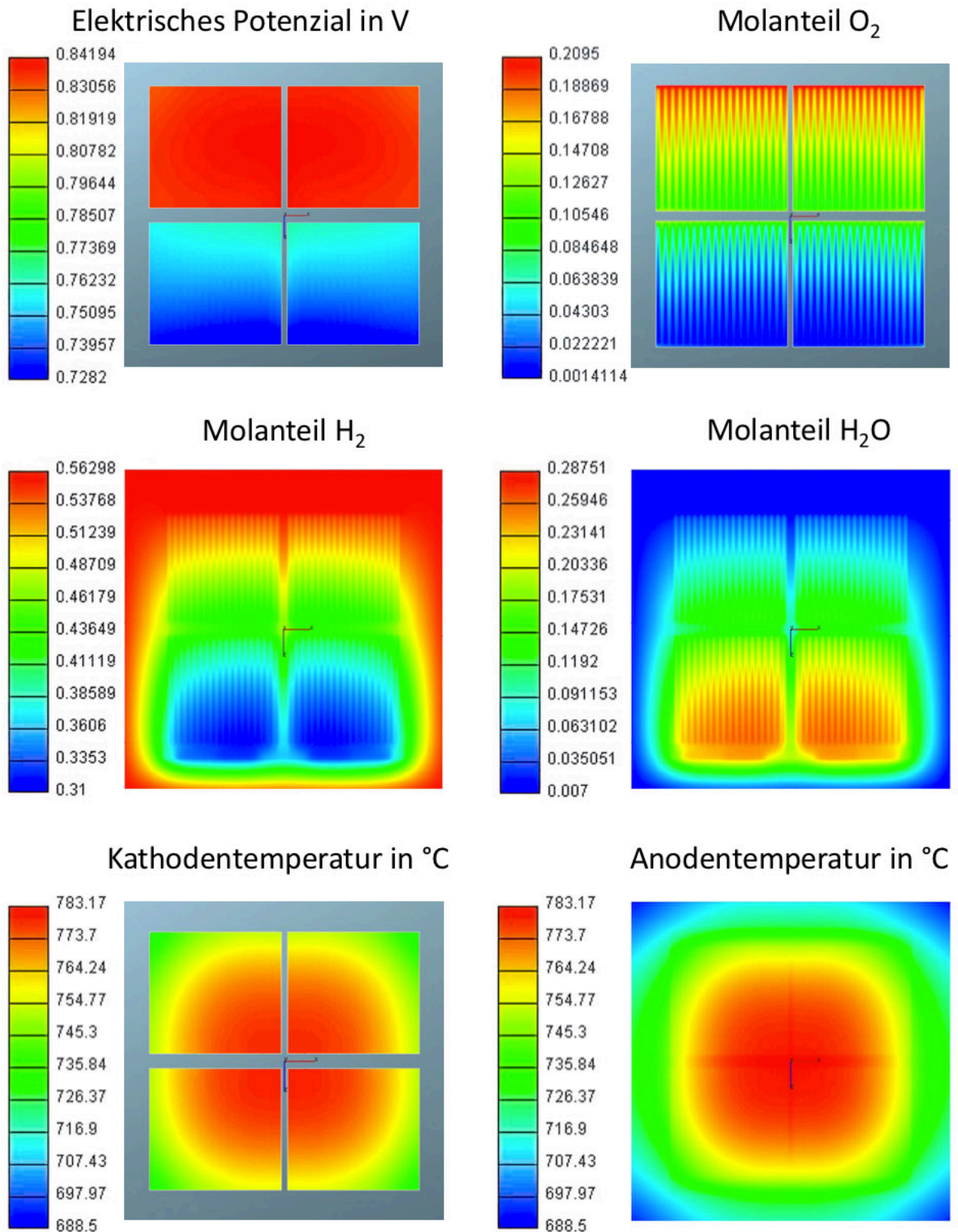


Abbildung 4-50: Gegenüberstellung physikalischer Größen bei  $673 \text{ mA/cm}^2$



Die Anzahl an benötigten Iterationen, bis die Konvergenz der Lösung erreicht ist, steigt stetig mit der Stromdichte. Das Konvergenzkriterium, das als letztes erreicht wird, ist „Energy“ in Tabelle 16. Werden wie in Abbildung 4-51 die Iterationen über der Stromdichte aufgetragen, entsteht eine Kurve, die an eine invertierte U-I-Kennlinie erinnert. Bei einer Stromdichte von  $673 \text{ mA/cm}^2$ , also im letzten Betriebspunkt, wird die Berechnung beim vorgegebenen Maximum von 2000 Iterationen abgebrochen, bevor das Konvergenzkriterium erfüllt wird. Relativ gleichmäßige Schwankungen um einen Residuumswert knapp über dem Konvergenzkriterium über die letzten 200 Iterationen legen nahe, dass die Berechnung keine Lösung finden kann, die auch das letzte Konvergenzkriterium erfüllt.

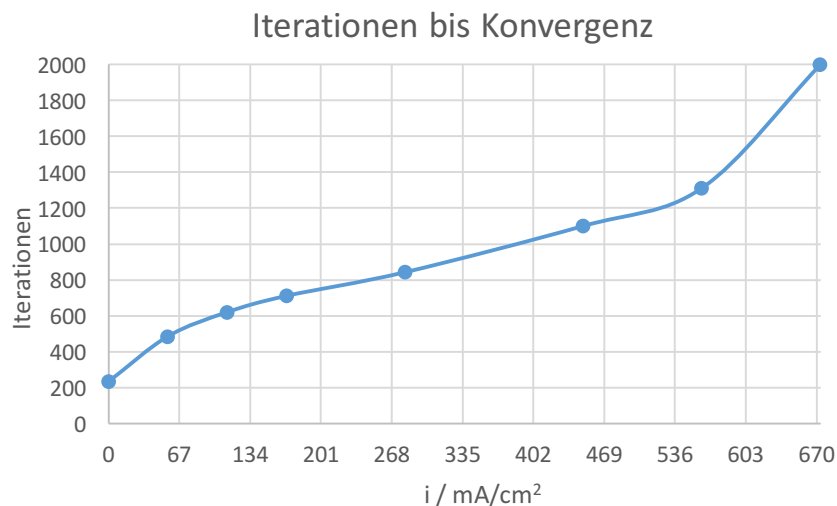


Abbildung 4-51: Iterationen bis zur Konvergenz

Die Rechenzeit je Iteration sinkt im Verlauf der Berechnung kontinuierlich und pendelt sich schließlich auf einen relativ konstanten Wert ein. Der verwendete Rechner verfügt über 64 Gigabyte Arbeitsspeicher und zwei Intel i7 Quadcore-Processoren, die zu 32 virtuellen Prozessoren vernetzt werden können. Mit dieser Leistung dauert die Berechnung der ersten Iteration ungefähr 5 Minuten und erreicht nach ungefähr 200 Iterationen einen relativ konstanten Wert von 50 bis 60 Sekunden je Iteration.

## 5 ZUSAMMENFASSUNG UND AUSBLICK

Insgesamt lässt sich feststellen, dass gute Übereinstimmungen mit den Messwerten erzielt werden konnten. Um diese Behauptung zu rechtfertigen, sollen die Bereiche Fluidmechanik, thermisches Modell und Elektrochemie separat betrachtet werden.

Die Fluidmechanik-Simulation lässt sich nicht beurteilen, da es keine Messwerte hierzu gibt. Andererseits steht sie auch nicht im Zentrum des Interesses. Wie aus Tabelle 27 im Anhang ersichtlich, beträgt die Druckdifferenz zwischen Ein- und Ausgang lediglich 126 Pa. Die Strömungsgeschwindigkeiten erreichen nicht ganz 9 m/s und wie schon gezeigt wird demzufolge keine Turbulenz auftreten. Wirklich wichtig ist hier nur die Massenerhaltung, die aber ohnehin vom Programm sichergestellt wird. Von zentraler Bedeutung ist, dass die Massenströme, die an den Gas-Inlets vorgegeben werden, die Elektroden erreichen.

Die Genauigkeit des thermischen Modells ist angesichts von Temperaturen von 600 °C bis über 800 °C akzeptabel. Die Abweichungen der vier Temperaturprofile von den Messwerten liegen in einem Bereich von -27 K bis +23 K, also unter  $\pm 4$  % der Temperaturen. Generell lässt sich die Tendenz feststellen, dass die Genauigkeit des Modells an jenen Stellen schlechter ist, wo die Temperaturverteilungen sehr inhomogen sind, also starke Temperaturgradienten auftreten.

Es gibt zahlreiche Ansatzpunkte zur Optimierung. Während das Materialmodell relativ ausgereift sein dürfte, wurden bei den Randbedingungen viele Annahmen getroffen. Eine einfache Möglichkeit zur Verbesserung ist die Erweiterung des Netzgitters um den in Abbildung 3-1 gezeigten Stahlsockel sowie die in Abbildung 3-10 und Abbildung 3-11 gezeigten Zusatzgewichte. Dadurch könnten die Wärmeverluste durch Wärmeleitung realistischer abgebildet werden. Die zusätzlichen Zellen würden sich natürlich negativ auf die Rechenzeit auswirken. Ein Kompromiss wäre daher, diese Erweiterung des Modells nur dazu zu nutzen, um die Randbedingungen im bestehenden Modell zu evaluieren und gegebenenfalls anzupassen.

Ob es Sinn macht, die im Versuch vorliegende 30 K-Differenz der Ofentemperatur zwischen Ofenrückwand und Ofentür zu berücksichtigen, bleibt fraglich.

Die höchste Optimierungspriorität haben die vier Heizflächen auf der Unterseite der Crofer-Platte. Die Wärmestromdichte ist mehr oder weniger eine Annahme, die in Abhängigkeit der anderen Randbedingungen so lange iterativ angepasst wurde, bis die gewünschten Temperaturspitzen erreicht wurden. Die nachfolgende Diplomarbeit setzt daran an, den Stahlsockel, die Heizelemente, den Luftspalt zwischen Heizelementen und Crofer-Platte sowie die keramischen Bauteile ins Netzgittermodell zu integrieren. Aufgrund der komplexen Geometrien und des vorliegenden Hexaeder-Netzgitters ist dies jedoch kein einfaches Unterfangen. Auch sind einige für die Simulation dieser Bauteile entscheidende Werte, beispielsweise die Temperaturen der Heizelemente, unbekannt.

Eine einfachere Verbesserung könnte so aussehen, dass die kreisrunden Heizflächen in mehrere konzentrische Kreise aufgeteilt werden. Die simulierten Temperaturprofile sind im Vergleich zu den gemessenen zu homogen, was wahrscheinlich daran liegt, dass über die gesamten Heizflächen konstante Wärmestromdichten vorgegeben werden. Realistischer wäre wohl eine vom Zentrum jeder Heizfläche nach außen zum Rand derselben hin abnehmende Wärmestromdichte. Die über die gesamte Heizfläche gemittelte Wärmestromdichte könnte dann niedriger ausfallen als der jetzige, ziemlich hohe Wert. Dennoch ist auch diese Vorgehensweise mit vielen Annahmen verknüpft, da schwer abzuschätzen sein wird, welchem Kreisring welche Wärmestromdichte zugewiesen werden muss.

Im Idealfall würde das Modell aus einer vorgegebenen Heizelement-Versorgungsspannung automatisch die Temperatur des Heizelements berechnen und daraus in weiterer Folge die Anteile Wärmeleitung, Strahlung und Konvektion, die schließlich die Crofer-Platte aufheizen. Ob der dafür notwendige Aufwand sinnvoll ist, kann hier nicht beantwortet werden.

Das eindeutig schlechteste Ergebnis wurde bei den Aufheizkurven aufgrund des zunehmenden Stromflusses erzielt. Die berechneten Temperaturdifferenzen betragen weniger als die Hälfte der gemessenen. Was diesen Fehler verursacht, ist jedoch unklar.

Das Ergebnis der simulierten Elektrochemie, die U-I-Kurve, korreliert sehr stark mit den Messwerten. Natürlich bildet das Modell zufolge seiner perfekten Symmetrie nicht die asymmetrischen Messdaten der zur Gasflussrichtung symmetrisch liegenden Segmente ab. Hier folgt das Modell viel stärker der Seite, die näher zur Ofentür liegt (aus Gasflussrichtung betrachtet die „rechte“ Seite). Die Spannung des weiter vom Gaseingang entfernten Segments 2 sinkt im Vergleich zur Spannung des näher liegenden Segments 1 nicht so viel schneller wie bei den Messwerten der „linken“ Seite. Es lässt sich schwer sagen, ob das gut oder schlecht ist. Genauso könnte versucht werden, den Mittelwert von linker und rechter Seite zu treffen oder der Bereich zwischen den Kurven von linker und rechter Seite wird als Toleranzbereich betrachtet, da von Versuch zu Versuch ohnehin jedesmal geringfügig andere Ergebnisse zu erwarten sind.

Falls eine Entscheidung für eine gewünschte U-I-Kurve getroffen werden kann, so könnte diese mittels eines automatischen Fittings angenähert werden. Laut FIRE<sup>®</sup>-Entwicklern kann dies angewendet werden, wenn die Spannung vorgegeben und der Strom berechnet wird, also umgekehrt wie im vorliegenden Fall.

Die Gaszusammensetzungen wurden im Laborversuch bisher nicht gemessen. Dies ist auch nur stellenweise möglich, wobei aber das abgezweigte Gas den gesamten Test geringfügig verfälscht. Hier liegt einer der großen Vorteile der Simulation. Da bei den durchgeführten Tests ausschließlich die zugeführten Gasströme gemessen wurden, war auch nicht bekannt, dass der Massenstrom an Sauerstoff bei hohen Stromdichten fast aufgebraucht wird. Somit kann die Simulation den realen Versuch unterstützen bzw. zu dessen Auslegung beitragen.

Die vorliegende Masterarbeit stellt nur einen Iterationsschritt in einer Reihe von Optimierungen dar. Wie schon öfters erwähnt, baut die beschriebene Arbeit auf der umfangreichen Vorarbeit von Fabian Rasinger auf. Durch das Vorliegen tatsächlicher Messwerte konnte nun das thermische Modell überprüft und weitgehend optimiert werden. Das neu generierte Gitternetz erlaubte auch erstmals die Implementierung der Elektrochemie. Diese zeigt bereits vielversprechende Resultate, auf denen weiter aufgebaut werden wird. Das Ziel wird schließlich die Simulation des Betriebs der segmentierten SOFC mit Kohlenwasserstoff-basierten Brennstoffen sein. Die Formeln für die Berechnung der Reformierungsreaktionen sind zwar schon im Programm hinterlegt, es wird aber nicht nur genügen, diese einfach zu aktivieren. Die korrekte Einstellung der Reaktionskinetik über z.B. Gleichgewichtsparameter stellt eine komplexe Aufgabe dar und wird ein entscheidender Faktor zum Gelingen des gesamten Projektes sein.

## ABBILDUNGSVERZEICHNIS

Abbildung 2-1: Zellkomponenten inklusive Strömungskanälen und Interconnects [6] .....	3
Abbildung 2-2: Rasterelektronenmikroskop-Aufnahme der Zellschichten [8].....	4
Abbildung 2-3: Polarisationsverluste in Abhängigkeit der Stromdichte [10].....	12
Abbildung 2-4: Veranschaulichung der Tortuosität [12] .....	18
Abbildung 2-5: Steigerung der Leistungsfähigkeit von Anodenwerkstoffen [21] .....	29
Abbildung 3-1: Stahlsockel [Quelle: AVL].....	31
Abbildung 3-2: Crofer-Grundplatte [Quelle: AVL] .....	31
Abbildung 3-3: Brennstoffzelle [Quelle: AVL] .....	31
Abbildung 3-4: Stahlrahmen [Quelle: AVL].....	31
Abbildung 3-5: Keramikrahmen [Quelle: AVL].....	32
Abbildung 3-6: Keramikstempel [Quelle: AVL] .....	32
Abbildung 3-7: Goldnetz [Quelle: AVL].....	32
Abbildung 3-8: 1 Stempel eingebaut [Quelle: AVL] .....	32
Abbildung 3-9: 4 Stempel eingebaut [Quelle: AVL] .....	32
Abbildung 3-10: Zusatzgewicht 1 [Quelle: AVL] .....	33
Abbildung 3-11: Zusatzgewicht 2 [Quelle: AVL] .....	33
Abbildung 3-12: Thermoelement-Messebene [Quelle: AVL] .....	33
Abbildung 3-13: Thermoelement-Positionen .....	34
Abbildung 3-14: Nummerierung der Thermoelemente .....	35
Abbildung 4-1: Unterteilung der Zellschichten.....	37
Abbildung 4-2: Fabian Rasingers automatisch generiertes Netzgitter [1] .....	38
Abbildung 4-3: Hexaeder-basiertes Netzgitter .....	39
Abbildung 4-4: Explosionsdarstellung des CFD-Gittermodells .....	39
Abbildung 4-5: Cell-Selections, gaseingangsseitige Ansicht.....	40
Abbildung 4-6: Cell-Selections, gasausgangsseitige Ansicht.....	40
Abbildung 4-7: Gasdurchströmte Volumina .....	41
Abbildung 4-8: Interconnect-Cell-Selections .....	41
Abbildung 4-9: Face-Selections, gaseingangsseitige Ansicht.....	42
Abbildung 4-10: Face-Selections, gasausgangsseitige Ansicht.....	42
Abbildung 4-11: Mesh Checks in AVL FIRE® .....	45
Abbildung 4-12: Goldnetz-Geometrie .....	48
Abbildung 4-13: Thermische Leitfähigkeit von 8YSZ [Quelle: AVL] .....	50
Abbildung 4-14: Wärmeleitfähigkeit von Crofer als Temperaturfunktion .....	51
Abbildung 4-15: Wärmeleitfähigkeit von Aluminiumoxidkeramik, modifiziert nach [34].....	52
Abbildung 4-16: Wärmeleitfähigkeit von Aluminiumoxidkeramik, modifiziert nach [35].....	53
Abbildung 4-17: Wärmeleitfähigkeit von Aluminiumoxidkeramik .....	53
Abbildung 4-18: Ionenleitfähigkeiten [36] .....	55
Abbildung 4-19: Ionenleitfähigkeiten verschiedener Elektrolytmaterialien [37] .....	56
Abbildung 4-20: Ionenleitfähigkeit von YSZ als Funktion der Temperatur .....	56
Abbildung 4-21: Spezifischer Widerstand von Gold, nach [40] .....	58
Abbildung 4-22: Spezifische Wärmekapazität von Crofer .....	61
Abbildung 4-23: Einbausituation der Heizelemente [Quelle: AVL] .....	64
Abbildung 4-24: aktivierte Heizelemente Fall 1 .....	76
Abbildung 4-25: Temperaturverteilung Fall 1 .....	77
Abbildung 4-26: Oberflächentemperaturverteilung Fall 1 .....	78
Abbildung 4-27: aktivierte Heizelemente Fall 2 .....	79
Abbildung 4-28: Temperaturverteilung Fall 2 .....	80
Abbildung 4-29: Oberflächentemperaturverteilung Fall 2 .....	81
Abbildung 4-30: aktivierte Heizelemente Fall 3 .....	81
Abbildung 4-31: Oberflächentemperaturverteilung Fall 3 .....	82
Abbildung 4-32: Temperaturverteilung Fall 3 .....	83
Abbildung 4-33: aktiviertes Heizelement Fall 4 .....	84
Abbildung 4-34: Temperaturverteilung Fall 4 .....	85

Abbildung 4-35: Oberflächentemperaturverteilung Fall 4 .....	86
Abbildung 4-36: Temperaturen in Abhängigkeit des Stroms .....	87
Abbildung 4-37: Spannung-Stromdichte-Kurve der Segmente 1 und 2 .....	88
Abbildung 4-38: Spannung-Stromdichte-Kurve der Segmente 3 und 4 .....	89
Abbildung 4-39: Zellspannung über Brennstoff- und Sauerstoffausnutzung .....	90
Abbildung 4-40: Brennstoffausnutzung über Stromdichte .....	90
Abbildung 4-41: elektrische Leistung der Segmente 1 und 2 .....	91
Abbildung 4-42: elektrische Leistung der Segmente 3 und 4 .....	91
Abbildung 4-43: Gegenüberstellung physikalischer Größen bei $0 \text{ mA/cm}^2$ .....	93
Abbildung 4-44: Gegenüberstellung physikalischer Größen bei $56 \text{ mA/cm}^2$ .....	94
Abbildung 4-45: Gegenüberstellung physikalischer Größen bei $112 \text{ mA/cm}^2$ .....	95
Abbildung 4-46: Gegenüberstellung physikalischer Größen bei $168 \text{ mA/cm}^2$ .....	96
Abbildung 4-47: Gegenüberstellung physikalischer Größen bei $281 \text{ mA/cm}^2$ .....	97
Abbildung 4-48: Gegenüberstellung physikalischer Größen bei $449 \text{ mA/cm}^2$ .....	98
Abbildung 4-49: Gegenüberstellung physikalischer Größen bei $561 \text{ mA/cm}^2$ .....	99
Abbildung 4-50: Gegenüberstellung physikalischer Größen bei $673 \text{ mA/cm}^2$ .....	100
Abbildung 4-51: Iterationen bis zur Konvergenz .....	101

## TABELLENVERZEICHNIS

Tabelle 1: Materialparameter .....	46
Tabelle 2: Kennzahlen der Nickelnetze [Quelle: AVL].....	48
Tabelle 3: Wärmeleitfähigkeit von Crofer bei ausgewählten Temperaturen, nach [32] .....	51
Tabelle 4: Wärmeleitfähigkeit von Crofer bei ausgewählten Temperaturen, nach Abbildung 4-15 [34] .....	52
Tabelle 5: Wärmeleitfähigkeit von Crofer bei ausgewählten Temperaturen, nach Abbildung 4-16 [35] .....	52
Tabelle 6: Ionenleitfähigkeit von YSZ bei ausgewählten Temperaturen, nach Abbildung 4-18 [36] .....	54
Tabelle 7: Ionenleitfähigkeit von YSZ bei ausgewählten Temperaturen, nach Abbildung 4-19 [37] .....	55
Tabelle 8: Spezifischer Widerstand von Gold, nach [40].....	57
Tabelle 9: Spezifische Widerstände von Crofer bei ausgewählten Temperaturen, nach [32]....	59
Tabelle 10: Spezifische Wärmekapazität von Crofer bei ausgewählten Temperaturen, nach [32] .....	61
Tabelle 11: Emissionsgrade von Aluminiumoxid bei ausgewählten Temperaturen, nach [52] ....	67
Tabelle 12: Fitting-Parameter .....	68
Tabelle 13: Anfangsbedingungen.....	70
Tabelle 14: Activate equations-Einstellungen .....	71
Tabelle 15: Under-relaxation factors .....	72
Tabelle 16: Konvergenzkriterien.....	72
Tabelle 17: Permeabilitätswerte .....	73
Tabelle 18: SOFC-Selections .....	73
Tabelle 19: Umrechnung Stromstärke in Stromdichte.....	88
Tabelle 20: Vergleich Messung - Simulation Fall 1 .....	I
Tabelle 21: Vergleich Messung - Simulation Fall 2 .....	II
Tabelle 22: Vergleich Messung - Simulation Fall 3 .....	III
Tabelle 23: Vergleich Messung - Simulation Fall 4 .....	IV
Tabelle 24: Temperaturen in Abhängigkeit der Stromdichte (Simulation).....	V
Tabelle 25: Temperaturen in Abhängigkeit der Stromdichte (Messung) .....	VI
Tabelle 26: Vergleich der Zellspannungen .....	VI
Tabelle 27: Berechnung der Brennstoffausnutzung $U_f$ .....	VI
Tabelle 28: Vergleich elektrischer Leistungen.....	VII

## LITERATURVERZEICHNIS

- [1] Fabian Rasinger, "Design eines Messapparates für SOFC-Einzelzellen und Feststellung der Temperaturverteilung mittels CFD-Simulationen," Technische Universität Graz, 2014.
- [2] I. EG&G Technical Services, "Fuel Cell Handbook," **Fuel Cell**, vol. 7 Edition, no. November, pp. 1–352, 2004.
- [3] R. J. Kee, H. Zhu, and D. G. Goodwin, "Solid-oxide fuel cells with hydrocarbon fuels," **Proc. Combust. Inst.**, vol. 30 II, no. 2, pp. 2379–2404, 2005.
- [4] B. Droste-Franke, H. Berg, A. Kötter, J. Krüger, K. Mause, J.-C. Pielow, I. Romey, and T. Ziesemer, **Brennstoffzellen und Virtuelle Kraftwerke**. Springer, 2009.
- [5] M. Klell and R. Almbauer, "Höhere Thermodynamik." Institut für Verbrennungskraftmaschinen und Thermodynamik, Technische Universität Graz, Graz, 2014.
- [6] K. Wang, D. Hissel, M. C. Péra, N. Steiner, D. Marra, M. Sorrentino, C. Pianese, M. Monteverde, P. Cardone, and J. Saarinen, "A Review on solid oxide fuel cell models," **Int. J. Hydrogen Energy**, vol. 36, no. 12, pp. 7212–7228, 2011.
- [7] S. C. Singhal and K. Kendall, **High-temperature Solid Oxide Fuel Cells: Fundamentals, Design and Applications**. 2003.
- [8] M. Andersson, J. Yuan, and B. Sundén, "SOFC modeling considering electrochemical reactions at the active three phase boundaries," **Int. J. Heat Mass Transf.**, vol. 55, no. 4, pp. 773–788, 2012.
- [9] O. Razbani, I. Wærnhus, and M. Assadi, "Experimental investigation of temperature distribution over a planar solid oxide fuel cell," **Appl. Energy**, vol. 105, pp. 155–160, 2013.
- [10] M. Hauth, "Einführung in die Brennstoffzellentechnik – Teil 1 Thermodynamische Grundlagen." Graz, p. 56, 2015.
- [11] www.chemie.de, "Porosität." [Online]. Available: <http://www.chemie.de/lexikon/Porosit%C3%A4t.html>. [Accessed: 07-Aug-2015].
- [12] G. Brus, K. Miyawaki, H. Iwai, M. Saito, and H. Yoshida, "Tortuosity of an SOFC anode estimated from saturation currents and a mass transport model in comparison with a real micro-structure," **Solid State Ionics**, vol. 265, pp. 13–21, 2014.
- [13] K. Zheng, Y. Zhang, L. Li, and M. Ni, "On the tortuosity factor of solid phase in solid oxide fuel cell electrodes," **Int. J. Hydrogen Energy**, vol. 40, no. 1, pp. 665–669, 2015.
- [14] S. Kakaç, A. Pramuanjaroenkij, and X. Y. Zhou, "A review of numerical modeling of solid oxide fuel cells," **Int. J. Hydrogen Energy**, vol. 32, no. 7, pp. 761–786, 2007.
- [15] L. Ye, W. Lv, Y. Mao, P. Yan, and W. He, "An electrochemical device for the Knudsen and bulk diffusivity measurement in the anodes of solid oxide fuel cells," **Int. J. Hydrogen Energy**, vol. 39, no. 27, pp. 15057–15062, 2014.
- [16] R. Suwanwarangkul, E. Croiset, M. W. Fowler, P. L. Douglas, E. Entchev, and M. a. Douglas, "Performance comparison of Fick's, dusty-gas and Stefan-Maxwell models to predict the concentration overpotential of a SOFC anode," **J. Power Sources**, vol. 122, no. 1, pp. 9–18, 2003.
- [17] J. Liu and J. Wei, "Knudsen diffusion in channels and networks," **Chem. Eng. Sci.**, vol. 111, pp. 1–14, 2014.
- [18] V. Novaresio, M. García-Camprubí, S. Izquierdo, P. Asinari, and N. Fueyo, "An open-source library for the numerical modeling of mass-transfer in solid oxide fuel cells," **Comput. Phys. Commun.**, vol. 183, no. 1, pp. 125–146, 2012.
- [19] F. Cimolin and M. Discacciati, "Navier-Stokes/Forchheimer models for filtration through porous media," **Appl. Numer. Math.**, vol. 72, pp. 205–224, 2013.

- [20] [www.schweizer-fn.de](http://www.schweizer-fn.de), "Kritische Reynoldszahl in einem geraden Rohr." [Online]. Available: <http://www.schweizer-fn.de/stroemung/druckverlust/druckverlust.php#reynoldszahl>. [Accessed: 06-Apr-2016].
- [21] S. P. S. Shaikh, A. Muchtar, and M. R. Somalu, "A review on the selection of anode materials for solid-oxide fuel cells," *Renew. Sustain. Energy Rev.*, vol. 51, pp. 1–8, 2015.
- [22] E. S. Hecht, G. K. Gupta, H. Zhu, A. M. Dean, R. J. Kee, L. Maier, and O. Deutschmann, "Methane reforming kinetics within a Ni-YSZ SOFC anode support," *Appl. Catal. A Gen.*, vol. 295, no. 1, pp. 40–51, 2005.
- [23] D. Shin and J. H. Nam, "An Effectiveness Model for Electrochemical Reactions in Electrodes of Intermediate-Temperature Solid Oxide Fuel Cells," *Electrochim. Acta*, vol. 171, pp. 1–6, 2015.
- [24] S. A. Hajimolana, M. A. Hussain, W. M. A. W. Daud, M. Soroush, and a. Shamiri, "Mathematical modeling of solid oxide fuel cells: A review," *Renew. Sustain. Energy Rev.*, vol. 15, no. 4, pp. 1893–1917, 2011.
- [25] J. R. Rostrup-Nielsen, *Catalysis*. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 1984.
- [26] T. X. Ho, "Dynamic characteristics of a solid oxide fuel cell with direct internal reforming of methane," *Energy Convers. Manag.*, vol. 113, pp. 44–51, 2016.
- [27] V. N. Nguyen, R. Deja, R. Peters, and L. Blum, "Methane/steam global reforming kinetics over the Ni/YSZ of planar pre-reformers for SOFC systems," *Chem. Eng. J.*, vol. 292, pp. 113–122, 2016.
- [28] V. Chiodo, A. Galvagno, A. Lanzini, D. Papurello, F. Urbani, M. Santarelli, and S. Freni, "Biogas reforming process investigation for SOFC application," *Energy Convers. Manag.*, vol. 98, pp. 252–258, 2015.
- [29] Omega, "Thermoelement - Einführung zum Thema Temperaturmessung." [Online]. Available: <http://www.omega.de/prodinfo/thermoelemente.html>. [Accessed: 07-Apr-2016].
- [30] W. Sanz, "Computational Fluid Dynamics." Institut für Thermische Turbomaschinen und Maschinendynamik, Technische Universität Graz, Graz, 2014.
- [31] [www.chemie.de](http://www.chemie.de), "Wärmeleitfähigkeit." [Online]. Available: <http://www.chemie.de/lexikon/W%C3%A4rmeleitf%C3%A4higkeit.html>. [Accessed: 06-Apr-2016].
- [32] VDM-Metals, "VDM ® Crofer 22 APU," 2010.
- [33] [www.chemie.de](http://www.chemie.de), "Temperaturkoeffizient." [Online]. Available: <http://www.chemie.de/lexikon/Temperaturkoeffizient.html>. [Accessed: 09-Feb-2016].
- [34] P. Auerkari, "Mechanical and physical properties of engineering alumina ceramics," *Tech. Res. Cent. Finl.*, vol. 1792, p. 26, 1996.
- [35] H. Salmang and H. Scholze, *Keramik*. Springer Science & Business Media, 2006.
- [36] B. S. Chris K. Dyer, Patrick T. Moseley, Zempachi Ogumi, David A. J. Rand, *Encyclopedia of Electrochemical Power Sources*. Newnes, 2013.
- [37] R. H. Crabtree, *Energy Production and Storage: Inorganic Chemical Strategies for a Warming World*. Wiley, 2010.
- [38] "ANSYS FLUENT 12.0 - Fuel Cells Module Manual," *Fuel Cells Bull.*, vol. 4, no. April, p. 97, 2001.
- [39] E. Hering, *Taschenbuch für Wirtschaftsingenieure*. Carl Hanser Verlag GmbH Co KG, 2013.
- [40] R. A. Matula, "Electrical Resistivity of Copper, Gold, Palladium, and Silver," *J. Phys. Chem. Ref. Data*, vol. 8, no. 4, p. 152, 1979.
- [41] [www.chemie.de](http://www.chemie.de), "Spezifischer Widerstand." [Online]. Available: [http://www.chemie.de/lexikon/Spezifischer\\_Widerstand.html](http://www.chemie.de/lexikon/Spezifischer_Widerstand.html). [Accessed: 09-Feb-2016].



- [42] Elektronik-Kompendium, "Eigenschaften elektrisch leitender Werkstoffe in der Elektrotechnik." [Online]. Available: <http://www.elektronik-kompendium.de/sites/grd/1305211.htm>. [Accessed: 09-Feb-2016].
- [43] www.chemie.de, "Liste der spezifischen Wärmekapazitäten." [Online]. Available: [http://www.chemie.de/lexikon/Liste\\_der\\_spezifischen\\_W%C3%A4rmekapazit%C3%A4ten.html](http://www.chemie.de/lexikon/Liste_der_spezifischen_W%C3%A4rmekapazit%C3%A4ten.html). [Accessed: 06-Apr-2016].
- [44] VDI, **VDI Wärmeatlas**, 10th ed. Springer.
- [45] www.grund-wissen.de/, "Ausbreitung von Wärme." [Online]. Available: <http://grundwissen.de/physik/waermelehre/ausbreitung-von-waerme.html>. [Accessed: 06-Apr-2016].
- [46] dew-stahl, "1.4841."
- [47] Elektronik-Kompendium, "Elektrische Leistung P." [Online]. Available: <http://www.elektronik-kompendium.de/sites/grd/0201114.htm>. [Accessed: 06-Apr-2016].
- [48] MHI (Micropyretics Heaters International), "MC-GAXP-130." [Online]. Available: <http://www.mhioab.com/mhi-inc/PG4/private/gaxp130/index.html>. [Accessed: 09-Feb-2016].
- [49] www.pci.tu, "Bestandteile der Luft." [Online]. Available: [http://www.pci.tu-bs.de/aggericke/PC5/Kap\\_IV/Bestandteile.htm](http://www.pci.tu-bs.de/aggericke/PC5/Kap_IV/Bestandteile.htm). [Accessed: 06-Apr-2016].
- [50] A. AVL, "AVL FIRE VERSION 2014.1 Electrification/Hybridization." AVL, p. 113, 2015.
- [51] B. Wischnewski, "Berechnung der thermodynamischen Zustandsgrößen von Luft," **peace software**. [Online]. Available: <http://www.peacesoftware.de/einigewerte/luft.html>. [Accessed: 09-Feb-2016].
- [52] Mikron Instrument Company, "Table of Emissivity of Various Surfaces," p. 10.
- [53] H. Steiner, "Höhere Strömungslehre und Wärmeübertragung." Institut für Strömungslehre und Wärmeübertragung, Technische Universität Graz, 2012.
- [54] www.schweizer-fn.de, "Hydraulischer Durchmesser bei rechteckiger Querschnittsform." [Online]. Available: <http://www.schweizer-fn.de/stroemung/druckverlust/druckverlust.php#hdurchmesserrechteck>. [Accessed: 10-Feb-2016].
- [55] B. Hof, "Die Lösung eines alten Rätsels: Der kritische Punkt der Rohrströmung," **Max-Planck-Gesellschaft**. [Online]. Available: [https://www.mpg.de/4804411/Rohrstroemung\\_kritische\\_Punkt?c=5732343&force\\_lang=de](https://www.mpg.de/4804411/Rohrstroemung_kritische_Punkt?c=5732343&force_lang=de). [Accessed: 06-Apr-2016].
- [56] CFD-Support, "Under-Relaxation." [Online]. Available: <http://www.cfdsupport.com/water-turbine-cfd-manual/node57.html>. [Accessed: 10-Feb-2016].
- [57] www.chemie.de, "Partialdruck." [Online]. Available: <http://www.chemie.de/lexikon/Partialdruck.html>. [Accessed: 06-Apr-2016].

**ANHANG A. Tabellen**

Tabelle 20: Vergleich Messung - Simulation Fall 1

	Messung		Simulation		Differenz
	T in K	ϑ in °C	T in K	ϑ in °C	ΔT in K
T_v1	973	700	978	705	5
T_v2	997	724	1004	731	7
T_v3	995	722	1004	731	9
T_v4	979	706	978	705	-1
T_v5	976	703	974	701	-2
T_v6	978	705	976	703	-2
T_v7	990	717	988	715	-2
T_v8	1043	770	1050	777	7
T_v9	994	721	994	721	0
T_v10	1041	768	1049	776	8
T_v11	1044	770	1050	777	7
T_v12	990	717	988	715	-2
T_v13	1044	771	1050	777	6
T_v14	992	719	994	721	2
T_v15	974	701	973	700	-1
T_v16	970	697	977	704	7
T_v17	992	719	1004	731	12
T_v18	991	718	1004	731	13
T_h11	1003	730	1019	746	16
T_h12	1037	764	1031	758	-6
T_h13	1011	738	1034	761	23
T_h14	1047	774	1048	775	1
T_h21	1025	752	1035	762	10
T_h22	1046	773	1049	776	3
T_h23	1004	731	1021	748	17
T_h24	1037	763	1034	761	-2
T_h31	1015	742	1019	746	4
T_h32	1036	763	1032	759	-4
T_h33	1016	743	1035	762	19
T_h34	1048	775	1048	775	0
T_h41	1025	752	1036	763	11
T_h42	1049	775	1049	776	1
T_h43	998	725	1020	747	23
T_h44	1036	763	1034	761	-2
betragsmäßig maximale Differenz:					23

Tabelle 21: Vergleich Messung - Simulation Fall 2

	Messung		Simulation		Differenz
	T in K	$\vartheta$ in °C	T in K	$\vartheta$ in °C	$\Delta T$ in K
T_v1	931	658	915	642	-16
T_v2	949	676	935	662	-14
T_v3	957	684	944	671	-13
T_v4	957	684	937	664	-20
T_v5	932	659	914	641	-18
T_v6	957	684	936	663	-21
T_v7	946	673	928	655	-18
T_v8	978	705	962	689	-16
T_v9	960	687	938	665	-22
T_v10	977	704	962	689	-15
T_v11	979	705	963	690	-15
T_v12	957	684	935	662	-22
T_v13	979	706	963	690	-16
T_v14	949	676	930	657	-19
T_v15	954	681	934	661	-20
T_v16	932	659	915	642	-17
T_v17	956	682	944	671	-11
T_v18	946	673	935	662	-11
T_h11	941	668	931	658	-10
T_h12	957	684	941	668	-16
T_h13	949	676	943	670	-6
T_h14	967	693	953	680	-13
T_h21	982	709	967	694	-15
T_h22	992	719	971	698	-21
T_h23	975	702	965	692	-10
T_h24	993	720	966	693	-27
T_h31	984	711	964	691	-20
T_h32	993	719	965	692	-27
T_h33	975	702	967	694	-8
T_h34	992	719	970	697	-22
T_h41	952	679	943	670	-9
T_h42	966	693	954	681	-12
T_h43	938	665	931	658	-7
T_h44	957	684	944	671	-13
betragsmäßig maximale Differenz:					27

Tabelle 22: Vergleich Messung - Simulation Fall 3

	Messung		Simulation		Differenz
	T in K	$\vartheta$ in °C	T in K	$\vartheta$ in °C	$\Delta T$ in K
T_v1	907	634	907	634	0
T_v2	911	638	913	640	2
T_v3	911	638	913	640	2
T_v4	908	635	908	635	0
T_v5	909	636	907	634	-2
T_v6	909	636	908	635	-1
T_v7	928	655	926	653	-2
T_v8	948	675	953	680	5
T_v9	927	654	929	656	2
T_v10	958	685	962	689	4
T_v11	961	687	962	689	2
T_v12	941	668	939	666	-2
T_v13	972	699	973	700	1
T_v14	939	666	940	667	1
T_v15	944	671	942	669	-2
T_v16	939	666	943	670	4
T_v17	958	685	965	692	7
T_v18	958	685	965	692	7
T_h11	913	640	921	648	8
T_h12	933	660	936	663	3
T_h13	914	641	926	653	12
T_h14	937	664	943	670	6
T_h21	917	644	926	653	9
T_h22	934	661	943	670	9
T_h23	911	638	922	649	11
T_h24	930	657	938	665	8
T_h31	976	703	973	700	-3
T_h32	980	707	970	697	-10
T_h33	975	701	984	711	10
T_h34	985	711	980	707	-4
T_h41	981	708	985	712	4
T_h42	984	711	980	707	-4
T_h43	960	687	974	701	14
T_h44	975	702	971	698	-4
betragsmäßig maximale Differenz:					14

Tabelle 23: Vergleich Messung - Simulation Fall 4

	Messung		Simulation		Differenz
	T in K	ϑ in °C	T in K	ϑ in °C	ΔT in K
T_v1	891	618	890	617	-1
T_v2	897	624	896	623	-1
T_v3	898	625	898	625	0
T_v4	899	626	898	625	-1
T_v5	891	618	889	616	-2
T_v6	901	628	899	626	-2
T_v7	895	622	894	621	-1
T_v8	921	648	920	647	-1
T_v9	919	646	918	645	-1
T_v10	920	647	920	647	0
T_v11	936	663	933	660	-3
T_v12	897	623	896	623	0
T_v13	936	663	933	660	-3
T_v14	932	659	930	657	-2
T_v15	898	625	898	625	0
T_v16	932	659	932	659	0
T_v17	920	647	923	650	3
T_v18	933	660	935	662	2
T_h11	895	622	897	624	2
T_h12	901	628	902	629	1
T_h13	898	625	902	629	4
T_h14	908	635	909	636	1
T_h21	904	631	908	635	4
T_h22	918	645	922	649	4
T_h23	901	628	908	635	7
T_h24	918	645	922	649	4
T_h31	907	633	908	635	2
T_h32	906	633	908	635	2
T_h33	920	647	923	650	3
T_h34	921	647	921	648	1
T_h41	963	689	958	685	-4
T_h42	965	691	954	681	-10
T_h43	950	677	960	687	10
T_h44	967	694	956	683	-11
betragsmäßig maximale Differenz:					11

ANHANG A - Tabellen

Tabelle 24: Temperaturen in Abhängigkeit der Stromdichte (Simulation)

I in A	0	1	2	3	5	8	10	12
i in mA/cm <sup>2</sup>	0	56,1	112,2	168,4	280,6	448,9	561,2	673,4
ϑ in °C								
T_v1	705	705	705	706	706	707	708	709
T_v2	731	731	731	732	732	733	735	737
T_v3	731	731	731	732	733	733	736	737
T_v4	705	705	705	706	706	707	710	711
T_v5	701	701	701	702	702	703	704	705
T_v6	703	703	703	704	704	705	706	707
T_v7	715	715	716	716	717	718	719	720
T_v8	777	777	778	778	780	782	784	786
T_v9	721	721	722	722	723	724	726	726
T_v10	776	776	777	777	779	781	783	785
T_v11	777	777	778	778	780	782	784	786
T_v12	715	715	716	716	717	718	719	720
T_v13	777	777	778	778	780	782	784	786
T_v14	721	721	722	722	723	724	725	726
T_v15	700	700	701	701	702	703	704	705
T_v16	704	704	704	704	705	706	707	710
T_v17	731	731	731	732	733	733	733	735
T_v18	731	731	732	732	733	735	736	737
T_h11	746	746	746	748	748	750	751	754
T_h12	758	758	759	759	760	762	764	766
T_h13	761	761	761	763	764	766	767	770
T_h14	775	775	776	776	777	780	781	783
T_h21	762	762	763	764	765	767	768	770
T_h22	776	776	777	777	778	781	783	785
T_h23	748	748	750	750	750	751	753	755
T_h24	761	762	762	762	762	766	767	769
T_h31	746	747	748	748	748	750	751	753
T_h32	759	759	759	759	760	762	764	766
T_h33	762	762	762	762	764	766	767	769
T_h34	775	775	775	776	777	779	781	783
T_h41	763	763	763	764	764	767	769	771
T_h42	776	776	777	777	779	781	783	785
T_h43	747	748	750	750	751	752	755	756
T_h44	761	761	762	763	764	766	767	767

ANHANG A - Tabellen

Tabelle 25: Temperaturen in Abhängigkeit der Stromdichte (Messung)

Stromdichte mA/cm <sup>2</sup>	Temperatur $\vartheta$ °C				Heizelement- Spannung V
	T_v5	T_v8	T_v13	T_v15	
0	706,6354	801,6701	804,7091	705,9842	18
56	707,3989	800,2898	803,1510	706,8278	18
112	708,6381	800,2235	803,0187	708,1294	18
168	710,0903	801,0849	803,8693	709,6108	18
224	713,1075	803,8621	806,6460	712,5675	18
281	715,5407	806,4704	809,2054	714,8913	18
337	717,3504	808,5728	811,2712	716,6095	18
393	719,6614	811,3557	814,0046	718,8092	18
449	(721,2070)	(813,2684)	(815,8725)	(720,2548)	15
505	(722,6885)	(813,3144)	(815,7115)	(721,3176)	15
561	(717,9508)	(794,0885)	(795,7250)	(716,3656)	15
617	(716,2668)	(790,2883)	(791,8771)	(714,7687)	15
673	(710,0001)	(780,6062)	(782,0513)	(708,6810)	15

Tabelle 26: Vergleich der Zellspannungen

I / (mA/cm <sup>2</sup> )	U <sub>1</sub> / V		U <sub>2</sub> / V		U <sub>3</sub> / V		U <sub>4</sub> / V	
	Messung	Simulation	Messung	Simulation	Messung	Simulation	Messung	Simulation
0	1,1500	1,1491	1,1242	1,1483	1,1718	1,1490	1,1586	1,1482
56,117	1,0449	1,0592	1,0275	1,0516	1,0549	1,0592	1,0304	1,0516
112,233	1,0021	1,0156	0,9867	1,0078	1,0161	1,0156	0,9791	1,0078
168,350	0,9717	0,9843	0,9569	0,9753	0,9881	0,9843	0,9417	0,9753
224,467	0,9468	-	0,9316	-	0,9669	-	0,9091	-
280,584	0,9260	0,9330	0,9092	0,9193	0,9490	0,9331	0,8817	0,9193
336,700	0,9079	-	0,8891	-	0,9335	-	0,8552	-
392,817	0,8926	-	0,8684	-	0,9190	-	0,8306	-
448,934	0,8798	0,8710	0,8487	0,8446	0,9056	0,8710	0,8059	0,8446
505,051	0,8663	-	0,8277	-	0,8929	-	0,7795	-
561,167	0,8478	0,8362	0,8044	0,7939	0,8727	0,8362	0,7668	0,7939
617,284	0,8342	-	0,7741	-	0,8597	-	0,7376	-
673,401	0,8190	0,7988	0,7301	0,7066	0,8464	0,7988	0,6998	0,7066

Tabelle 27: Berechnung der Brennstoffausnutzung U<sub>f</sub>

i / mA/cm <sup>2</sup>		0,000	56,117	112,233	168,350	280,584	448,934	561,167	673,401
v <sub>H2</sub>	In	0,5630	0,5630	0,5630	0,5630	0,5630	0,5630	0,5630	0,5630
	Out	0,5628	0,5447	0,5262	0,5077	0,4707	0,4153	0,3784	0,3414
p / Pa	In	101451,1	101451,6	101452,0	101452,3	101453,2	101454,4	101455,3	101456,1
	Out	101325,1	101325,1	101325,1	101325,1	101325,1	101325,1	101325,1	101325,1
p <sub>H2</sub> in Pa	In	57115,2	57115,5	57115,7	57115,9	57116,4	57117,1	57117,6	57118,0
	Out	57022,0	55194,1	53313,6	51439,9	47695,7	42079,3	38337,6	34588,4
U <sub>f</sub>		0,0016	0,0336	0,0666	0,0994	0,1649	0,2633	0,3288	0,3944

Tabelle 28: Vergleich elektrischer Leistungen

i / mA/cm <sup>2</sup>	P <sub>el</sub> / W							
	Segment 1		Segment 2		Segment 3		Segment 4	
	Messung	Sim.	Messung	Sim.	Messung	Sim.	Messung	Sim.
0,0	0,003	0,000	0,002	0,000	0,006	0,000	0,006	0,000
56,1	1,048	1,059	1,030	1,052	1,061	1,059	1,036	1,052
112,2	2,008	2,031	1,976	2,016	2,038	2,031	1,964	2,016
168,4	2,918	2,953	2,874	2,926	2,970	2,953	2,830	2,926
224,5	3,790	-	3,729	-	3,873	-	3,642	-
280,6	4,633	4,665	4,549	4,597	4,750	4,665	4,414	4,597
336,7	5,451	-	5,338	-	5,606	-	5,137	-
392,8	6,252	-	6,082	-	6,438	-	5,819	-
448,9	7,042	6,968	6,793	6,757	7,249	6,968	6,452	6,757
505,1	7,801	-	7,452	-	8,041	-	7,021	-
561,2	8,482	8,362	8,047	7,939	8,732	8,362	7,673	7,939
617,3	9,180	-	8,518	-	9,461	-	8,119	-
673,4	9,832	9,586	8,764	8,480	10,161	9,586	8,402	8,480



## ANHANG B. Formeln

Es folgt eine Auflistung von Formeln, die in FIRE® im Solver Steering File eingetragen werden müssen, um verschiedene Materialien zu unterscheiden oder Temperaturabhängigkeiten vorzugeben. Die fett gedruckten Überschriften geben an, für welche Größe in welchem Einstellungsfenster die Formel verwendet wird. Jedes Formelfenster besteht aus den drei Teilen **Global Formula Variables**, **Formula Initialization** und **Formula Body**.

Als Variable dient immer die Temperatur, die entweder über „temp“ oder „T[index]“ abgerufen wird. Beide Variablennamen sind gleichwertig.

---

### **TGIVEN\_Ceramic: External wall emissivity:**

Global Formula Variables (accessible from both Initialization and Body):

Formula Initialization:

Formula Body:

```
return 0.7983-0.000489297*T[index];
```

---

### **Cat\_Elec\_Out: Current:**

Global Formula Variables (accessible from both Initialization and Body):

```
int matDim;
```

```
char mat[1];
```

```
void set_mat(char selName[], char matIndex)
```

```
{
    int sel[3],idir,ib,ic;
    if((Sellnit(selName, sel) && SelType(sel) == 2){
        if(IAMPRO < 2) print "setting formula mat index in selection", selName, "to", (int) matIndex;
        while(SelNext(sel)){
            ic=SelIndex(sel);
            idir=SelIndex2(sel);
            ib=INDEX_OF_SEL_BND_FACE(ic+1,idir+1)-1;
            mat[ib] = matIndex;
        }
    }else{
        print "ERROR: selection", selName, "does not exist or is not a cell selection!";
    }
}
```

Formula Initialization:

```
if(ITER == 0){
    matDim = NBFAC;
    resize(mat, matDim+1);
    mat = 0;
    set_mat("Cat1_Elec_Out", 1);
    set_mat("Cat2_Elec_Out", 2);
    set_mat("Cat3_Elec_Out", 3);
    set_mat("Cat4_Elec_Out", 4);
}
```

Formula Body:

```
double ncat=4.0;
if(mat[index] == 1){
    return -0.0*ncat;
} else if(mat[index] == 2){
    return -0.0*ncat;
} else if(mat[index] == 3){
    return -0.0*ncat;
} else if(mat[index] == 4){
    return -0.0*ncat;
}
}
```

---

**Fluid properties: FP[1]: NoName: Phase 2: Density:**

Global Formula Variables (accessible from both Initialization and Body):

```
int matDim;
char mat[1];

void set_mat(char selName[], char matIndex)
{
    int sel[3];
    if(SelNinit(selName, sel) && SelType(sel) == 3){
        if(IAMPRO < 2) print "setting formula mat index in selection", selName, "to", (int) matIndex;
        while(SelNext(sel)){
            mat[SelIndex(sel)] = matIndex;
        }
    }else{
        print "ERROR: selection", selName, "does not exist or is not a cell selection!";
    }
}
}
```

Formula Initialization:

```
if(ITER == 0){
    matDim = NCELL;
    resize(mat, matDim);
    mat = 0;
    set_mat("Material_interconnect_ano", 1);
    set_mat("Material_ceramic", 2);
    set_mat("Material_glass_solder", 3);
    set_mat("Material_steel_frame", 4);
}
}
```

Formula Body:

```
if(mat[index] == 1){
    return 7700.0;
} else if (mat[index] == 2){
    return 3860.0;
} else if (mat[index] == 3){
    return 2500.0;
} else if (mat[index] == 4){
    return 7700.0;
}
}
```

**Fluid properties: FP[1]: NoName: Phase 2: Specific heat:**

Global Formula Variables (accessible from both Initialization and Body):

```
int matDim;
char mat[1];

void set_mat(char selName[], char matIndex)
{
    int sel[3];
    if(SelInit(selName, sel) && SelType(sel) == 3){
        if(IAMPRO < 2) print "setting formula mat index in selection", selName, "to", (int) matIndex;
        while(SelNext(sel)){
            mat[SelIndex(sel)] = matIndex;
        }
    }else{
        print "ERROR: selection", selName, "does not exist or is not a cell selection!";
    }
}
```

Formula Initialization:

```
if(ITER == 0){
    matDim = NCELL;
    resize(mat, matDim);
    mat = 0;
    set_mat("Material_interconnect_ano", 1);
    set_mat("Material_ceramic", 2);
    set_mat("Material_glass_solder", 3);
    set_mat("Material_steel_frame", 4);
    set_mat("Material_gold", 5);
    set_mat("Material_nickel", 6);
    set_mat("Material_cathode", 7);
    set_mat("Material_electrolyte", 8);
    set_mat("Material_anode", 9);
    set_mat("Material_interconnect_cat", 10);
}
```

Formula Body:

```
double poro;

if(mat[index] == 1){
    return 610*(1+3.96175*pow(10,-4)*(temp-673.15)-4.78142*pow(10,-7)*pow((temp-673.15),2));
}else if (mat[index] == 2){
    return 510.0;
}else if (mat[index] == 3){
    return 800.0;
}else if (mat[index] == 4){
    return 610*(1+3.96175*pow(10,-4)*(temp-673.15)-4.78142*pow(10,-7)*pow((temp-673.15),2));
}else if (mat[index] == 5){
    poro=0.791425;
    return 130/(1-poro);
}else if (mat[index] == 6){
    poro=0.626;
    return 444/(1-poro);
}else if (mat[index] == 7){
    poro=0.3;
    return 470/(1-poro);
}else if (mat[index] == 8){
    return 471;
}else if (mat[index] == 9){
```

```

    poro=0.4;
    return 470/(1-poro);
}else if (mat[index] == 10){
    return 128;
}

```

---

### Fluid properties: FP[1]: NoName: Phase 2: Thermal conductivity:

Global Formula Variables (accessible from both Initialization and Body):

```

int matDim;
char mat[1];

void set_mat(char selName[], char matIndex)
{
    int sel[3];
    if(SelInit(selName, sel) && SelType(sel) == 3){
        if(IAMPRO < 2) print "setting formula mat index in selection", selName, "to", (int) matIndex;
        while(SelNext(sel)){
            mat[SelIndex(sel)] = matIndex;
        }
    }else{
        print "ERROR: selection", selName, "does not exist or is not a cell selection!";
    }
}

```

Formula Initialization:

```

if(ITER == 0){
    matDim = NCELL;
    resize(mat, matDim);
    mat = 0;
    set_mat("Material_interconnect_ano", 1);
    set_mat("Material_ceramic", 2);
    set_mat("Material_glass_solder", 3);
    set_mat("Material_steel_frame", 4);
}

```

Formula Body:

```

if(mat[index] == 1){
    return 23*(1-2.53623*pow(10,-4)*(temp-673.15)+9.05797*pow(10,-7)*pow((temp-673.15),2));
}else if (mat[index] == 2){
    return 31.9*(1-2.29147*pow(10,-3)*(temp-293.15)+1.66666*pow(10,-6)*pow((temp-293.15),2));
}else if (mat[index] == 3){
    return 1.0;
}else if (mat[index] == 4){
    return 23*(1-2.53623*pow(10,-4)*(temp-673.15)+9.05797*pow(10,-7)*pow((temp-673.15),2));
}

```

---

### Fluid properties: FP[1]: NoName: Phase 2: Electrical conductivity:

Global Formula Variables (accessible from both Initialization and Body):

```

int matDim;

```

```

char mat[1];

void set_mat(char selName[], char matIndex)
{
    int sel[3];
    if(SelInit(selName, sel) && SelType(sel) == 3){
        if(IAMPRO < 2) print "setting formula mat index in selection", selName, "to", (int) matIndex;
        while(SelNext(sel)){
            mat[SelIndex(sel)] = matIndex;
        }
    }else{
        print "ERROR: selection", selName, "does not exist or is not a cell selection!";
    }
}

```

Formula Initialization:

```

if(ITER == 0){
    matDim = NCELL;
    resize(mat, matDim);
    mat = 0;
    set_mat("Material_interconnect_ano", 1);
    set_mat("Material_ceramic", 2);
    set_mat("Material_glass_solder", 3);
    set_mat("Material_steel_frame", 4);
}

```

Formula Body:

```

if(mat[index] == 1){
    return 1/(10.5*pow(10,-7)*(1+3.96825*pow(10,-4)*(temp-873.15)+3.97*pow(10,-7)*pow((temp-873.15),2)));
}else if (mat[index] == 2){
    return 0.0;
}else if (mat[index] == 3){
    return 0.0;
}else if (mat[index] == 4){
    return 1/(10.5*pow(10,-7)*(1+3.96825*pow(10,-4)*(temp-873.15)+3.97*pow(10,-7)*pow((temp-873.15),2)));
}

```

---



---

**Fuel cell: Parameters and properties: Electrodes: Cathode: Electrical conductivity:**

Global Formula Variables (accessible from both Initialization and Body):

```

int matDim;
char mat[1];

void set_mat(char selName[], char matIndex)
{
    int sel[3];
    if(SelInit(selName, sel) && SelType(sel) == 3){
        if(IAMPRO < 2) print "setting formula mat index in selection", selName, "to", (int) matIndex;
        while(SelNext(sel)){
            mat[SelIndex(sel)] = matIndex;
        }
    }else{
        print "ERROR: selection", selName, "does not exist or is not a cell selection!";
    }
}

```

```
    }
}
```

Formula Initialization:

```
if(ITER == 0){
    matDim = NCELL;
    resize(mat, matDim);
    mat = 0;
    set_mat("Material_cathode", 1);
    set_mat("Material_gold", 2);
}
```

Formula Body:

```
double poro;

if(mat[index] == 1){
    poro=0.3;
    return (4.2e7/temp*exp(-1200.0/temp))/(1.0-poro);
}else if (mat[index] == 2){
    poro=0.75;
    return (1/(7.96*pow(10,-8)*(1+1.38460543284*pow(10,-3)*(temp-865)+6.787430722477*pow(10,-7)*pow((temp-865),2))))/(1.0-poro);
}
```

---

**Fuel cell: Parameters and properties: Electrodes: Anode: Electrical conductivity:**

Global Formula Variables (accessible from both Initialization and Body):

```
int matDim;
char mat[1];

void set_mat(char selName[], char matIndex)
{
    int sel[3];
    if(SelInit(selName, sel) && SelType(sel) == 3){
        if(IAMPRO < 2) print "setting formula mat index in selection", selName, "to", (int) matIndex;
        while(SelNext(sel)){
            mat[SelIndex(sel)] = matIndex;
        }
    }else{
        print "ERROR: selection", selName, "does not exist or is not a cell selection!";
    }
}
```

Formula Initialization:

```
if(ITER == 0){
    matDim = NCELL;
    resize(mat, matDim);
    mat = 0;
    set_mat("Material_anode", 1);
    set_mat("Material_nickel", 2);
}
```

Formula Body:

```
double poro;

if(mat[index] == 1){
    poro=0.45;
    return (9.5e7/temp*exp(-1150.0/temp))/(1.0-poro);
}else if (mat[index] == 2){
    poro=0.626;
    return (1/((7e-8)*(1+(6e-3)*(temp-293.15))))/(1.0-poro);
}
```

---

**Fuel cell: Parameters and properties: Electrodes: Cathode: Thermal conductivity:**

Global Formula Variables (accessible from both Initialization and Body):

```
int matDim;
char mat[1];

void set_mat(char selName[], char matIndex)
{
    int sel[3];
    if(SelInit(selName, sel) && SelType(sel) == 3){
        if(IAMPRO < 2) print "setting formula mat index in selection", selName, "to", (int) matIndex;
        while(SelNext(sel)){
            mat[SelIndex(sel)] = matIndex;
        }
    }else{
        print "ERROR: selection", selName, "does not exist or is not a cell selection!";
    }
}
```

Formula Initialization:

```
if(ITER == 0){
    matDim = NCELL;
    resize(mat, matDim);
    mat = 0;
    set_mat("Material_cathode", 1);
    set_mat("Material_gold", 2);
}
```

Formula Body:

```
double poro;
if(mat[index] == 1){
    poro = 0.3;
    return 3.0/(1.0-poro);
}else if (mat[index] == 2){
    poro = 0.75;
    return 310.0/(1.0-poro);
}
```

**Fuel cell: Parameters and properties: Electrodes: Anode: Thermal conductivity:**

Global Formula Variables (accessible from both Initialization and Body):

```
int matDim;
char mat[1];

void set_mat(char selName[], char matIndex)
{
    int sel[3];
    if(SelInit(selName, sel) && SelType(sel) == 3){
        if(IAMPRO < 2) print "setting formula mat index in selection", selName, "to", (int) matIndex;
        while(SelNext(sel)){
            mat[SelIndex(sel)] = matIndex;
        }
    }else{
        print "ERROR: selection", selName, "does not exist or is not a cell selection!";
    }
}
```

Formula Initialization:

```
if(ITER == 0){
    matDim = NCELL;
    resize(mat, matDim);
    mat = 0;
    set_mat("Material_anode", 1);
    set_mat("Material_nickel", 2);
}
```

Formula Body:

```
double poro;
if(mat[index] == 1){
    poro = 0.45;
    return 4.0/(1.0-poro);
}else if (mat[index] == 2){
    poro = 0.626;
    return 85.0/(1.0-poro);
}
```

**Fuel cell: Parameters and properties: Electrolyte: Ionic conductivity:**

Global Formula Variables (accessible from both Initialization and Body):

Formula Initialization:

Formula Body:

```
return 100/(0.3685+0.002838*exp(10300/temp));
```

**Fuel cell: Parameters and properties: Electrolyte: Thermal conductivity:**

Global Formula Variables (accessible from both Initialization and Body):



Formula Initialization:

Formula Body:

```
return 2.2743-(1.79104e-4)*temp;
```

---

**Fuel cell: Parameters and properties: Interconnect: Electrical conductivity:**

Global Formula Variables (accessible from both Initialization and Body):

```
int matDim;
char mat[1];

void set_mat(char selName[], char matIndex)
{
    int sel[3];
    if(SelInit(selName, sel) && SelType(sel) == 3){
        if(IAMPRO < 2) print "setting formula mat index in selection", selName, "to", (int) matIndex;
        while(SelNext(sel)){
            mat[SelIndex(sel)] = matIndex;
        }
    }else{
        print "ERROR: selection", selName, "does not exist or is not a cell selection!";
    }
}
```

Formula Initialization:

```
if(ITER == 0){
    matDim = NCELL;
    resize(mat, matDim);
    mat = 0;
    set_mat("Material_interconnect_ano", 1);
    set_mat("Material_interconnect_cat", 2);
}
```

Formula Body:

```
if(mat[index] == 1){
    return 1/(10.5*pow(10,-7)*(1+3.96825*pow(10,-4)*(temp-873.15)+3.97*pow(10,-7)*pow((temp-873.15),2)));
}else if (mat[index] == 2){
    return 1/(7.96*pow(10,-8)*(1+1.38460543284*pow(10,-3)*(temp-865)+6.787430722477*pow(10,-7)*pow((temp-865),2)));
}
```

---

**Fuel cell: Parameters and properties: Interconnect: Thermal conductivity:**

Global Formula Variables (accessible from both Initialization and Body):

```
int matDim;
char mat[1];

void set_mat(char selName[], char matIndex)
{
```

```

int sel[3];
if(SelInit(selName, sel) && SelType(sel) == 3){
    if(IAMPRO < 2) print "setting formula mat index in selection", selName, "to", (int) matIndex;
    while(SelNext(sel)){
        mat[SelIndex(sel)] = matIndex;
    }
}else{
    print "ERROR: selection", selName, "does not exist or is not a cell selection!";
}
}

```

Formula Initialization:

```

if(ITER == 0){
    matDim = NCELL;
    resize(mat, matDim);
    mat = 0;
    set_mat("Material_interconnect_ano", 1);
    set_mat("Material_interconnect_cat", 2);
}

```

Formula Body:

```

if(mat[index] == 1){
    return 23*(1-2.53623188404*pow(10,-4)*(temp-673.15)+9.05797101445*pow(10,-7)*pow((temp-673.15),2));
}else if (mat[index] == 2){
    return 310.0;
}

```