

Anwendungsorientierte Forschung an der Zürcher Hochschule Winterthur (ZHW) auf dem Gebiet der Brennstoffzelle

Thomas Spielmann*, Heinz Juzi, und Markus Roos

Applied Research and Development on Fuel Cells at the Zurich University of Applied Sciences Winterthur

Abstract: Applied research and development on fuel cells at the ZHW started five years ago. After the change of 'Technikum Winterthur Ingenieurschule' into the Zurich University of Applied Sciences Winterthur, these activities have intensified. Now there are four ZHW departments involved in research and development of Solid Oxide Fuel Cells (SOFC). The main activities are numerical simulation, energy management of SOFC and fuel processing.

Keywords: Energy manager · Fuel processing · Numerical simulation · Solid oxide fuel cell · Zurich University of Applied Sciences Winterthur

1. Einleitung

Brennstoffzellen gelten als Stromerzeuger der Zukunft. Vor fünf Jahren wurde am damaligen Technikum Winterthur Ingenieurschule (TWI) begonnen, Semester- und Diplomarbeiten zusammen mit dem Paul Scherrer Institut und der Sulzer HEXIS AG durchzuführen [1].

Um die begonnene Arbeit unter den in der Zwischenzeit durch die Umwandlung des TWI in eine Fachhochschule verbesserten Forschungsbedingungen weiterzuführen und der Industrie einen effizienten F&E-Support anbieten zu können, haben die drei Autoren Anfang 2000 mit einem gemeinsamen Kompetenzaufbau begonnen. Dieser Start war dank der finanziellen Unterstützung durch die Stiftung zur Förderung der ZHW möglich.

In der Zwischenzeit wird diese Aktivität mit drei KTI-Projekten weitergeführt (Tab.). Dabei ist bei allen drei Projekten Sulzer HEXIS AG der Industriepartner. Das HEXIS-System ist eine 'Solid Oxide Fuel Cell (SOFC)' für den stationären Bereich zur Erzeugung von 1 kW elektrischer Leistung. In den beteiligten Departementen der ZHW wird wie folgt gearbeitet:

Ziele der Aktivität sind:

- Unterstützung der Hexis Forschungs- und Entwicklungstätigkeit in genau abgesprochenen Bereichen
- Kompetenzaufbau innerhalb der ZHW
- Einfließen lassen der Erkenntnisse in die Diplomausbildung und Weiterbildung
- Mitarbeit von Studenten in Semester- und Diplomarbeiten

Tab. Arbeitsgebiete in den beteiligten Departementen der ZHW

Departement	Thema	Projektleiter	Arbeitskapazität in Personenjahren
Physik und Mathematik	Simulation von Solid Oxide Fuel Cells (SOFC)	Dr. M. Roos	Dozenten: 0.5 Wissenschaftliche Mitarbeiter: 2.5
Maschinenbau, Elektrotechnik	Innovative Methoden zur Steuerung und Analyse von 1 kW _e HEXIS-WKK-Systemen	Prof. Dr. H. Juzi	Dozenten: 1.0 Wissenschaftliche Mitarbeiter: 3.5
Chemie	Aufbereitung von Brennstoffen für die SOFC	T. Spielmann	Dozenten: 0.5 Wissenschaftliche Mitarbeiter: 2.0

*Korrespondenz: T. Spielmann
 Departement Chemie
 Zürcher Hochschule Winterthur
 Postfach 805
 CH-8401 Winterthur
 Tel.: +41 52 267 74 36
 Fax: +41 52 267 74 77
 E-Mail: spl@zhwin.ch

Im folgenden werden die drei Projekte näher beschrieben.

2. Simulation von 'Solid Oxide Fuel Cells'

2.1. Übersicht

Eine Brennstoffzelle vom SOFC-Typ kann als System von gekoppelten Transportprozessen betrachtet werden. Konkret werden diffusive und konvektive Stofftransporte über die elektrochemischen Reaktionen aneinander gekoppelt, ebenso der damit verbundene Ladungstransport. Weiter wird Entropie umgesetzt, welche zusammen mit den irreversiblen Teilprozessen (el. Widerstand, Aktivierung, etc.) zu Wärmetransport führt.

Für einen optimalen Betrieb einer SOFC-Brennstoffzelle müssen alle diese Vorgänge sorgfältig aufeinander abgestimmt werden. Zum Beispiel muss der Wärmehaushalt beachtet werden, um schädliche Temperaturgradienten und die damit verbundenen enormen Materialprobleme beim hohen Temperaturniveau eines SOFC-Stapels zu verhindern. Man kann dieses Verhalten durch Design von Stromsammelplatten und Strömungskanälen zwar stark beeinflussen, jedoch sind gängige Engineeringmethoden wegen der Komplexität ungenügend.

Auf Anregung von Sulzer HEXIS hat sich einer der Autoren (M. Roos) deshalb entschlossen, im Rahmen eines KTI-Projekts numerische Simulationen der

SOFC-Brennstoffzellen auf der Basis der Finite-Elemente-Methode durchzuführen. Mit dem FE-Tool NMSeses der Firma Numerical Modelling GmbH [2] existiert eine Softwarebasis, welche für die industrietaugliche Modellbildung und Simulation von Prozessen und Bauteile entwickelt wurde (Fig. 1). Im Auftrag von Sulzer HEXIS AG und in der Folge unterstützt durch ein KTI-Projekt an der Zürcher Hochschule Winterthur wurde zusätzlich die für den SOFC-Prozess relevanten chemischen, resp. die elektrochemischen Reaktionen in NMSeses implementiert. Heute, kurz vor Abschluss des KTI-Projekts, steht ein leistungsfähiges Softwaretool zur Modellierung von vielen Aspekten einer SOFC-Brennstoffzelle zur Verfügung [3].

2.2. Integrierte Brennstoffaufbereitung durch Steam Reforming

Eine mit Hilfe von numerischer Simulation angegangene Fragestellung ist die integrierte Brennstoffaufbereitung im Stapel. Im zentralen Zuführungsrohr des Stapels steht ein poröser Katalysator, welcher das Methan-Wasserdampfgemisch zu einem wasserstoff- und kohlenmonoxidreichen Gas reformiert. Dieser Prozess, bestehend aus der Steam Reforming und Wassergas Reaktion (Reaktionen (3) und (5) im Kasten), muss mit Wärme versorgt werden, die von der Abwärme der im Stapel ablaufenden elektrochemischen Reaktion, bzw. von der konventionellen Verbrennung des nicht umgesetzten Was-

serstoffs am Stapelaussenmantel stammt. Primäres Ziel ist die vollständige Umsetzung des Methans zu Kohlenmonoxid und Wasserstoff, sowie eine Gleichverteilung des Wasserstoffs über die Stapelachse (Fig. 2).

Bei diesem Modell wird lediglich der zentrale Teil mit dem Katalysator modelliert, die übrigen Systemteile sind mit Hilfe geeigneter Randbedingungen berücksichtigt. Das Konzept des Modellierungswerkzeuges lässt eine individuelle Konfiguration der berücksichtigten Stoffe und der beteiligten Reaktionen zu. Auf diese Art ist es möglich, den Berechnungsaufwand der jeweiligen Aufgabe anzupassen.

2.3. Ausblick

Im weiteren Verlauf des Projekts (und eines angestrebten Nachfolge-Projekts) sollen die verschiedenen Aspekte des numerischen Modells in einen einheitlichen 'Werkzeugkasten' integriert werden. Neben den stationären Betriebszuständen wird schliesslich auch das dynamische Verhalten beim Anfahren oder während Lastwechseln untersucht.

Damit wird es in Zukunft möglich sein, Weiter- und Neuentwicklungen von SOFC-Brennstoffzellen vor dem Prototypenbau zu simulieren und so die Schwachstellen eines Designs rechtzeitig aufzuspüren und zu verbessern. Die somit erzielbaren Kosten- und Zeiteinsparungen rechtfertigen den Aufwand zur Entwicklung der Softwarewerkzeuge.

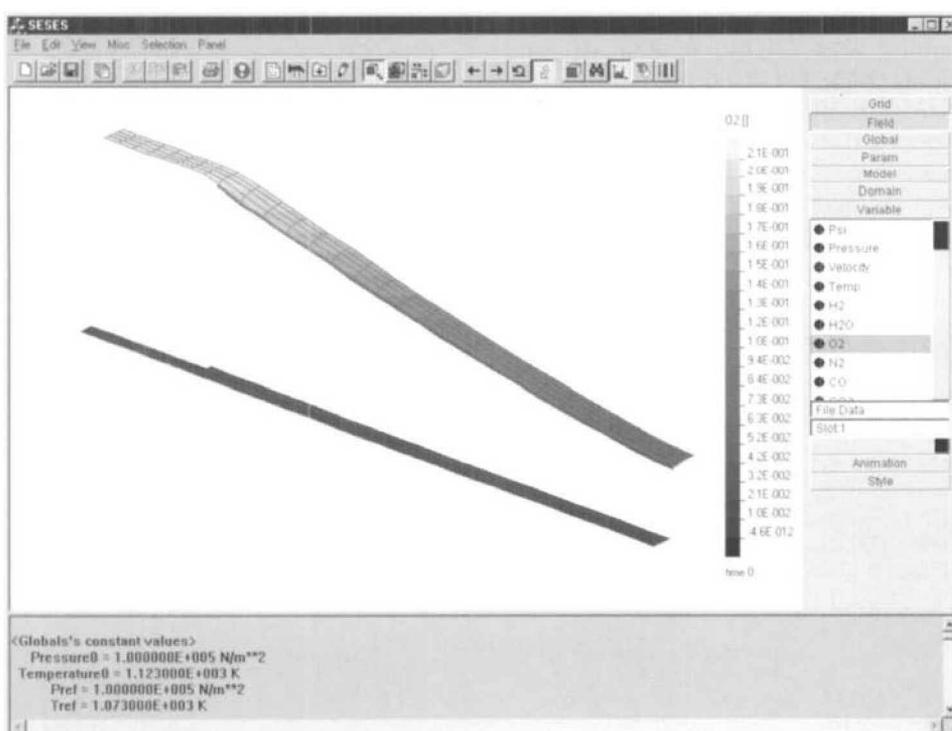


Fig. 1. FEM-Computerwerkzeug NMSeses; die Graphik zeigt die Ortsabhängigkeit des Sauerstoffmolenbruchs im Kathodenkanal

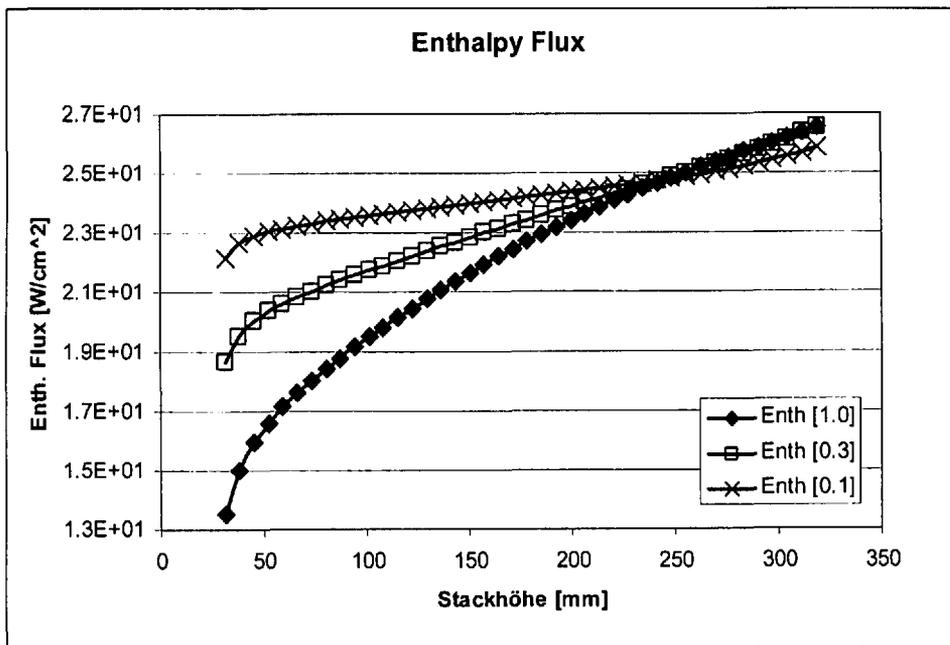


Fig. 2. Enthalpiefluss in den einzelnen Zellen (=Stackhöhe) in Abhängigkeit der Katalysator-tortuosität

3. Innovative Methoden zur Steuerung und Analyse von 1 kWe HEXIS Wärme-Kraft-Kopplung-Systemen

3.1. Übersicht

Das KTI-Projekt mit dem obigen Titel hat zum Ziel, einen Energiemanager zu entwickeln, der einen Kostenoptimalen, benutzerfreundlichen Einsatz der HEXIS-Brennstoffzelle in einem breiten Anwendungsfeld gewährleistet. Mit einer optimalen Bewirtschaftung der vorhandenen Energiespeicher soll dieser Energiemanager die best-mögliche Ausnutzung des Brennstoffes bei den typischen Verbrauchsprofilen eines Einfamilienhauses sicherstellen und damit dem Betreiber dieser Anlage einen hohen wirtschaftlichen Nutzen ermöglichen. Vom Energiemanager wird ferner erwartet, dass er ein breites Spektrum von Einsatzszenarien, Betriebsarten und Randbedingungen abzudecken vermag. Schliesslich soll die Wärme-Kraft-Kopplungsanlage für das Einfamilienhaus einfach zu installieren und zu betreiben sein und dabei

trotzdem den vollen Komfort gewährleisten. Das Erreichen dieser weitgesteckten Ziele bedingt den Einsatz modernster Leittechnik.

3.2. Energiemanager

Zur Entwicklung und Erprobung des neuartigen Energiemanagers wurde dabei folgendes Vorgehen gewählt: Zunächst werden verschiedene erfolgversprechende Leittechnikkonzepte an einem Simulationsmodell der Anlage getestet. Das dynamische Simulationsmodell umfasst dabei neben der eigentlichen Brennstoffzelle den Gas-Wasser Wärmetauscher am Austritt der Brennstoffzellen, die im System vorhandenen Wärmespeicher und Warmwasserspeicher sowie das Wohnhaus mit seiner Heizungsanlage (Fig. 3).

Mittels typischer Verbraucherspektren für Strom und Wärme wird dann an diesem Simulationsmodell das beste Konzept evaluiert und anschliessend in einer Pilotanlage im Massstab 1:1 erprobt.

3.3. Projektorganisation

Am Projekt sind neben dem Industriepartner Sulzer HEXIS AG vier Dozenten und zwei wissenschaftliche Mitarbeiter der Zürcher Hochschule Winterthur beteiligt. Zudem werden laufend Studierende in Projekt- und Diplomarbeiten mit Teilaufgaben eingebunden. Ein Mitarbeiter von Sulzer Infra sorgt für die Gesamtkoordination.

Die Mitarbeiter des Departements Maschinenbau und Energietechnik sind dabei verantwortlich für den Aufbau des Simulationsmodells, ein Team des Departements Elektrotechnik für die Entwicklung der innovativen Leittechnik.

Beim Simulationsmodul 'Brennstoffzelle' ergibt sich zudem eine Querverbindung mit dem KTI-Projekt 'Simulation von SOFC'. Das Projekt wurde am 1. November 2000 gestartet und soll in zwei Jahren abgeschlossen werden.

4. Aufbereitung von Brennstoffen für die SOFC

4.1. Übersicht

Brennstoffe, wie Erdgas, Biogas, Flüssiggas oder Heizöl müssen aufbereitet werden, um bei der Oxidation im Stapel Russbildung zu vermeiden, welche die Stromausbeute massiv verringern würde. Für den wirtschaftlichen Betrieb von Brennstoffzellen ist eine stabile und optimierte Aufbereitung Voraussetzung. Diese kann durch 'Steam Reforming', 'Catalytic Partial Oxidation' oder einer Kombination von beiden geschehen.

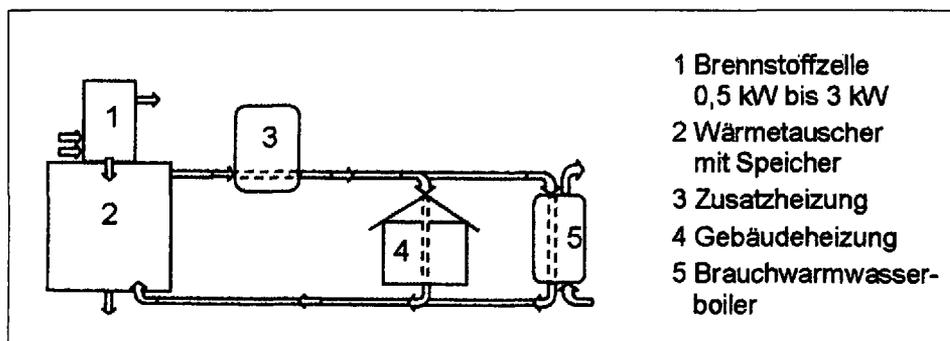


Fig. 3. Anlagekomponenten des Simulationsmodells zur Evaluation und Optimierung des Energiemanagers

4.2. 'Catalytic Partial Oxidation' von Erdgas

In Absprache mit Sulzer HEXIS wurde am Dept. Chemie der ZHW mit der Untersuchung der Erdgasaufbereitung durch 'Catalytic Partial Oxidation' (CPO) begonnen [4]. Die auftretenden Reaktionen bei der CPO von Methan sind im Kasten zusammengestellt.

Bei der CPO von Erdgas soll eine möglichst hohe Umsetzung des Methans zu Kohlenmonoxid und Wasserstoff aber keine Russbildung stattfinden, wozu be-

vorzugt metallische Katalysatoren (Fe, Ru, Os, Co, Rh, Ir, Ni, Pd, Pt) eingesetzt werden.

Für praktische Untersuchungen wurde anfangs 2000 ein Prüfstand mit automatischer Datenerfassung, Steuerung und Regelung sowie Gasanalyse mittels Gaschromatograph aufgebaut (Fig. 4). Um die Sicherheit zu gewährleisten, wurde in der Konzeptionsphase eine umfassende Risikoanalyse durchgeführt und daraus die notwendigen Massnahmen abgeleitet und in den Prüfstand integriert.

4.3. Erste Resultate

Seit Beginn des Projekts wurden zwölf Katalysatoren auf Methanumsatz, Verhalten bezüglich stabiler Fahrweise und Russbildung sowie mechanischer Festigkeit untersucht. Infolge der Vereinbarung mit Sulzer HEXIS AG wird hier nur grob auf die Ergebnisse eingegangen.

Mit dem geeignetsten Katalysator konnte bei 850 °C Reaktionstemperatur beinahe der thermodynamisch mögliche Umsatz von 98% erreicht werden. Einige der getesteten Katalysatoren neigten zur

Reaktionen bei der 'Catalytic Partial Oxidation'

CPO von Methan

Brutto-Reaktion:



Nebenreaktionen:

Wird ein Teil des Methans totaloxidiert, so entstehen neben den Zielprodukten Wasserstoff und Kohlenmonoxid auch noch Wasserdampf und Kohlendioxid:



Methan, welches nicht umgesetzt ist, kann mit Wasserdampf und/oder Kohlendioxid reagieren:



Das Produktgas ist dem Gleichgewicht der Konvertierungsreaktion unterworfen:



Neben diesen Reaktionen kann es auch zur Bildung von Kohlenstoff kommen. Dieser kann anschliessend auch wieder weiter reagieren:



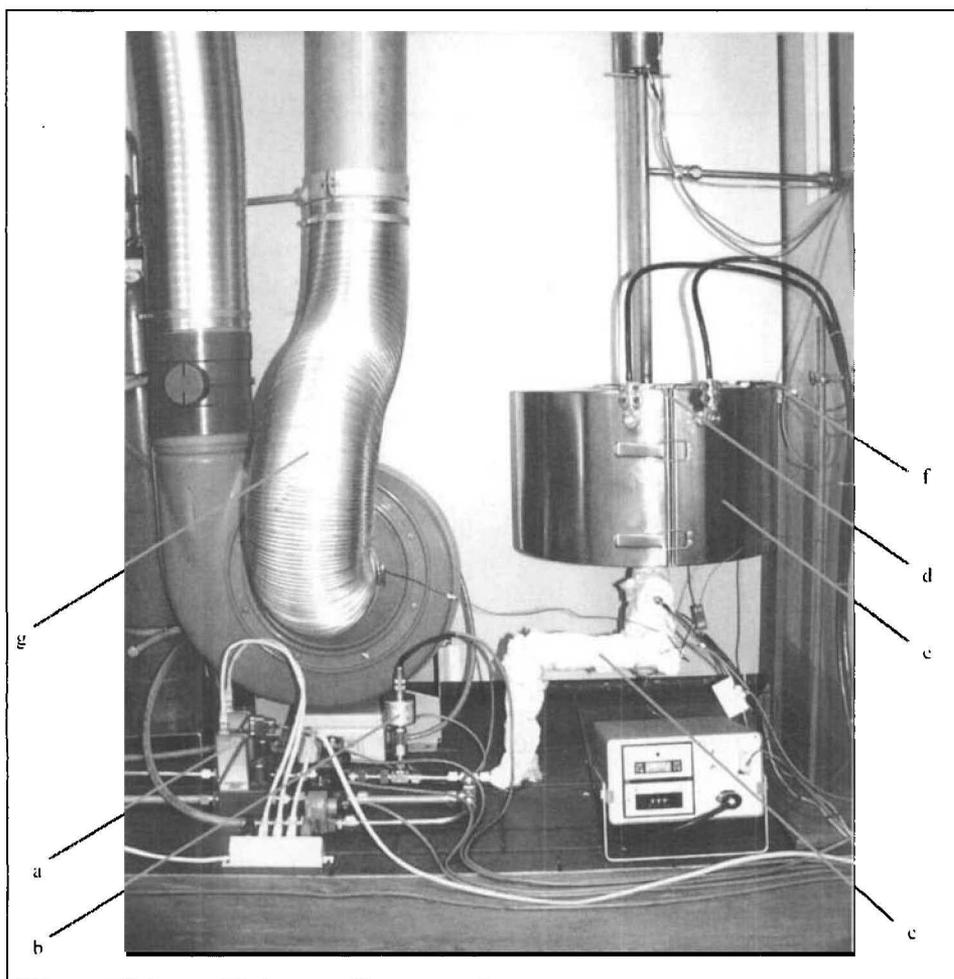


Fig. 4. Prüfstand zur Untersuchung der Brennstoffaufbereitung. Wichtige Komponenten sind die Massenflusskontroller (a), der Drucksensor (b), die Gasstromheizung (c), der Reaktor und Katalysatorträger (d), die Reaktorheizung (e), die Thermolemente (f) und die Abluftventilation (g).

Russbildung, vereinzelt so stark, dass diese spröde wurden und beim Ausbau auseinander brachen.

Bei den getesteten Katalysatoren wurde eine Umsatzeinbusse bei Verwendung von schwefelhaltigem Erdgas festgestellt. Die Zugabe von bis zu 50 Vol. % Kohlendioxid, was einer groben Biogas-Modellmischung entspricht, verursachte eine leichte Reduktion des Methanumsatzes.

4.4. Ausblick

Das KTI-Projekt dauert noch bis Ende 2002. Gegenwärtig wird ein zweiter Prüfstand aufgebaut, um das Langzeitverhalten der Aufbereitung von Erdgas, Flüssiggas und Biogas mit variabler Zusammensetzung zu untersuchen. Dabei hat wiederum die Sicherheit oberste Priorität. Parallel dazu wird abgeklärt, wie weit die Brennstoffaufbereitung durch rechnerische Simulation optimiert werden kann.

In das Projekt werden auch Studierende einbezogen. Letztes Jahr wurden eine Semesterarbeit und eine Diplomarbeit [5] unter dem Thema 'Bioethanol als Brennstoff für die SOFC' erfolgreich durchgeführt. Dieses Jahr werden je ein Student

aus den Departementen Chemie und Physik die Optimierung der Erdgasaufbereitung durch Modellierung und Simulation mit experimenteller Validierung untersuchen.

Die Planung ist darauf ausgerichtet, dass die Prüfstände auch nach dem Jahre 2002 für katalytische Gasphasenreaktionen eingesetzt werden.

Eingegangen am 2. März 2001

- [1] H.G. Bührer, H.B. Winzeler, 'Brennstoffzellen als Beispiel für den Technologietransfer am TWI', *Chimia* **1996**, 52, 570.
- [2] E. Anderheggen et al., NM-Seses User Manual, NM Numerical Modelling GmbH, Alte Landstrasse 88, CH-8800 Thalwil (1995–2001) (<http://www.nmtec.ch>).
- [3] M. Roos, 'Numerical Modelling of HEXIS SOFC with FEM', in 'Proceedings of IEA-Topical Meeting (Annex XIII SOFC) at Saltsjobadet, IEA-Meeting on SOFC-Modelling', Ystad Sweden, 2000.
- [4] C.R.H. de Smet, 'Partial Oxidation of Methane to Synthesis Gas', Eigenverlag Technische Universiteit Eindhoven, 2000 (ISBN 90-386-29214).
- [5] S. Brülisauer, 'Bioethanol als Brennstoff für SOFC', Diplomarbeit ZHW, 2000.